



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0131399
(43) 공개일자 2017년11월29일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 19/54 (2006.01) *C09K 19/12* (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01) *C09K 19/20* (2006.01)
C09K 19/30 (2006.01) *C09K 19/32* (2006.01)
C09K 19/34 (2006.01) *C09K 19/38* (2006.01)
G02F 1/13 (2006.01) *G02F 1/1337* (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C09K 19/54 (2013.01)
C09K 19/12 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2017-7025548
- (22) 출원일자(국제) 2016년02월18일
 심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2017년09월11일
- (86) 국제출원번호 PCT/JP2016/054695
- (87) 국제공개번호 WO 2016/152340
 국제공개일자 2016년09월29일
- (30) 우선권주장
 JP-P-2015-061521 2015년03월24일 일본(JP)

- (71) 출원인
제이엔씨 주식회사
 일본 도쿄도 치요다쿠 오테마치 2초메 2반 1고
제이엔씨 석유 화학 주식회사
 일본국 도쿄도 지요다쿠 오테마치 2초메 2반 1고
- (72) 발명자
마쓰다 나오코
 일본 지바켄 이치하라시 고이카이간 5-1 제이엔씨
 석유 화학 주식회사 이치하라 겐큐쇼내
사이토 마사유키
 일본 지바켄 이치하라시 고이카이간 5-1 제이엔씨
 석유 화학 주식회사 이치하라 겐큐쇼내
- (74) 대리인
유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 28 항

(54) 발명의 명칭 **액정 조성물 및 액정 표시 소자**

(57) 요약

중합성 화합물(또는 그의 중합체) 및 극성 화합물을 포함하고, 이들 화합물의 작용에 의해 액정 분자의 수직 배향을 달성 가능한 액정 조성물, 이 조성물을 함유하는 액정 표시 소자를 제공한다. 이 조성물은, 높은 상한 온도, 낮은 하한 온도, 작은 점도, 적절한 광학 이방성, 양(+)으로 큰 유전율 이방성, 큰 비저항, 자외선 또는 열에 대한 높은 안정성, 큰 탄성 상수 등의 특성에 있어서, 1개 이상의 특성을 충족하거나 또는 2개 이상의 특성에 대하여 적절한 밸런스를 가진다. 제1 첨가물로서 중합성 화합물, 및 제2 첨가물로서 극성 화합물을 함유하고, 양의 유전율 이방성을 가지는 네마틱 액정 조성물이며, 이 조성물은, 양으로 큰 유전율 이방성을 가지는 특정한 액정성 화합물 및 높은 상한 온도 또는 작은 점도를 가지는 특정한 액정성 화합물을 함유할 수도 있고, 그리고 이 조성물을 함유하는 액정 표시 소자이다.

(52) CPC특허분류

C09K 19/14 (2013.01)

C09K 19/20 (2013.01)

C09K 19/30 (2013.01)

C09K 19/32 (2013.01)

C09K 19/34 (2013.01)

C09K 19/38 (2013.01)

G02F 1/13 (2013.01)

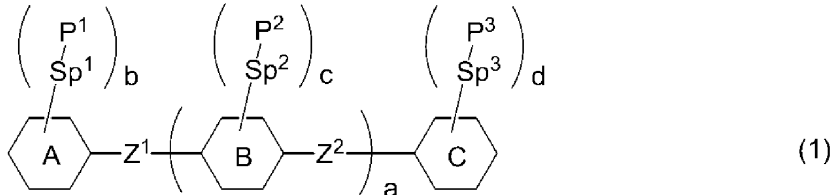
G02F 1/1337 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

제1 첨가물로서 하기 식(1)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 중합성 화합물을 함유하고, 제2 첨가물로서 1개 이상의 극성(極性) 화합물을 함유하고, 그리고 양(+)의 유전율 이방성(異方性)을 가지는, 액정 조성물:

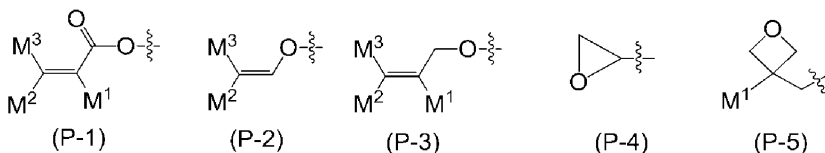


상기 식(1)에 있어서, 환 A 및 환 C는 독립적으로, 시클로헥실, 시클로헥세닐, 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 테트라하이드로피란-2-일, 1,3-디옥산-2-일, 피리미딘-2-일, 또는 피리딘-2-일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있고; 환 B는, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 1,4-페닐렌, 나프탈렌-1,2-디일, 나프탈렌-1,3-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 나프탈렌-1,5-디일, 나프탈렌-1,6-디일, 나프탈렌-1,7-디일, 나프탈렌-1,8-디일, 나프탈렌-2,3-디일, 나프탈렌-2,6-디일, 나프탈렌-2,7-디일, 테트라하이드로피란-2,5-디일, 1,3-디옥산-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 또는 피리딘-2,5-디일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있고; Z¹ 및 Z²는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는 -O-, -CO-, -COO-, 또는 -OCO-로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 -CH₂-CH₂-는 -CH=CH-, -C(CH₃)=CH-, -CH=C(CH₃)-, 또는 -C(CH₃)=C(CH₃)-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; P¹, P² 및 P³는 중합성기이며; Sp¹, Sp² 및 Sp³는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는 -O-, -COO-, -OCO-, 또는 -OCOO-로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 -CH₂-CH₂-는 -CH=CH- 또는 -C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; a는 0, 1, 또는 2이며; b, c 및 d는 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; 단, 환 A 및 환 C가 페닐일 때, a는 1 또는 2이며, 그리고 a가 1일 때, Sp¹ 및 Sp³는 단결합임.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 식(1)에 있어서, P¹, P² 및 P³가 독립적으로, 하기 식(P-1)~식(P-5)으로 표시되는 기의 군으로부터 선택된 중합성기인, 액정 조성물:

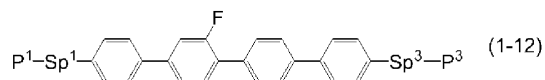
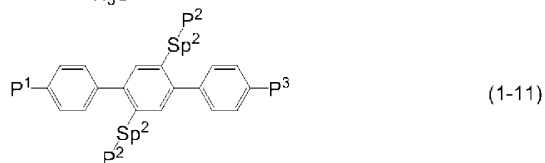
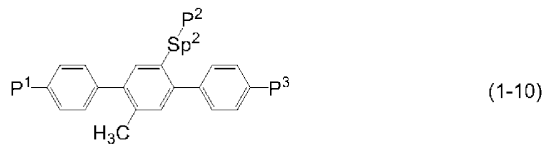
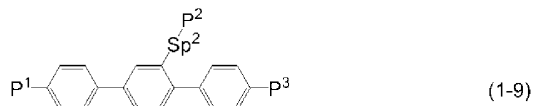
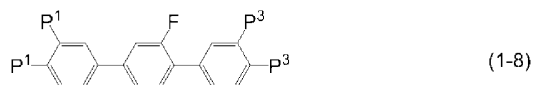
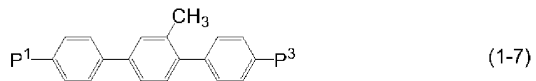
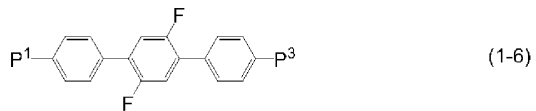
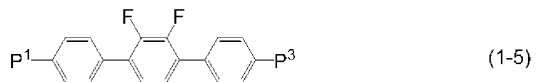
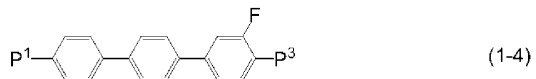
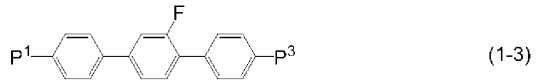
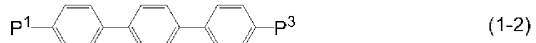
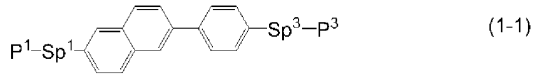


상기 식(P-1)~식(P-5)에 있어서, M¹, M² 및 M³는 독립적으로, 수소, 불소, 탄소수 1~5의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~5의 알킬임.

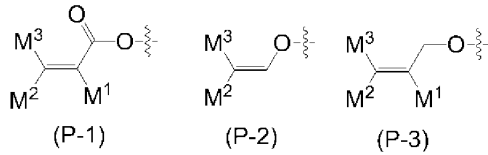
청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,

제1 첨가물이 하기 식(1-1)~식(1-12)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 중합성 화합물인, 액정 조성물:



상기 식(1-1)~식(1-12)에 있어서, P¹, P² 및 P³는 독립적으로, 하기 식(P-1)~식(P-3)으로 표시되는 기의 군으로부터 선택된 중합성기이며, 여기서 M¹, M² 및 M³는 독립적으로, 수소, 불소, 탄소수 1~5의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~5의 알킬이며;



Sp¹, Sp² 및 Sp³는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는 -O-, -COO-, -OCO-, 또는 -OCOO-로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 -CH₂-CH₂-는 -CH=CH- 또는 -C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있음.

청구항 4

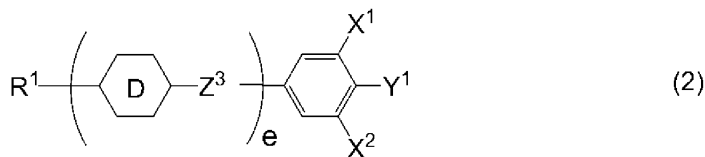
제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,

액정 조성물의 중량을 기준으로, 제1 첨가물의 비율이 0.03 중량%~10 중량%의 범위인, 액정 조성물.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

제1 성분으로서 하기 식(2)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 액정 조성물:

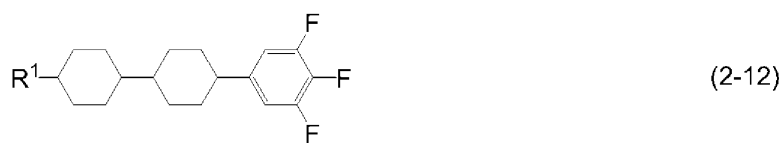
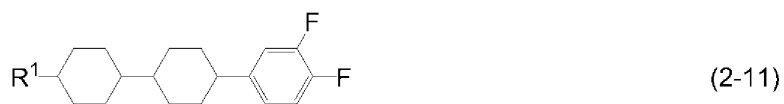
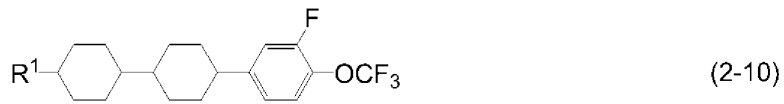
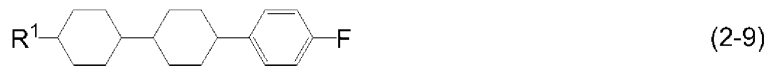
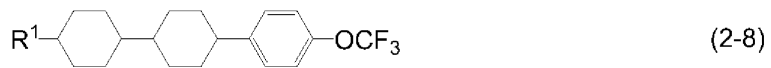


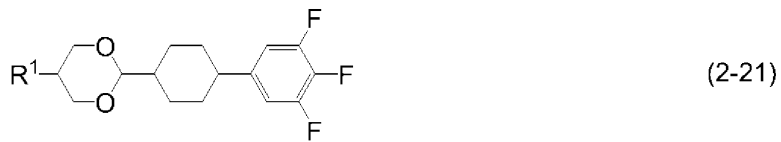
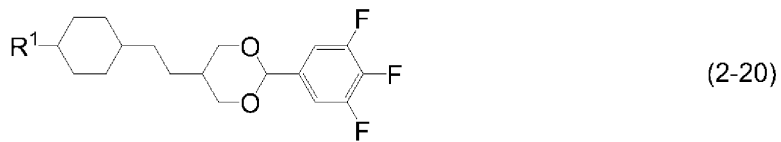
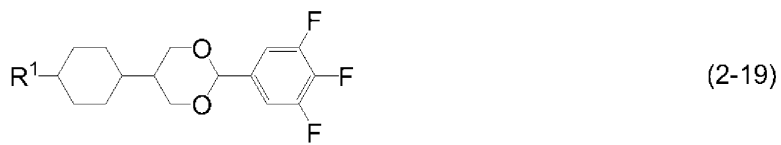
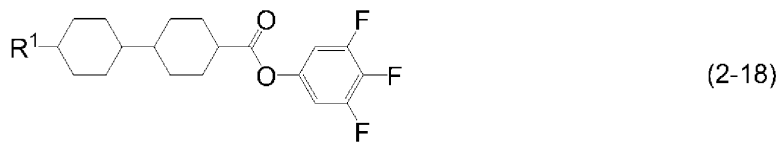
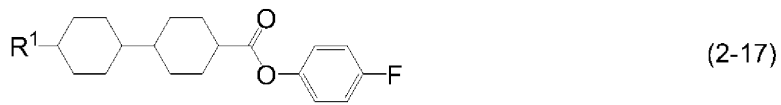
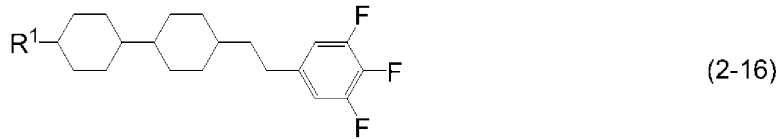
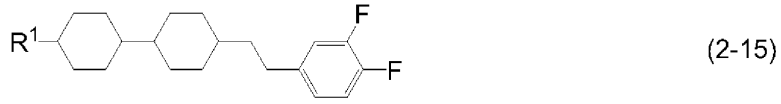
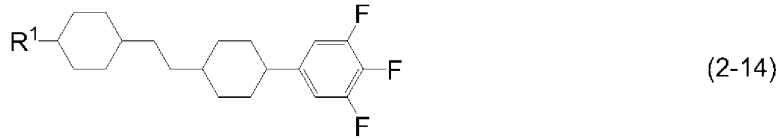
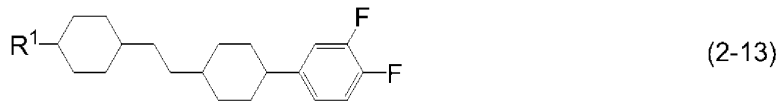
상기 식(2)에 있어서, R¹은, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이며; 환 D는, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2,6-디플루오로-1,4-페닐렌, 3,5-디플루오로-1,4-페닐렌, 피리미딘-2,5-디일, 1,3-디옥산-2,5-디일, 또는 테트라하이드로피란-2,5-디일이며; Z³는 단결합, -CH₂CH₂-, -CH₂O-, -OCH₂-, -COO-, -OCO-, -CF₂O-, 또는 -OCF₂-이며; X¹ 및 X²는 독립적으로, 수소 또는 불소이며; Y¹은, 불소, 염소, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐 옥시이며; e는 1, 2, 3, 또는 4임.

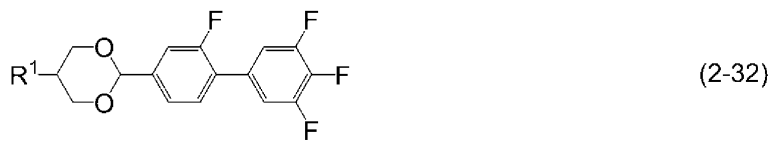
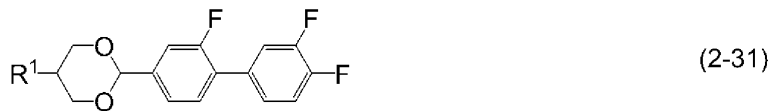
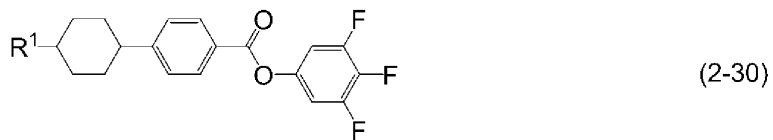
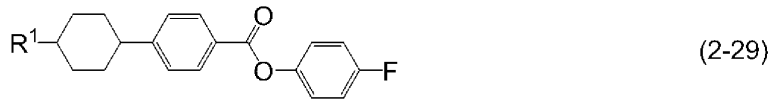
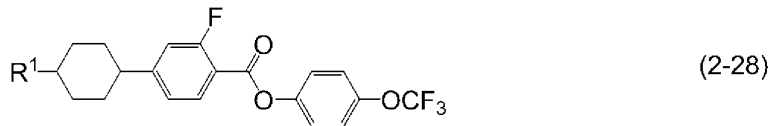
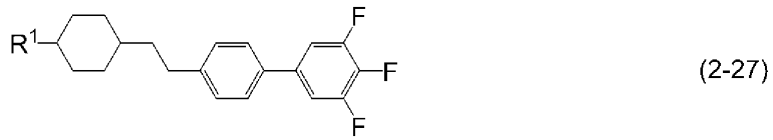
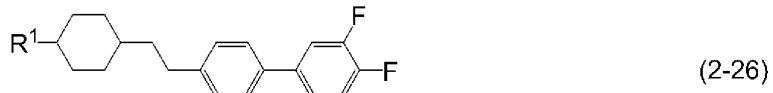
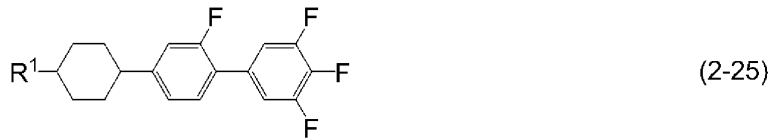
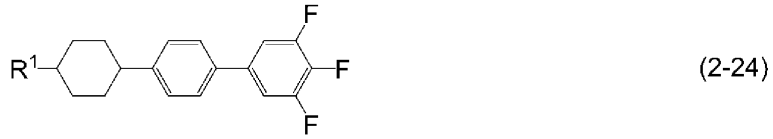
청구항 6

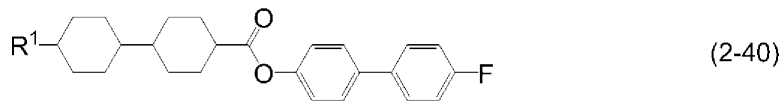
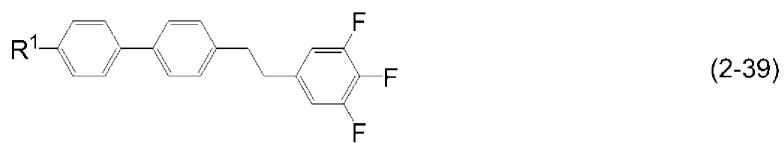
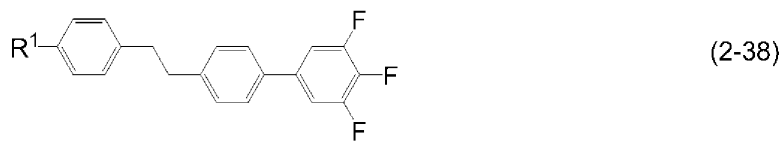
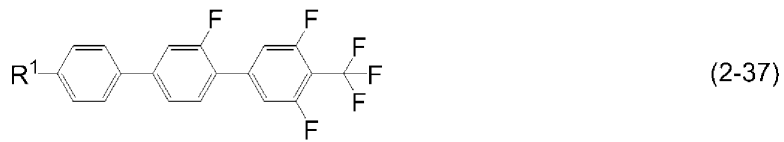
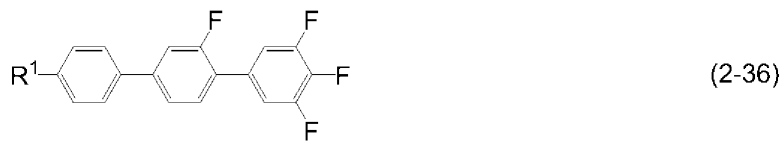
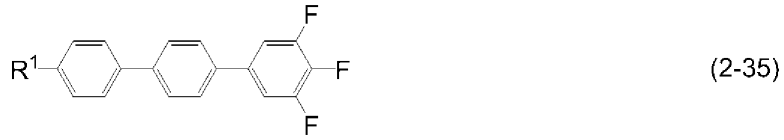
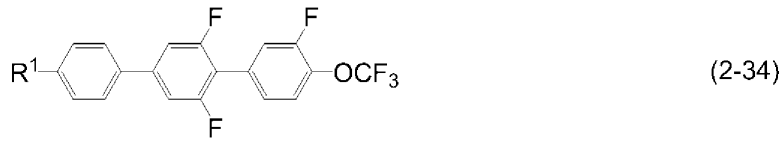
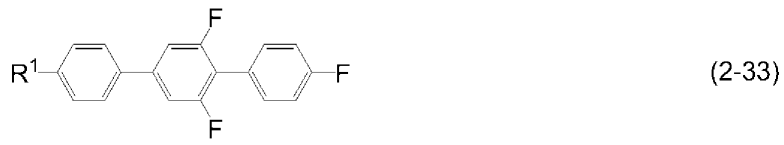
제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서,

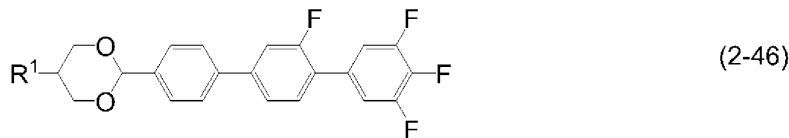
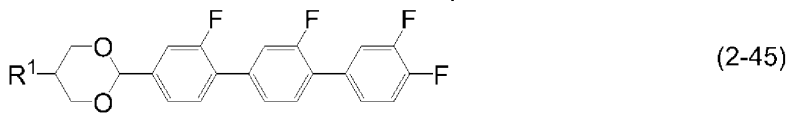
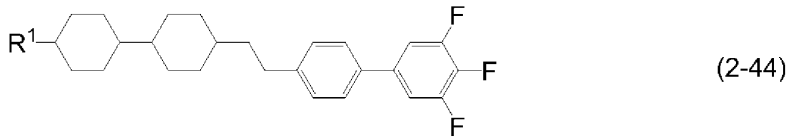
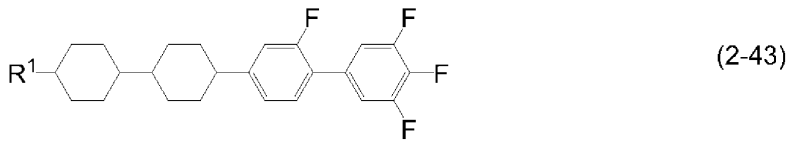
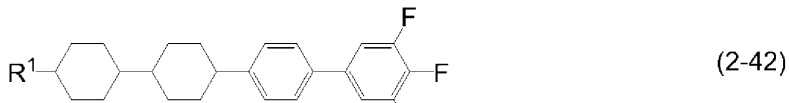
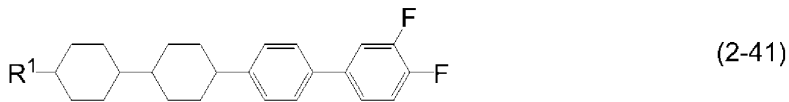
제1 성분으로서 하기 식(2-1)~식(2-46)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 액정 조성물:











상기 식(2-1)~식(2-46)에 있어서, R¹은, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐임.

청구항 7

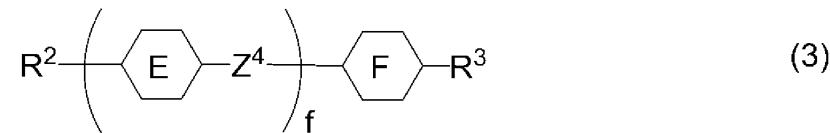
제5항 또는 제6항에 있어서,

액정 조성물의 중량을 기준으로, 제1 성분의 비율이 10 중량%~90 중량%의 범위인, 액정 조성물.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

제2 성분으로서 하기 식(3)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 액정 조성물:



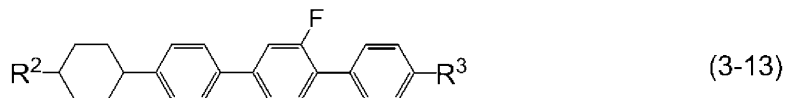
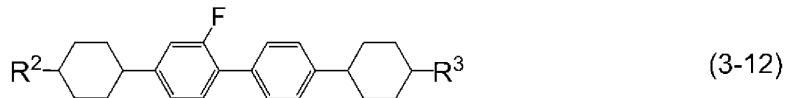
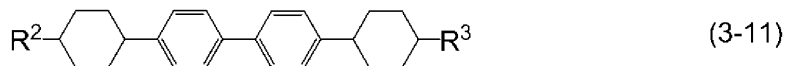
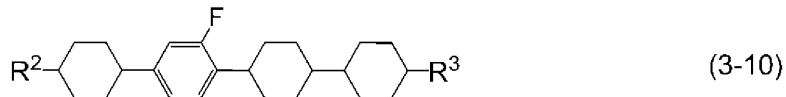
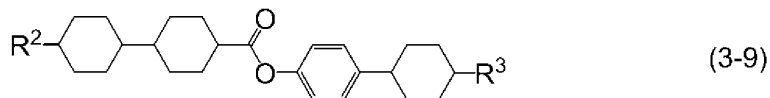
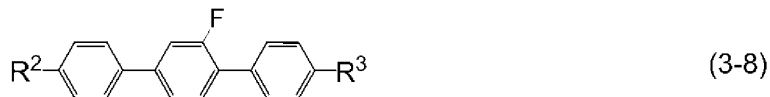
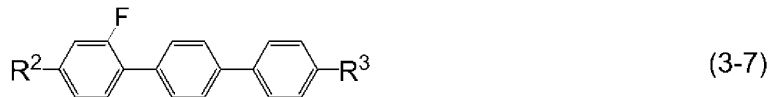
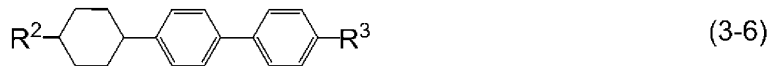
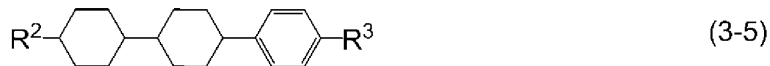
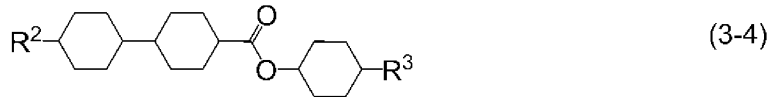
상기 식(3)에 있어서, R² 및 R³는 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이며; 환 E 및 환 F는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 또는 2,5-디플루오로-1,4-페닐렌이며; Z⁴는 단결합, -CH₂CH₂-, -CH₂O-, -OCH₂-, -COO-, 또는 -OCO-이며; f는 1, 2, 또는 3임.

청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 있어서,

제2 성분으로서 하기 식(3-1)~식(3-13)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하

는, 액정 조성물:



상기 식(3-1)~식(3-13)에 있어서, R² 및 R³는 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐임.

청구항 10

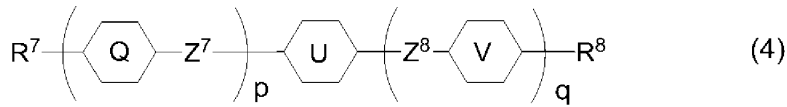
제8항 또는 제9항에 있어서,

액정 조성물의 중량을 기준으로, 제2 성분의 비율이 10 중량%~90 중량%의 범위인, 액정 조성물.

청구항 11

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서,

제3 성분으로서 하기 식(4)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 액정 조성물:

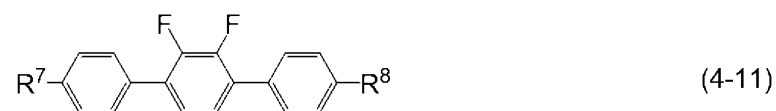
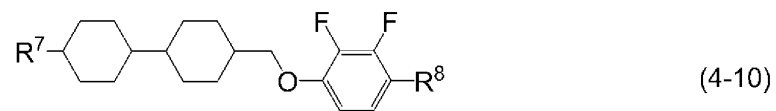
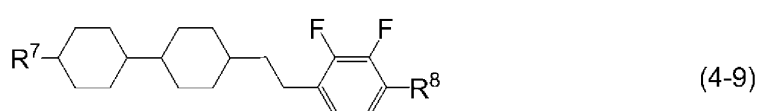
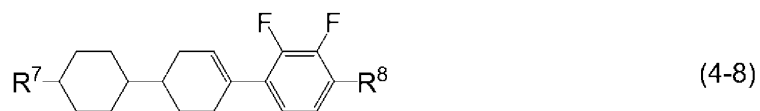
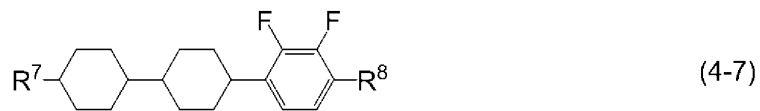
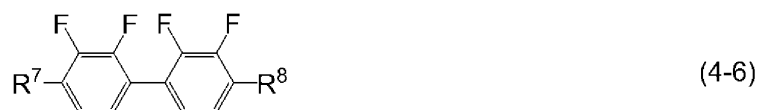
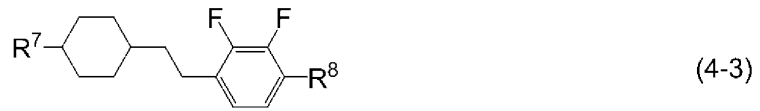


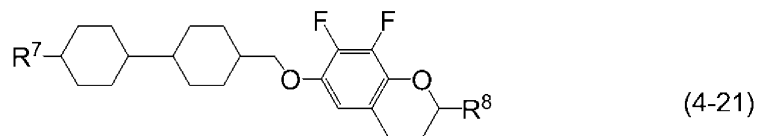
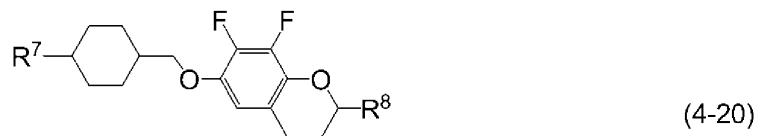
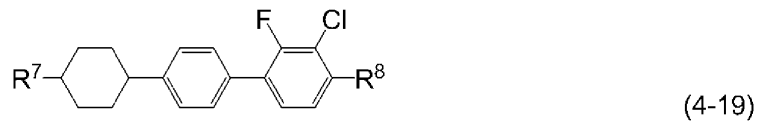
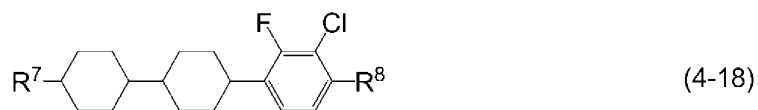
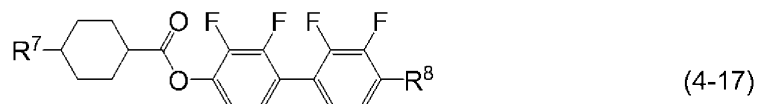
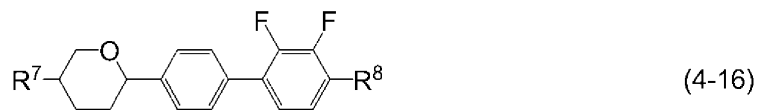
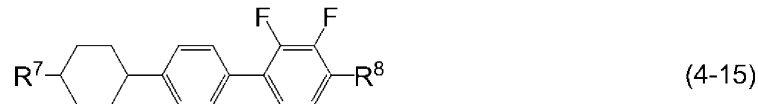
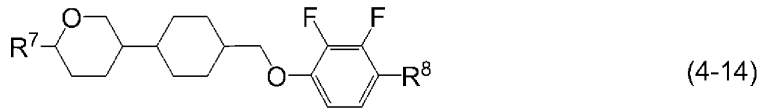
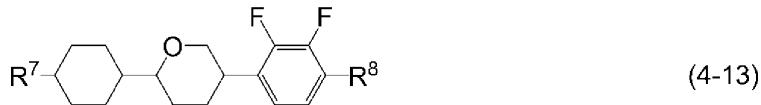
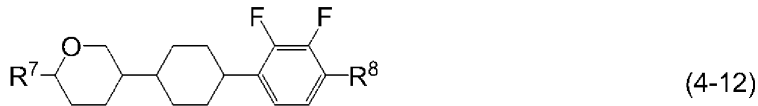
상기 식(4)에 있어서, R^7 및 R^8 은 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 탄소수 2~12의 알케닐옥시이며; 환 Q 및 환 V는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 1,4-페닐렌, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 1,4-페닐렌, 또는 테트라하이드로피란-2,5-디일이며; 환 U는, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2-클로로-3-플루오로-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-5-메틸-1,4-페닐렌, 3,4,5-트리플루오로나프탈렌-2,6-디일, 또는 7,8-디플루오로크로만-2,6-디일이며; Z^7 및 Z^8 은 독립적으로, 단결합, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{COO}-$, 또는 $-\text{OCO}-$ 이며; p는 1, 2, 또는 3이며, q는 0 또는 1이며; p와 q의 합은 3 이하임.

청구항 12

제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 있어서,

제3 성분으로서 하기 식(4-1)~식(4-21)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 액정 조성물:





상기 식(4-1)~식(4-21)에 있어서, R⁷ 및 R⁸은 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 탄소수 2~12의 알케닐옥시임.

청구항 13

제11항 또는 제12항에 있어서,

액정 조성물의 중량을 기준으로, 제3 성분의 비율이 3 중량%~25 중량%의 범위인, 액정 조성물.

청구항 14

제1항 내지 제13항 중 어느 한 항에 있어서,

제2 첨가물이, 질소, 산소, 유황 및 인으로부터 선택된 헤테로 원자를 가지는 극성기를 가지는 극성 화합물인,

액정 조성물.

청구항 15

제1항 내지 제14항 중 어느 한 항에 있어서,

제2 첨가물로서 하기 식(5) 및 식(6)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 극성 화합물을 함유하는, 액정 조성물:

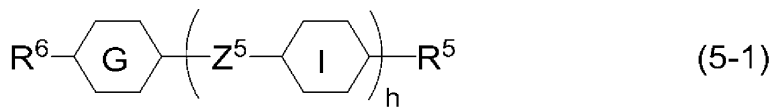


상기 식(5)에 있어서, MES는 1개 이상의 환을 가지는 메소겐기이며; 식(6)에 있어서, R⁴는 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; 식(5) 및 식(6)에 있어서, R⁵는, OH 구조의 산소 원자, SH 구조의 유황 원자, 및 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자 중 하나 이상을 가지는 극성기이며; g는 1 또는 2임.

청구항 16

제1항 내지 제15항 중 어느 한 항에 있어서,

제2 첨가물로서 하기 식(5-1)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 액정 조성물:



상기 식(5-1)에 있어서, 환 G 및 환 I는 독립적으로, 탄소수 6~25의 방향족기, 탄소수 5~25의 복소방향족기, 탄소수 3~25의 지환식기, 또는 탄소수 4~25의 복소 지환식기이며, 이들 기는 축합환이라도 되고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 기 T로 치환될 수도 있고, 여기서 기 T는, -OH, -(CH₂)_i-OH, 할로젠, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, -N(R⁰)₂, -(CH₂)_i-N(R⁰)₂, 탄소수 6~20의 아릴, 탄소수 6~20의 헤테로아릴, 탄소수 1~25의 알킬, 탄소수 1~25의 알콕시, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐, 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐옥시, 또는 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐옥시이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는 1, 2, 3, 또는 4이며; Z⁵는, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -(CH₂)_i-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -(CF₂)_i-, -CH=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, -CH=CH-CO-, -OCO-CH=CH-, -C(R⁰)₂, 또는 단결합이며, 여기서 R⁰는 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는 1, 2, 3, 또는 4이며; R⁵는 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -OCOO-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 단 R⁵는, OH 구조의 산소 원자, SH 구조의 유황 원자, 또는 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자 중 하나 이상을 가지고; R⁶는 수소, 할로젠, 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는 수소 또는

탄소수 1~12의 알킬이며; h는 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5임.

청구항 17

제1항 내지 제15항 중 어느 한 항에 있어서,

제2 첨가물로서 하기 식(6-1)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 극성 화합물을 함유하는, 액정 조성물:

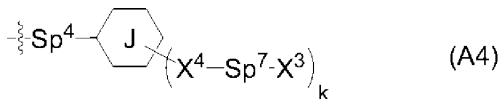
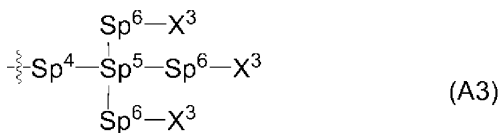
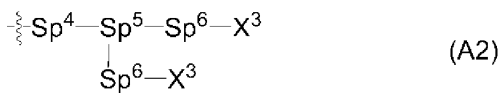
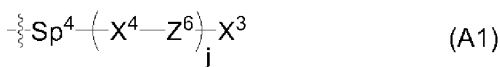


상기 식(6-1)에 있어서, R⁴는 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; R⁵는 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -OCOO-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 단 R⁵는, OH 구조의 산소 원자, SH 구조의 유황 원자, 및 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자 중 하나 이상을 가짐.

청구항 18

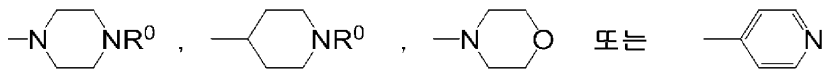
제15항 내지 제17항 중 어느 한 항에 있어서,

제15항에 기재된 식(5) 및 식(6)에 있어서, R⁵가 하기 식(A1)~식(A4) 중 어느 하나로 표시되는 기인, 액정 조성물.



상기 식(A1)~식(A4)에 있어서, Sp⁴, Sp⁶ 및 Sp⁷은 독립적으로, 단결합 또는 기(-Sp''-X''-)이며, 여기서, Sp''는 탄소수 1~20의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서 1개 이상의 -CH₂-는, -O-, -S-, -NH-, -N(R⁰)-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, -S-CO-, -CO-S-, -N(R⁰)-CO-O-, -O-CO-N(R⁰)-, -N(R⁰)-CO-N(R⁰)-, -CH=CH-, 또는 -C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 또는 -CN으로 치환될 수도 있고, 그리고 X''는, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, -CO-N(R⁰)-, -N(R⁰)-CO-, -N(R⁰)-CO-N(R⁰)-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -CF₂CF₂-, -CH=N-, -N=CH-, -N=N-, -CH=CR⁰-, -CY²=CY³-, -C≡C-, -CH=CH-CO-O-, -O-CO-CH=CH-, 또는 단결합이며, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, Y² 및 Y³는 독립적으로, 수소, 불소, 염소, 또는 -CN이며; Sp⁵는 >CH-, >CR¹¹-, >N-,

또는 >C<이며; X³는 -OH, -OR¹¹, -COOH, -NH₂, -NHR¹¹, -NR¹¹₂, -SH, -SR¹¹,

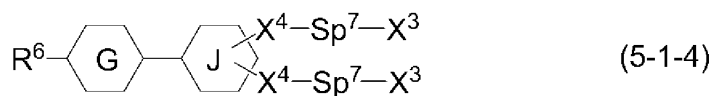
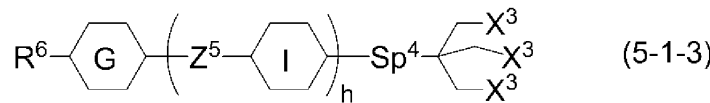
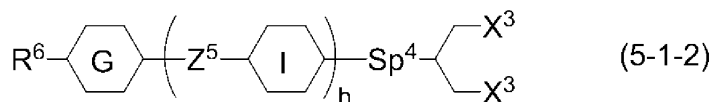
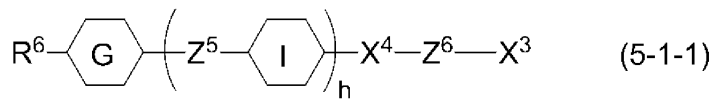


이며, 여기서 R⁰는 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며; X⁴는 -O-, -CO-, -NH-, -NR¹¹-, -S-, 또는 단결합이며; Z⁶는, 탄소수 1~15의 알킬렌, 탄소수 5 또는 6의 지환식기, 또는 이들의 조합이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, -OH, -OR¹¹, -COOH, -NH₂, -NHR¹¹, -N(R¹¹)₂, 불소, 또는 염소로 치환될 수도 있고; R¹¹은 탄소수 1~15의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는 -C≡C-, -CH=CH-, -COO-, -OCO-, -CO-, 또는 -O-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; 환 J는 탄소수 6~25의 방향족기 또는 탄소수 3~25의 지환식기이며, 이들 기는 축합환이라도 되고, 이들 기에 있어서 1개~3개의 수소는 R^l로 치환될 수도 있고; R^l은, -OH, -(CH₂)_i-OH, 불소, 염소, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, -N(R⁰)₂, -(CH₂)_i-N(R⁰)₂, -SH, -SR⁰, 탄소수 6~20의 아릴, 탄소수 6~20의 헤테로아릴, 탄소수 1~25의 알킬, 탄소수 1~25의 알콕시, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐, 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐옥시, 또는 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐옥시이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는 1, 2, 3, 또는 4이며; j는 0, 1, 2, 또는 3이며; k는 2, 3, 4, 또는 5임.

청구항 19

제16항에 있어서,

제2 첨가물이 하기 식(5-1-1)~식(5-1-4)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물인, 액정 조성물:



상기 식(5-1-1)~식(5-1-4)에 있어서, 환 G 및 환 I는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,3-페닐렌, 2-에틸-1,4-페닐렌, 2,6-디에틸-1,4-페닐렌, 2-트리플루오로메틸-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2,5-디플루오로-1,4-페닐렌, 2,6-디플루오로-1,4-페닐렌, 또는 2,3,5,6-테트라플루오로-1,4-페닐렌이며; 환 J는 시클로헥실 또는 페닐이며; Z⁵는 단결합, -CH₂CH₂-, -COO-, 또는 -OCO-이며; Z⁶는, 단결합, 탄소수 1~15의 알킬렌, 탄소수 5 또는 6의 지환식기, 또는 이들의 조합이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, -OH, -OR¹¹, -COOH, -NH₂, -NHR¹¹, -N(R¹¹)₂, 불소, 또는 염소로 치환될 수도 있고, R¹¹은 탄소수 1~15의 알킬이며, 이 알킬에 있어서 1개 이상의 -CH₂-는, -C≡C-, -CH=CH-, -COO-, -OCO-, -CO-, -O-, 또는 -NH-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; Sp⁴

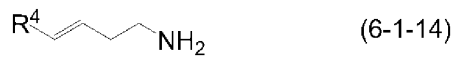
는 단결합, 에틸렌, 프로필렌, 또는 메틸렌옥시이며; Sp^7 은 단결합, 또는 탄소수 1~5의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서 $-CH_2-$ 는 $-O-$ 또는 $-NH-$ 로 치환될 수도 있고; R^6 는 탄소수 1~8의 알킬 또는 불소이며; h는 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5이며; X^3 는 $-OH$, $-COOH$, $-SH$, $-OCH_3$, 또는 $-NH_2$ 이며; X^4 는 단결합 또는 $-O-$ 임.

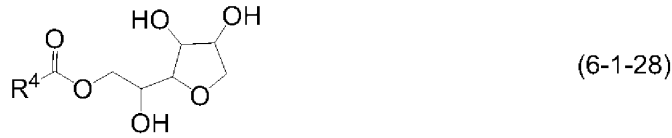
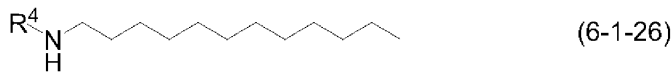
청구항 20

제17항에 있어서,

제2 첨가물이 하기 식(6-1-1)~식(6-1-29)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물인, 액정 조성물:







상기 식(6-1-1)~식(6-1-29)에 있어서, R⁴는 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있음.

청구항 21

제1항 내지 제20항 중 어느 한 항에 있어서,

액정 조성물의 중량을 기준으로, 제2 첨가물의 비율이 10 중량% 미만인, 액정 조성물.

청구항 22

제1항 내지 제21항 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물을 함유하는, 액정 표시 소자.

청구항 23

제22항에 있어서,

액정 표시 소자의 동작 모드가, IPS 모드, TN 모드, FFS 모드, 또는 FPA 모드이며, 액정 표시 소자의 구동 방식이 액티브 매트릭스 방식인, 액정 표시 소자.

청구항 24

제1항 내지 제21항 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물을 함유하고, 이 액정 조성물 중의 중합성 화합물이 중합된, 고분자 지지 배향형 액정 표시 소자.

청구항 25

제1항 내지 제21항 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물을 함유하고, 이 액정 조성물 중의 중합성 화합물이 중합된, 배향막을 가지고 있지 않은 액정 표시 소자.

청구항 26

제1항 내지 제21항 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물의, 액정 표시 소자에서의 사용.

청구항 27

제1항 내지 제21항 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물의, 고분자 지지 배향형 액정 표시 소자에서의 사용.

청구항 28

제1항 내지 제21항 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물의, 배향막을 가지고 있지 않은 액정 표시 소자에서의 사용.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은, 액정 조성물, 이 조성물을 함유하는 액정 표시 소자 등에 관한 것이다. 특히, 극성(極性) 화합물 및 중합성 화합물(또는 그의 중합체)을 포함하고, 이들 화합물의 작용에 의해 액정 분자의 수직 배향을 달성 가능한, 유전율 이방성이 양(+)인 액정 조성물, 및 액정 표시 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 액정 표시 소자에 있어서, 액정 분자의 동작 모드에 기초한 분류는, PC(phase change), TN(twisted nematic), STN(super twisted nematic), ECB(electrically controlled birefringence), OCB(optically compensated bend), IPS(in-plane switching), VA(vertical alignment), FFS(fringe field switching), FPA(field-induced photo-reactive alignment) 등의 모드이다. 소자의 구동 방식에 기초한 분류는, PM(passive matrix)과 AM(active matrix)이다. PM은, 스테틱(static), 멀티플렉스(multiplex) 등으로 분류되고, AM은, TFT(thin film transistor), MIM(metal insulator metal) 등으로 분류된다. TFT의 분류는 비정질(非晶質) 실리콘(amorphous silicon) 및 다결정 실리콘(polycrystal silicon)이다. 후자는 제조 공정에 따라 고온형과 저온형으로 분류된다. 광원에 기초한 분류는, 자연광을 이용하는 반사형, 백라이트를 이용하는 투과형, 그리고 자연광과 백라이트의 양쪽을 이용하는 반투과형이다.

[0003] 액정 표시 소자는 네마틱상(nematic phase)을 가지는 액정 조성물을 함유한다. 이 조성물은 적절한 특성을 가진다. 이 조성물의 특성을 향상시킴으로써, 양호한 특성을 가지는 AM 소자를 얻을 수 있다. 2개의 특성에서의 관련을 하기의 표 1에 정리하여 기재하였다. 조성물의 특성을 시판되고 있는 AM 소자에 기초하여 추가로 설명한다. 네마틱상의 온도 범위는, 소자를 사용할 수 있는 온도 범위와 관련이 있다. 네마틱상의 바람직한 상한 온도는 약 70℃ 이상이며, 그리고, 네마틱상의 바람직한 하한 온도는 약 -10℃ 이하이다. 조성물의 점도는 소자의 응답 시간과 관련이 있다. 소자로 동영상 표시하기 위해서는 짧은 응답 시간이 바람직하다. 응답 시간은 1밀리초라도 짧은 것이 바람직하다. 따라서, 조성물에서의 작은 점도가 바람직하다. 낮은 온도에서의 작은 점도는 더욱 바람직하다. 조성물의 탄성 상수는 소자의 콘트라스트비와 관련이 있다. 소자에 있어서 콘트라스트비를 높이기 위해서는, 조성물에서의 큰 탄성 상수가 더욱 바람직하다.

[표 1] 조성물과 AM 소자에서의 특성

No	조성물의 특성	AM 소자의 특성
1	네마틱상의 온도범위가 넓다	사용할 수 있는 온도범위가 넓다
2	점도가 작다	응답시간이 짧다
3	광학이방성이 적절하다	콘트라스트비가 크다
4	양 또는 음으로 유전율이방성이 크다	임계값전압이 낮고, 소비전력이 작다 콘트라스트비가 크다
5	비저항이 크다	전압유지율이 크고, 콘트라스트비가 크다
6	자외선 및 열에 안정적이다	수명이 길다
7	탄성상수가 크다	콘트라스트비가 크고, 응답시간이 짧다

[0005] 조성물의 광학 이방성(異方性)은, 소자의 콘트라스트비와 관련이 있다. 소자의 모드에 따라, 큰 광학 이방성 또는 작은 광학 이방성, 즉 적절한 광학 이방성이 필요하다. 조성물의 광학 이방성(Δn)과 소자의 셀 갭(d)의 곱($\Delta n \times d$)은, 콘트라스트비를 최대로 하도록 설계된다. 곱의 적절한 값은 동작 모드의 종류에 의존한다. TN과 같은 모드의 소자에서는, 적절한 값은 약 0.45 μm 이다. 이 경우에, 작은 셀 갭의 소자에는 큰 광학 이방성을 가지는 조성물이 바람직하다. 조성물에서의 큰 유전율 이방성은, 소자에서의 낮은 임계값 전압, 작은 소비 전력과 큰 콘트라스트비에 기여한다. 따라서, 큰 유전율 이방성이 바람직하다. 조성물에서의 큰 비저항은, 소자에서의 큰 전압 유지율과 큰 콘트라스트비에 기여한다. 따라서, 초기 단계에 있어서 실온에서뿐만 아니라 네마틱상의 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 비저항을 가지는 조성물이 바람직하다. 장시간 사용한 후, 실온에서뿐만 아니라 네마틱상의 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 비저항을 가지는 조성물이 바람직하다. 자외선이나 열에 대

한 조성물의 안정성은, 소자의 수명과 관련이 있다. 이 안정성이 높을 때, 소자의 수명은 길다. 이와 같은 특성은, 액정 프로젝터, 액정 TV 등에 사용하는 AM 소자에 바람직하다.

[0007] 범용의 액정 표시 소자에 있어서, 액정 분자의 수직 배향은, 특정한 폴리이미드 배향막에 의해 달성된다. 고분자 지지 배향(PSA; polymer sustained alignment)형 액정 표시 소자에서는, 중합체의 효과를 활용한다. 먼저, 소량의 중합성 화합물을 첨가한 조성물을 소자에 주입한다. 다음으로, 이 소자의 기관의 사이에 전압을 인가하면서, 조성물에 자외선을 조사(照射)한다. 중합성 화합물은 중합되어, 조성물 중에 중합체의 메쉬 구조를 생성한다. 이 조성물에서는, 중합체에 의해 액정 분자의 배향을 제어하는 것이 가능하게 되므로, 소자의 응답 시간이 단축되어, 화상의 소부(燒付)가 개선된다. 중합체의 이와 같은 효과는, TN, ECB, OCB, IPS, VA, FFS, FPA와 같은 모드를 가지는 소자에 기대할 수 있다.

[0008] 한편, 배향막을 가지고 있지 않은 액정 표시 소자에서는, 중합체 및 극성 화합물을 함유하는 액정 조성물이 사용된다. 먼저, 소량의 중합성 화합물 및 소량의 극성 화합물을 첨가한 조성물을 소자에 주입한다. 여기서, 극성 화합물은 기관 표면에 흡착되고, 배열한다. 이 배열에 따라 액정 분자가 배향된다. 다음으로, 이 소자의 기관의 사이에 전압을 인가하면서, 조성물에 자외선을 조사한다. 여기서, 중합성 화합물이 중합하고, 액정 분자의 배향을 안정화시킨다. 이 조성물에서는, 중합체 및 극성 화합물에 의해 액정 분자의 배향을 제어하는 것이 가능하게 되므로, 소자의 응답 시간이 단축되어, 화상의 소부가 개선된다. 또한, 배향막을 가지고 있지 않은 소자에서는, 배향막을 형성하는 공정이 불필요하다. 배향막이 없기 때문에, 배향막과 조성물의 상호 작용에 의해, 소자의 전기적 저항이 저하되지 않는다. 중합체와 극성 화합물의 조합에 의한 이와 같은 효과는, TN, ECB, OCB, IPS, VA, FFS, FPA와 같은 모드를 가지는 소자에 기대할 수 있다.

[0009] TN 모드를 가지는 AM 소자에 있어서는 양의 유전율 이방성을 가지는 조성물이 사용된다. VA 모드를 가지는 AM 소자에 있어서는 음(-)의 유전율 이방성을 가지는 조성물이 사용된다. IPS 모드 또는 FFS 모드를 가지는 AM 소자에 있어서는 양 또는 음의 유전율 이방성을 가지는 조성물이 사용된다. 고분자 지지 배향형 AM 소자에 있어서는 양 또는 음의 유전율 이방성을 가지는 조성물이 사용된다. 양의 유전율 이방성을 가지는 액정 조성물의 예는 하기 특허문헌 1~3 등에 개시되어 있다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0010] (특허문헌 0001) 일본특표 2006-502264호 공보
 (특허문헌 0002) 국제 공개 제2010/089092호 팜플렛
 (특허문헌 0003) 일본 공개특허 제2011-525553호 공보

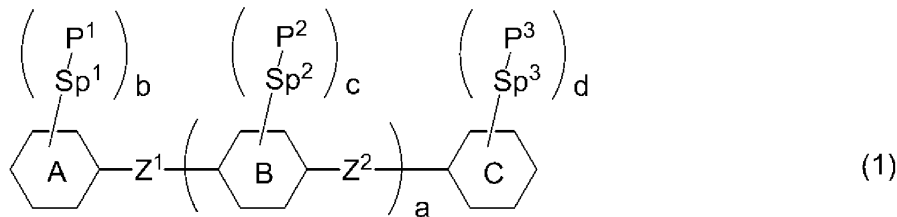
발명의 내용

해결하려는 과제

[0011] 본 발명의 하나의 목적은, 중합성 화합물(또는 그의 중합체) 및 극성 화합물을 포함하고, 이들 화합물의 작용에 의해 액정 분자의 수직 배향을 달성 가능한 액정 조성물이다. 다른 목적은, 네마틱상의 높은 상한 온도, 네마틱상의 낮은 하한 온도, 작은 점도, 적절한 광학 이방성, 양으로 큰 유전율 이방성, 큰 비저항, 자외선에 대한 높은 안정성, 열에 대한 높은 안정성, 큰 탄성 상수 등의 특성에 있어서, 1개 이상의 특성을 충족하는 액정 조성물이다. 또 다른 목적은, 2개 이상의 특성의 사이에 적절한 밸런스를 가지는 액정 조성물이다. 또 다른 목적은, 이와 같은 조성물을 함유하는 액정 표시 소자이다. 또 다른 목적은, 짧은 응답 시간, 큰 전압 유지율, 낮은 임계값 전압, 큰 콘트라스트비, 긴 수명 등의 특성을 가지는 AM 소자이다.

과제의 해결 수단

[0012] 본 발명은, 제1 첨가물로서 식(1)으로 표시되는 화합물의 균으로부터 선택된 1개 이상의 중합성 화합물을 함유하고, 제2 첨가물로서 1개 이상의 극성 화합물을 함유하고, 그리고, 양의 유전율 이방성을 가지는 액정 조성물, 및 이 조성물을 함유하는 액정 표시 소자이다.



[0013]

[0014]

식(1)에 있어서, 환 A 및 환 C는 독립적으로, 시클로헥실, 시클로헥세닐, 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 테트라하이드로피란-2-일, 1,3-디옥산-2-일, 피리미딘-2-일, 또는 피리딘-2-일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있고; 환 B는, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 1,4-페닐렌, 나프탈렌-1,2-디일, 나프탈렌-1,3-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 나프탈렌-1,5-디일, 나프탈렌-1,6-디일, 나프탈렌-1,7-디일, 나프탈렌-1,8-디일, 나프탈렌-2,3-디일, 나프탈렌-2,6-디일, 나프탈렌-2,7-디일, 테트라하이드로피란-2,5-디일, 1,3-디옥산-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 또는 피리딘-2,5-디일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있고; Z¹ 및 Z²는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -O-, -CO-, -COO-, 또는 -OCO-로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 -CH₂-CH₂-는, -CH=CH-, -C(CH₃)=CH-, -CH=C(CH₃)-, 또는 -C(CH₃)=C(CH₃)-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; P¹, P², 및 P³는, 중합성기이며; Sp¹, Sp², 및 Sp³는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -O-, -COO-, -OCO-, 또는 -OCOO-로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 -CH₂-CH₂-는, -CH=CH- 또는 -C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; a는 0, 1, 또는 2이며; b, c, 및 d는 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 또는 4이다. 단, 환 A 및 환 C가 페닐일 때, a는 1 또는 2이며, 그리고 a가 1일 때, Sp¹ 및 Sp³는 단결합이다.

발명의 효과

[0015]

본 발명의 하나의 장점은, 중합성 화합물(또는 그의 중합체) 및 극성 화합물을 포함하고, 이들의 작용에 의해 액정 분자의 수직 배향을 달성 가능한 액정 조성물이다. 다른 장점은, 네마틱상의 높은 상한 온도, 네마틱상의 낮은 하한 온도, 작은 점도, 적절한 광학 이방성, 양으로 큰 유전율 이방성, 큰 비저항, 자외선에 대한 높은 안정성, 열에 대한 높은 안정성, 큰 탄성 상수 등의 특성에 있어서, 1개 이상의 특성을 충족하는 액정 조성물이다. 다른 장점은, 2개 이상의 특성의 사이에 적절한 밸런스를 가지는 액정 조성물이다. 또 다른 장점은, 이와 같은 조성물을 함유하는 액정 표시 소자이다. 또 다른 장점은, 짧은 응답 시간, 큰 전압 유지율, 낮은 임계값 전압, 큰 콘트라스트비, 긴 수명 등의 특성을 가지는 AM 소자이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0016]

본 명세서에서의 용어의 사용법은 다음과 같다. 「액정 조성물」 및 「액정 표시 소자」의 용어를 각각 「조성물」 및 「소자」로 약칭하는 경우가 있다. 「액정 표시 소자」는 액정 표시 패널 및 액정 표시 모듈의 총칭이다. 「액정성 화합물」은, 네마틱상, 스멕틱상 등의 액정상을 가지는 화합물 및 액정상을 가지고 있지 않지만, 네마틱상의 온도 범위, 점도, 유전율 이방성과 같은 특성을 조절할 목적으로 조성물에 혼합되는 화합물의 총칭이다. 이 화합물은, 예를 들면 1,4-시클로헥실렌이나 1,4-페닐렌과 같은 6원환을 포함하고, 그 분자 구조는 봉형(棒形)(rod like)이다. 「중합성 화합물」은, 조성물 중에 중합체를 생성시킬 목적으로 첨가하는 화합물이다.

[0017]

액정 조성물은, 복수의 액정성 화합물을 혼합함으로써 조제된다. 이 액정 조성물에, 광학 활성 화합물, 산화 방지제, 자외선 흡수제, 색소, 소포제(消泡劑), 중합성 화합물, 중합 개시제, 중합 금지제, 극성 화합물과 같은 첨가물이 필요에 따라 첨가된다. 액정성 화합물이나 첨가물은, 이와 같은 수순으로 혼합된다. 액정성 화합물의 비율(함유량)은, 첨가물을 첨가한 경우라도, 첨가물을 포함하지 않는 액정 조성물의 중량을 기준으로 한 중량 백분율(중량%)로 표시된다. 첨가물의 비율(첨가량)은, 첨가물을 포함하지 않는 액정 조성물의 중량을 기준으로 한 중량 백분율(중량%)로 표시된다. 중량백분율(ppm)이 사용되는 경우도 있다. 중합 개시제 및 중합 금지제의

비율은, 예외적으로 중합성 화합물의 중량을 기준으로 하여 표시된다.

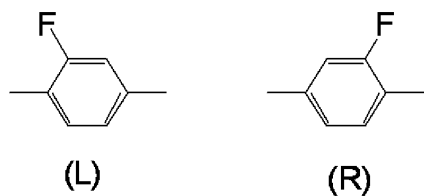
[0018] 「네마틱상의 상한 온도」를 「상한 온도」로 약칭하는 경우가 있다. 「네마틱상의 하한 온도」를 「하한 온도」로 약칭하는 경우가 있다. 「비저항이 크다」는, 조성물이 초기 단계에 있어서 실온에서뿐만 아니라 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 비저항을 포함하고, 그리고 장시간 사용한 후 실온에서뿐만 아니라 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 비저항을 가지는 것을 의미한다. 「전압 유지율이 크다」는, 소자가 초기 단계에 있어서 실온에서뿐만 아니라 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 전압 유지율을 포함하고, 그리고 장시간 사용한 후 실온에서뿐만 아니라 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 전압 유지율을 가지는 것을 의미한다. 조성물이나 소자에서는, 경시(經時) 변화 시험(가속 열화(劣化) 시험을 포함함)의 전후에서 특성이 검토되는 경우가 있다. 「유전율 이방성을 높인다」의 표현은, 유전율 이방성이 양인 조성물일 때는, 그 값이 양으로 증가하는 것을 의미하고, 유전율 이방성이 음인 조성물일 때는, 그 값이 음으로 증가하는 것을 의미한다.

[0019] 식(1)으로 표시되는 화합물을 「화합물(1)」로 약칭하는 경우가 있다. 식(1)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 「화합물(1)」로 약칭하는 경우가 있다. 「화합물(1)」은, 식(1)으로 표시되는 1개의 화합물, 2개의 화합물의 혼합물, 또는 3개 이상의 화합물의 혼합물을 의미한다. 다른 식으로 표시되는 화합물에 대해서도 마찬가지이다. 「1개 이상의 'A'」의 표현은, 'A'의 수는 임의인 것을 의미한다. 「1개 이상의 'A'는, 'B'로 치환될 수도 있다」의 표현은, 'A'의 수가 1개일 때, 'A'의 위치는 임의이며, 'A'의 수가 2개 이상일 때도, 이들의 위치는 제한없이 선택할 수 있다. 이 룰은, 「1개 이상의 'A'가, 'B'로 치환되는」의 표현에도 적용된다.

[0020] 성분 화합물의 화학식에 있어서, 말단기 R¹의 기호를 복수의 화합물에 사용한다. 이들 화합물에 있어서, 임의의 2개의 R¹이 나타내는 2개의 기는 동일할 수도 있고, 또는 상이할 수도 있다. 예를 들면, 화합물(2-1)의 R¹이 에틸이며, 화합물(2-2)의 R¹이 에틸인 케이스가 있다. 화합물(2-1)의 R¹이 에틸이며, 화합물(2-2)의 R¹이 프로필인 케이스도 있다. 이 룰은, 다른 말단기 등의 기호에도 적용된다. 식(2)에 있어서, e가 2일 때, 2개의 환 D가 존재한다. 이 화합물에 있어서, 2개의 환 D가 나타내는 2개의 환은, 동일할 수도 있고, 또는 상이할 수도 있다. 이 룰은, e가 2보다 클 때, 임의의 2개의 환 D에도 적용된다. 이 룰은, 다른 기호에도 적용된다. 이 룰은, 화합물(1-11)에서의 2개의 -Sp²-P²와 같은 경우에도 적용된다.

[0021] 육각형으로 에워싼 A, B, C, D 등의 기호는 각각 환 A, 환 B, 환 C, 환 D 등의 환에 대응하고, 6원환, 축합환 등의 환을 나타낸다. 식(1)에 있어서, 이 육각형을 가로지르는 사선은, 환상의 임의의 수소가 -Sp¹-P¹ 등의 기로 치환될 수도 있는 것을 나타낸다. 'b' 등의 첨자는, 치환된 기의 수를 나타낸다. 첨자 'b'가 0일 때, 그와 같은 치환은 없다. 첨자 'b'가 2 이상일 때, 환 A 상에는 복수의 -Sp¹-P¹이 존재한다. -Sp¹-P¹이 나타내는 복수의 기는, 동일할 수도 있고, 또는 상이할 수도 있다.

[0022] 2-플루오로-1,4-페닐렌은, 하기의 2개의 2가의 기를 의미한다. 화학식에 있어서, 불소는 좌측 방향(L)이라도 되고, 우측 방향(R)이라도 된다. 이 룰은, 테트라하이드로피란-2,5-디일과 같은, 환으로부터 2개의 수소를 제거한 것에 의해 생성한, 비대칭인 2가의 기에도 적용된다. 이 룰은, 카르보닐옥시(-COO- 또는 -OCO-)와 같은 2가의 결합기에도 적용된다.



[0023]

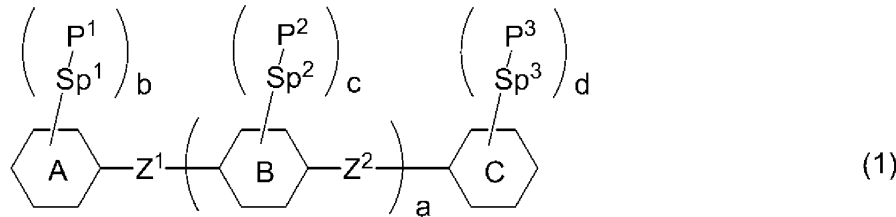
[0024] 「1개 이상의 -CH₂-는 -O-로 치환될 수도 있다」와 같은 표현이 본 명세서에서 사용된다. 이 경우에, -CH₂-CH₂-CH₂-는, 인접하지 않은 -CH₂-가 -O-로 치환되는 것에 의해 -O-CH₂-O-에 변환되어도 된다. 그러나, 인접한 -CH₂-가 -O-로 치환되지는 않는다. 이 치환에서는 -O-CH₂-CH₂-O- (피옥시드)가 생성되기 때문이다. 즉, 이 표현은, 「1개의 -CH₂-는 -O-로 치환될 수도 있다」와 「2개 이상의 인접하지 않은 -CH₂-는 -O-로 치환될 수도 있다」의 양쪽을 의미한다. 이 룰은, -O-로의 치환뿐만 아니라, -CH=CH-나 -COO-와 같은 2가의 기로의 치환에도 적용된다. 식(5)에 있어서, R⁴는 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH- 등으로 치환될

수도 있다. 이 치환에 의해 알킬의 탄소수가 증가한다. 이와 같을 때, 최대의 탄소수는 30이다. 이 룰은, 알킬렌, 시클로알킬렌 등에도 적용된다.

[0025] 액정성 화합물의 알킬은, 직쇄형 또는 분지형이며, 환형(環形) 알킬을 포함하지 않는다. 직쇄형 알킬은, 분지형 알킬보다 바람직하다. 전술한 것은, 알콕시, 알케닐 등의 말단기에 대해서도 마찬가지이다. 1,4-시클로헥실렌에 대한 입체 배치는, 상한 온도를 높이기 위해 시스보다 트랜스가 바람직하다. 할로젠은, 불소, 염소, 브롬, 요오드를 의미한다. 바람직한 할로젠은 불소 또는 염소이다. 더욱 바람직한 할로젠은 불소이다.

[0026] 본 발명은, 하기의 항 등이다.

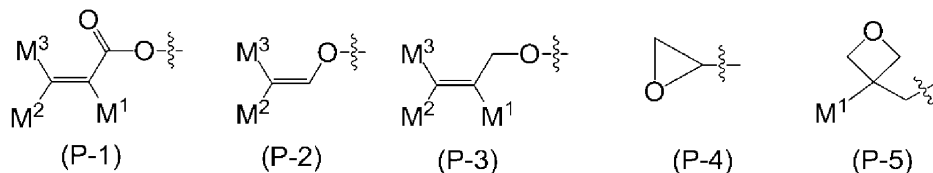
[0027] 항 1. 제1 첨가물로서 식(1)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 중합성 화합물을 함유하고, 제2 첨가물로서 1개 이상의 극성 화합물을 함유하고, 그리고 양의 유전을 이방성을 가지는 액정 조성물.



[0028]

[0029] 식(1)에 있어서, 환 A 및 환 C는 독립적으로, 시클로헥실, 시클로헥세닐, 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 테트라하이드로피란-2-일, 1,3-디옥산-2-일, 피리미딘-2-일, 또는 피리딘-2-일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있고; 환 B는, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 1,4-페닐렌, 나프탈렌-1,2-디일, 나프탈렌-1,3-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 나프탈렌-1,5-디일, 나프탈렌-1,6-디일, 나프탈렌-1,7-디일, 나프탈렌-1,8-디일, 나프탈렌-2,3-디일, 나프탈렌-2,6-디일, 나프탈렌-2,7-디일, 테트라하이드로피란-2,5-디일, 1,3-디옥산-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 또는 피리딘-2,5-디일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있고; Z¹ 및 Z²는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -O-, -CO-, -COO-, 또는 -OCO-로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 -CH₂-CH₂-는, -CH=CH-, -C(CH₃)=CH-, -CH=C(CH₃)-, 또는 -C(CH₃)=C(CH₃)-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; P¹, P², 및 P³는, 중합성기이며; Sp¹, Sp², 및 Sp³는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -O-, -COO-, -OCO-, 또는 -OCOO-로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 -CH₂-CH₂-는, -CH=CH- 또는 -C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; a는 0, 1, 또는 2이며; b, c, 및 d는 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; 단, 환 A 및 환 C가 페닐일 때, a는 1 또는 2이며, 그리고 a가 1일 때, Sp¹ 및 Sp³는 단결합이다.

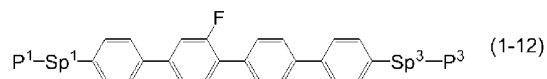
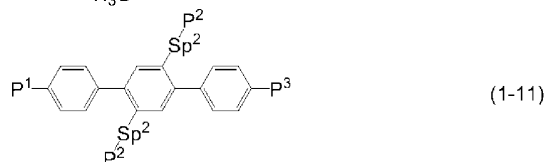
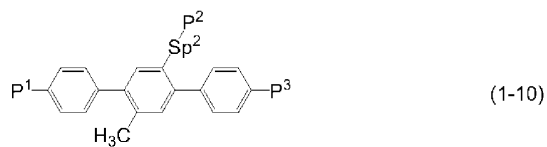
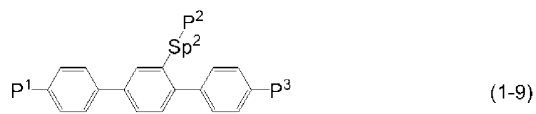
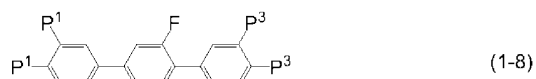
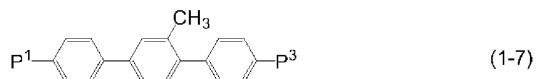
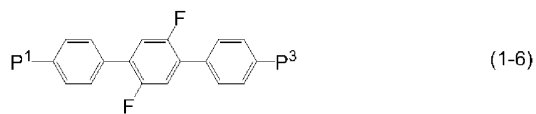
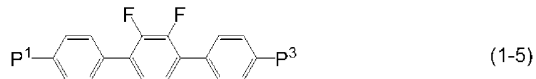
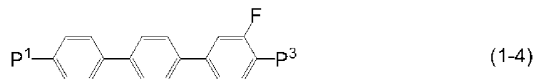
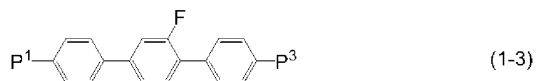
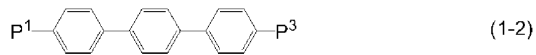
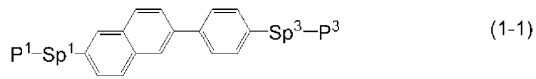
[0030] 항 2. 항 1에 기재된 식(1)에 있어서, P¹, P², 및 P³가 독립적으로 식(P-1)~식(P-5)으로 표시되는 기의 군으로부터 선택된 중합성기인, 항 1에 기재된 액정 조성물.



[0031]

[0032] 식(P-1)~식(P-5)에 있어서, M¹, M², 및 M³는 독립적으로, 수소, 불소, 탄소수 1~5의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~5의 알킬이다.

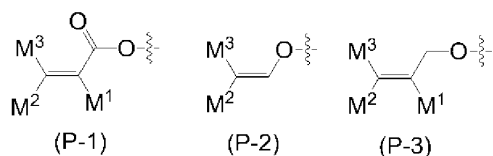
[0033] 항 3. 제1 첨가물이 식(1-1)~식(1-12)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 중합성 화합물인, 항 1 또는 2에 기재된 액정 조성물.



[0034]

[0035]

식(1-1)~식(1-12)에 있어서, P^1 , P^2 , 및 P^3 는 독립적으로, 식(P-1)~식(P-3)으로 표시되는 기의 군으로부터 선택된 중합성기이며, 여기서 M^1 , M^2 , 및 M^3 는 독립적으로, 수소, 불소, 탄소수 1~5의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~5의 알킬이며;



[0036]

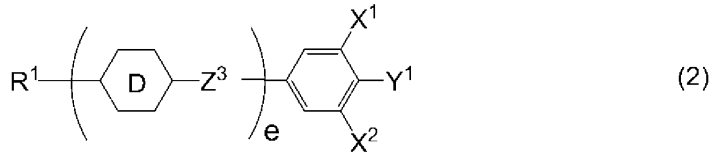
[0037]

Sp^1 , Sp^2 , 및 Sp^3 는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 $-CH_2-$ 는, $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, 또는 $-OCOO-$ 로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 $-CH_2-CH_2-$ 는, $-CH=CH-$ 또는

-C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있다.

[0038] 항 4. 액정 조성물의 중량을 기준으로, 제1 첨가물의 비율이 0.03 중량%~10 중량%의 범위인, 항 1 내지 3 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.

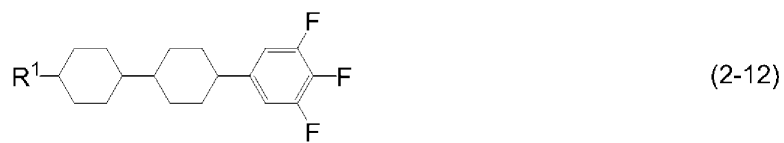
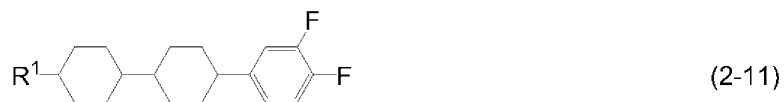
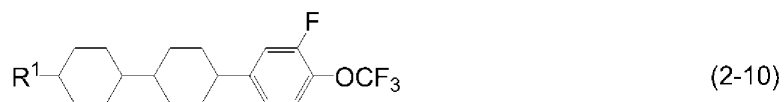
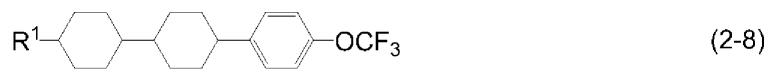
[0039] 항 5. 제1 성분으로서 식(2)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 항 1 내지 4 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



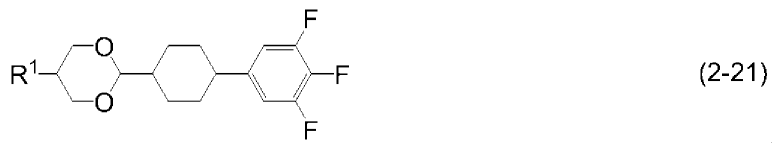
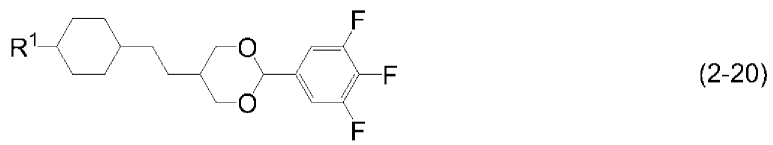
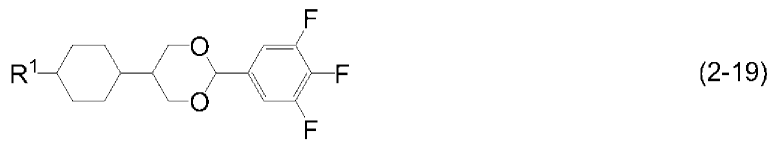
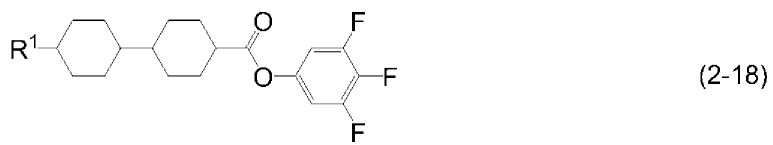
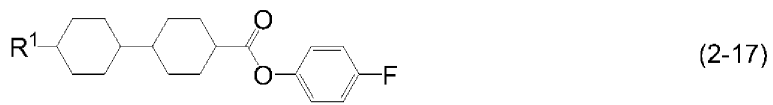
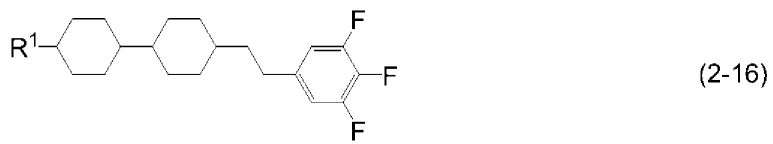
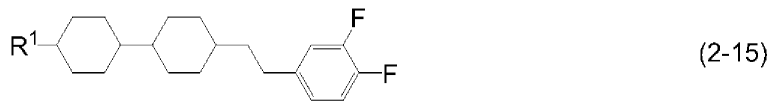
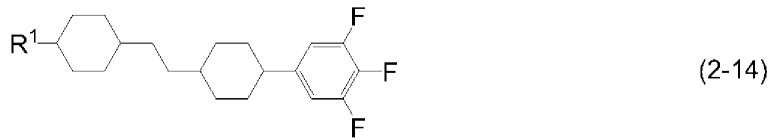
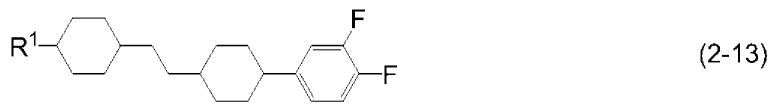
[0040]

[0041] 식(2)에 있어서, R¹은, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이며; 환 D는, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2,6-디플루오로-1,4-페닐렌, 3,5-디플루오로-1,4-페닐렌, 피리미딘-2,5-디일, 1,3-디옥산-2,5-디일, 또는 테트라하이드로피란-2,5-디일이며; Z³는, 단결합, -CH₂CH₂-, -CH₂O-, -OCH₂-, -COO-, -OCO-, -CF₂O-, 또는 -OCF₂-이며; X¹ 및 X²는 독립적으로, 수소 또는 불소이며; Y¹은, 불소, 염소, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐 옥시이며; e는, 1, 2, 3, 또는 4이다.

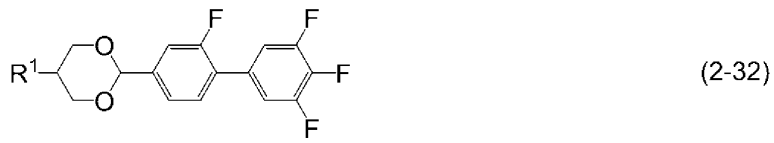
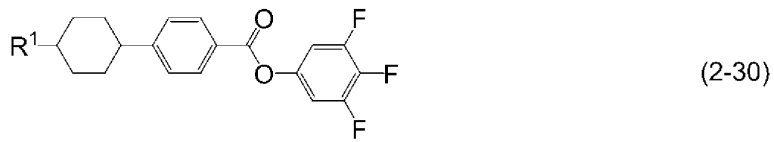
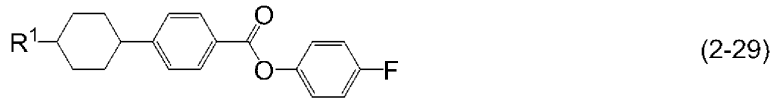
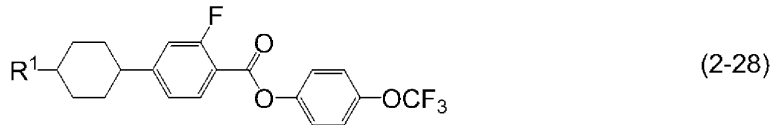
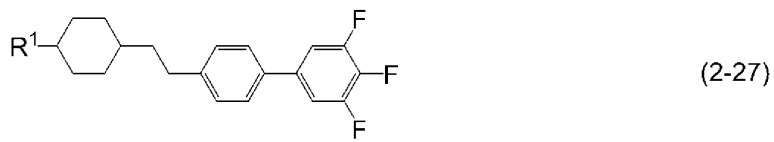
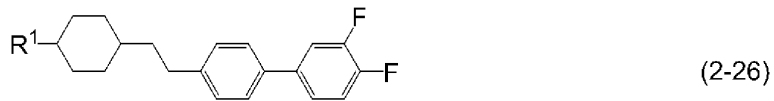
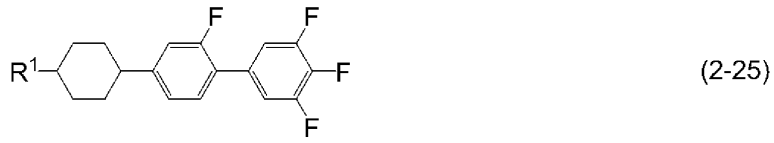
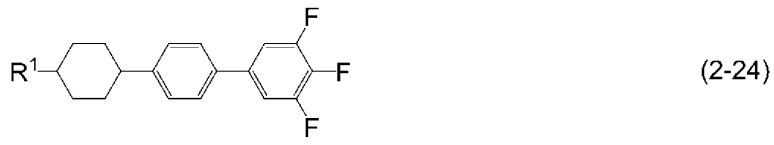
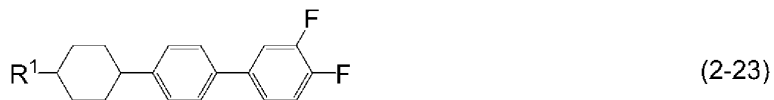
[0042] 항 6. 제1 성분으로서 식(2-1)~식(2-46)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 항 1 내지 5 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



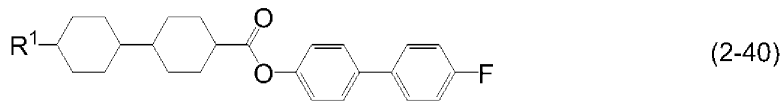
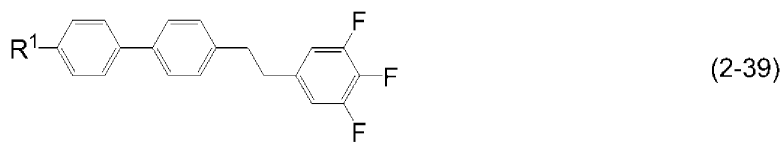
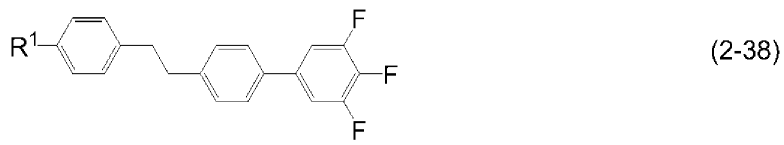
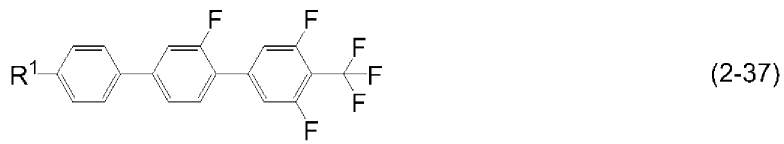
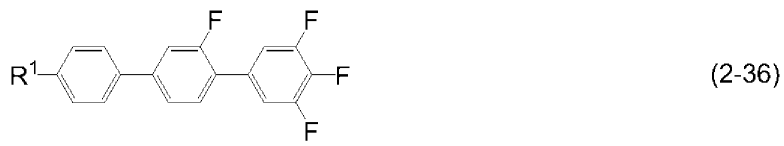
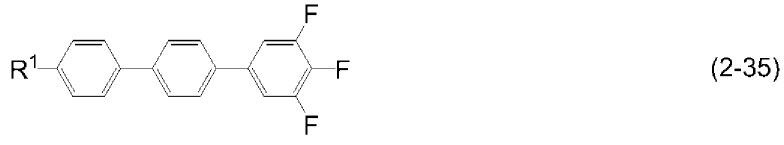
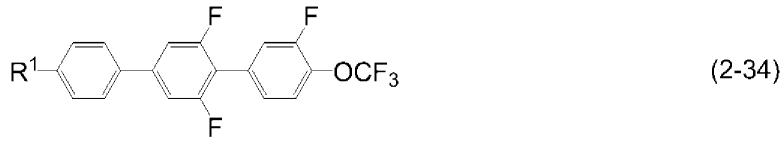
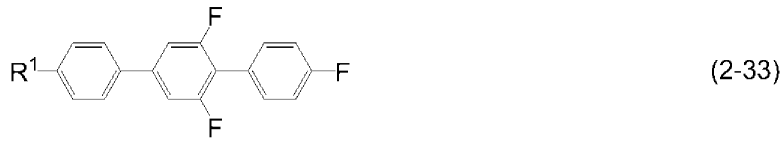
[0043]



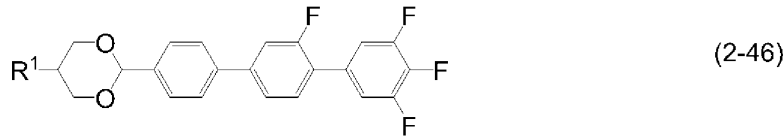
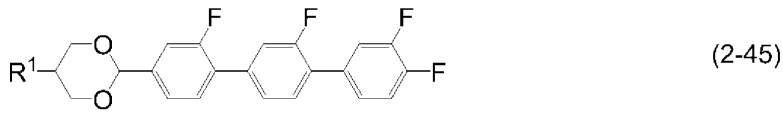
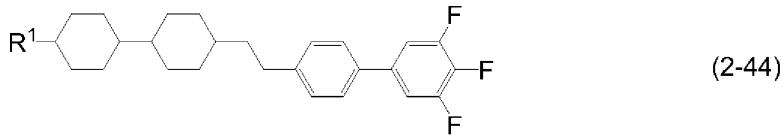
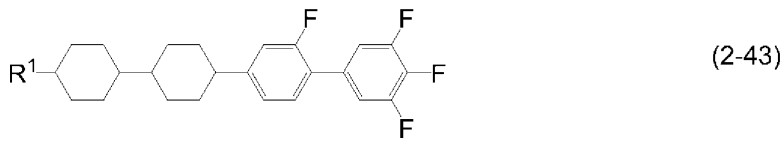
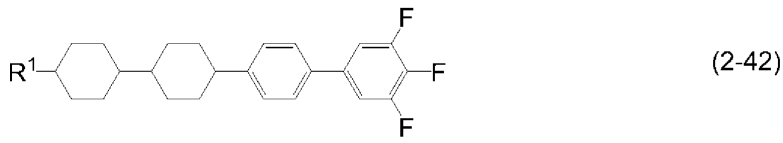
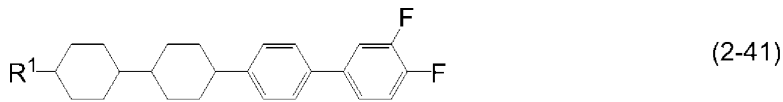
[0044]



[0045]



[0046]



[0047]

[0048]

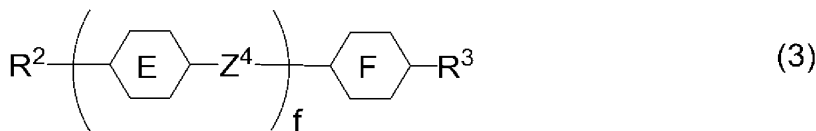
식(2-1)~식(2-46)에 있어서, R¹은, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이다.

[0049]

항 7. 액정 조성물의 중량을 기준으로, 제1 성분의 비율이 10 중량%~90 중량%의 범위인, 항 5 또는 6에 기재된 액정 조성물.

[0050]

항 8. 제2 성분으로서 식(3)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 항 1 내지 7 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



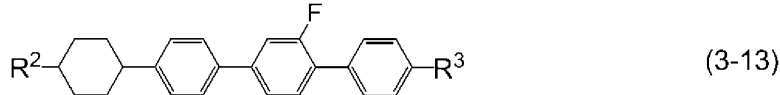
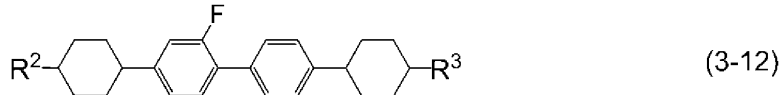
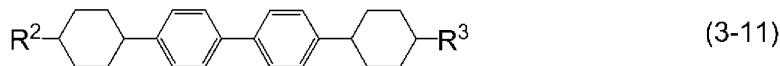
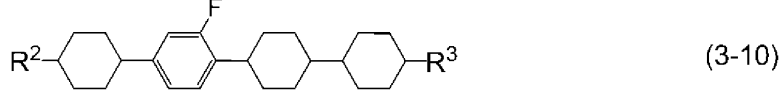
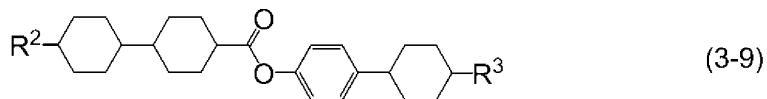
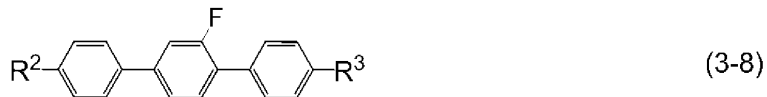
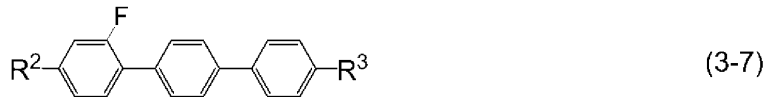
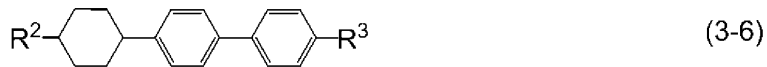
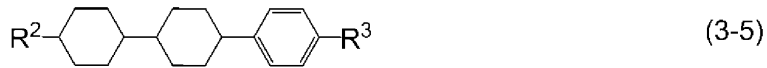
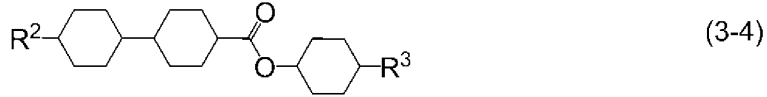
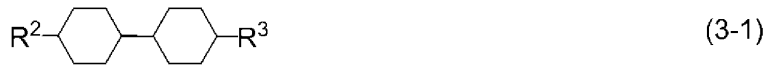
[0051]

[0052]

식(3)에 있어서, R² 및 R³는 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이며; 환 E 및 환 F는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 또는 2,5-디플루오로-1,4-페닐렌이며; Z⁴는, 단결합, -CH₂CH₂-, -CH₂O-, -OCH₂-, -COO-, 또는 -OCO-이며; f는, 1, 2, 또는 3이다.

[0053]

항 9. 제2 성분으로서 식(3-1)~식(3-13)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 항 1 내지 8 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



[0054]

[0055]

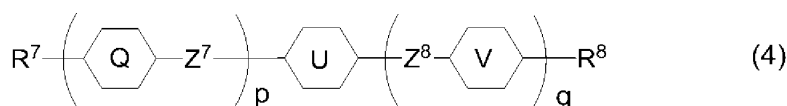
식(3-1)~식(3-13)에 있어서, R² 및 R³는 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이다.

[0056]

항 10. 액정 조성물의 중량을 기준으로, 제2 성분의 비율이 10 중량%~90 중량%의 범위인, 항 8 또는 9에 기재된 액정 조성물.

[0057]

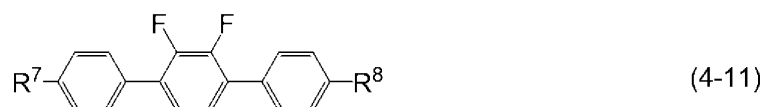
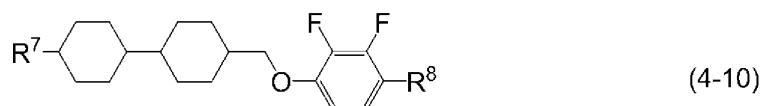
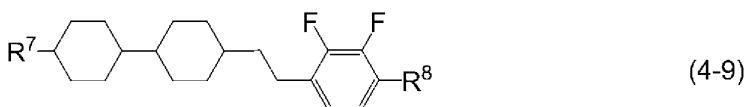
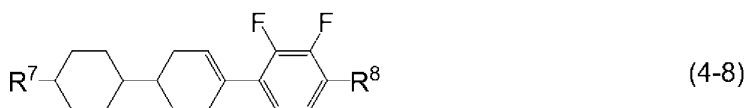
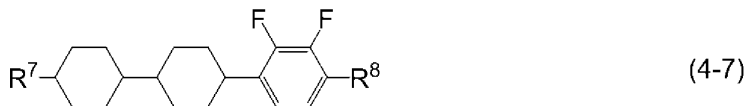
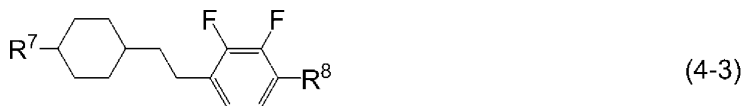
항 11. 제3 성분으로서 식(4)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 항 1 내지 10 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



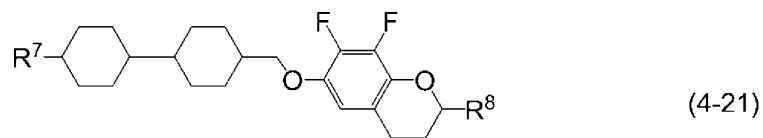
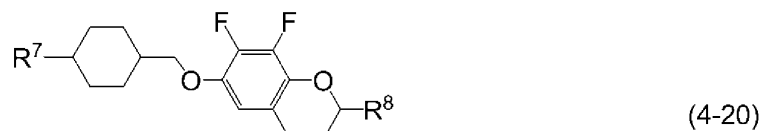
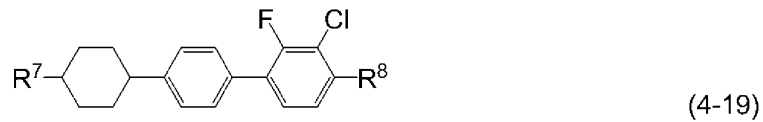
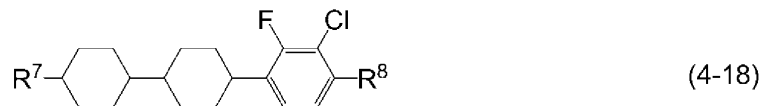
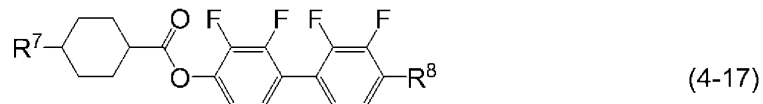
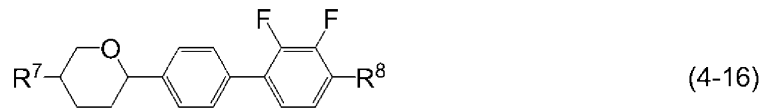
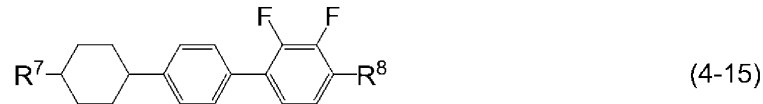
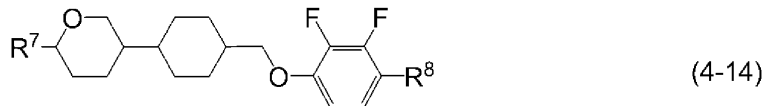
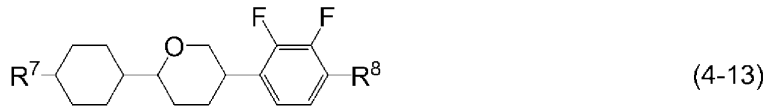
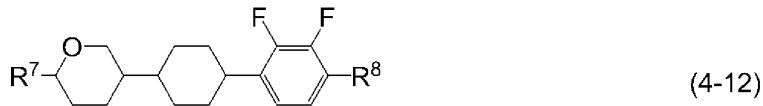
[0058]

[0059] 식(4)에 있어서, R^7 및 R^8 은 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 탄소수 2~12의 알케닐옥시이며; 환 Q 및 환 V는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 1,4-페닐렌, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 1,4-페닐렌, 또는 테트라하이드로피란-2,5-디일이며; 환 U는, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2-클로로-3-플루오로-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-5-메틸-1,4-페닐렌, 3,4,5-트리플루오로나프탈렌-2,6-디일, 또는 7,8-디플루오로크로만-2,6-디일이며; Z^7 및 Z^8 은 독립적으로, 단결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 이며; p는, 1, 2, 또는 3이며, q는, 0 또는 1이며; p와 q의 합은 3 이하이다.

[0060] 항 12. 제3 성분으로서 식(4-1)~식(4-21)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 항 1 내지 11 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



[0061]



[0062]

[0063] 식(4-1)~식(4-21)에 있어서, R⁷ 및 R⁸은 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 탄소수 2~12의 알케닐옥시이다.

[0064] 항 13. 액정 조성물의 중량을 기준으로, 제3 성분의 비율이 3 중량%~25 중량%의 범위인, 항 11 또는 12에 기재된 액정 조성물.

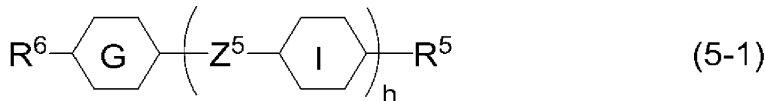
[0065] 항 14. 제2 첨가물이, 질소, 산소, 유황, 및 인으로부터 선택된 헤테로 원자를 가지는 극성기를 가지는 극성 화합물인, 항 1 내지 13 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.

[0066] 항 15. 제2 첨가물로서 식(5) 및 식(6)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 극성 화합물을 함유하는, 항 1 내지 14 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



식(5)에 있어서, MES는, 1개 이상의 환을 가지는 메소젠기이며; 식(6)에 있어서, R⁴는 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; 식(5) 및 식(6)에 있어서, R⁵는, OH 구조의 산소 원자, SH 구조의 유황 원자, 및 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자 중 하나 이상을 가지는 극성기이며; g는, 1 또는 2이다.

항 16. 제2 첨가물로서 식(5-1)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물을 함유하는, 항 1 내지 15 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



식(5-1)에 있어서, 환 G 및 환 I는 독립적으로, 탄소수 6~25의 방향족기, 탄소수 5~25의 복소방향족기, 탄소수 3~25의 지환식(脂環式)기, 또는 탄소수 4~25의 복소 지환식기이며, 이들 기는 축합환이라도 되고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 기 T로 치환될 수도 있고, 여기서 기 T는, -OH, -(CH₂)_i-OH, 할로젠, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, -N(R⁰)₂, -(CH₂)_i-N(R⁰)₂, 탄소수 6~20의 아릴, 탄소수 6~20의 헤테로아릴, 탄소수 1~25의 알킬, 탄소수 1~25의 알콕시, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐, 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐옥시, 또는 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐옥시이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는, 1, 2, 3, 또는 4이며; Z⁵는, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -(CH₂)_i-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -(CF₂)_i-, -CH=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, -C(R⁰)₂, 또는 단결합이며, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는, 1, 2, 3, 또는 4이며; R⁵는, 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -COO-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는, 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 단 R⁵는, OH 구조의 산소 원자, SH 구조의 유황 원자, 또는 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자 중 하나 이상을 가지고; R⁶는, 수소, 할로젠, 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는, 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며; h는, 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5이다.

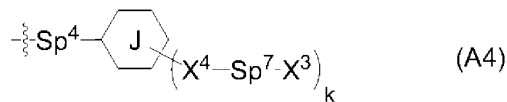
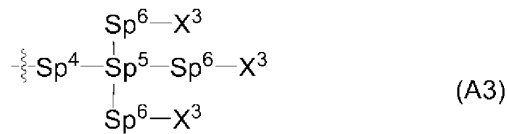
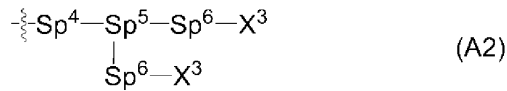
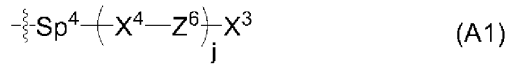
항 17. 제2 첨가물로서 식(6-1)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 극성 화합물을 함유하는, 항 1 내지 15 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



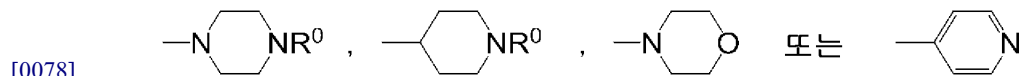
식(6-1)에 있어서, R⁴는, 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; R⁵는, 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -OCO-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있

고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는, 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 단 R⁵는, OH 구조의 산소 원자, SH 구조의 유황 원자, 및 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자 중 하나 이상을 가진다.

[0075] 항 18. 항 15에 기재된 식(5) 및 식(6)에 있어서, R⁵가 식(A1)~식(A4) 중 어느 하나로 표시되는 기인, 항 15 내지 17 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.



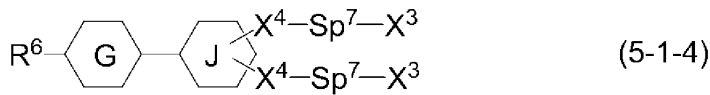
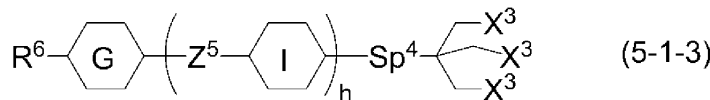
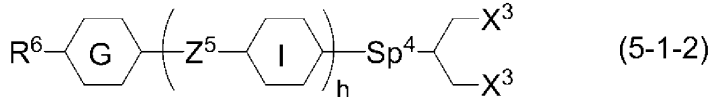
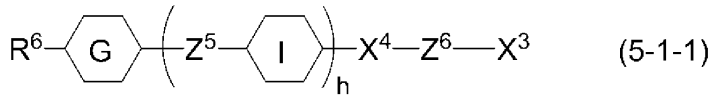
[0076] 식(A1)~식(A4)에 있어서, Sp⁴, Sp⁶, 및 Sp⁷은 독립적으로, 단결합 또는 기(-Sp''-X''-)이며, 여기서, Sp''는, 탄소수 1~20의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서 1개 이상의 -CH₂-는, -O-, -S-, -NH-, -N(R⁰)-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, -S-CO-, -CO-S-, -N(R⁰)-CO-O-, -O-CO-N(R⁰)-, -N(R⁰)-CO-N(R⁰)-, -CH=CH-, 또는 -C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 또는 -CN으로 치환될 수도 있고, 그리고, X''는, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, -CO-N(R⁰)-, -N(R⁰)-CO-, -N(R⁰)-CO-N(R⁰)-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -CF₂CF₂-, -CH=N-, -N=CH-, -N=N-, -CH=CR⁰-, -CY²=CY³-, -C≡C-, -CH=CH-CO-O-, -O-CO-CH=CH-, 또는 단결합이며, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, Y² 및 Y³는 독립적으로, 수소, 불소, 염소, 또는 -CN이며; Sp⁵는, >CH-, >CR¹¹-, >N-, 또는 >C<이며; X³는, -OH, -OR¹¹, -COOH, -NH₂, -NHR¹¹, -NR¹¹₂, -SH, -SR¹¹,



[0079] 이며, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며; X⁴는, -O-, -CO-, -NH-, -NR¹¹-, -S-, 또는 단결합이며; Z⁶는, 탄소수 1~15의 알킬렌, 탄소수 5 또는 6의 지환식기, 또는 이들의 조합이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, -OH, -OR¹¹, -COOH, -NH₂, -NHR¹¹, -NR¹¹₂, 불소, 또는 염소로 치환될 수도 있고; R¹¹은, 탄소수 1~15의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -C≡C-, -CH=CH-, -COO-, -OCO-, -CO-, 또는 -O-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; 환 J는, 탄소수 6~25의 방향족기 또는 탄소수 3~25의 지환식기이며, 이들 기는 축합환이라도 되고, 이들 기에 있어서 1개~3개의 수소는 R^l로 치환될 수도 있고; R^l은, -OH, -(CH₂)_i-OH, 불소, 염소, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, -N(R⁰)₂, -(CH₂)_i-N(R⁰)₂, -SH, -SR⁰, 탄소수 6~20의 아릴, 탄소수 6~20의 헤테로아릴, 탄소수 1~25의 알킬, 탄소수 1~25의 알콕시, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐, 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐옥시, 또는 탄소수 2~25의 알콕시카르보닐옥시이며, 이들

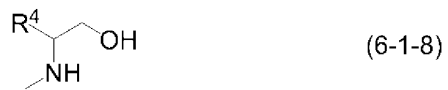
기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는, 1, 2, 3, 또는 4이며; j는, 0, 1, 2, 또는 3이며; k는, 2, 3, 4, 또는 5이다.

[0080] 항 19. 제2 첨가물이 식(5-1-1)~식(5-1-4)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물인, 항 16에 기재된 액정 조성물.



[0081]
 [0082] 식(5-1-1)~식(5-1-4)에 있어서, 환 G 및 환 I는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,3-페닐렌, 2-에틸-1,4-페닐렌, 2,6-디에틸-1,4-페닐렌, 2-트리플루오로메틸-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2,5-디플루오로-1,4-페닐렌, 2,6-디플루오로-1,4-페닐렌, 또는 2,3,5,6-테트라플루오로-1,4-페닐렌이며; 환 J는, 시클로헥실 또는 페닐이며; Z⁵는, 단결합, -CH₂CH₂-, -COO-, 또는 -OCO-이며; Z⁶는, 단결합, 탄소수 1~15의 알킬렌, 탄소수 5 또는 6의 지환식기, 또는 이들의 조합이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, -OH, -OR¹¹, -COOH, -NH₂, -NHR¹¹, -N(R¹¹)₂, 불소, 또는 염소로 치환될 수도 있고, R¹¹은, 탄소수 1~15의 알킬이며, 이 알킬에 있어서 1개 이상의 -CH₂-는, -C≡C-, -CH=CH-, -COO-, -OCO-, -CO-, -O-, 또는 -NH-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고; Sp⁴는, 단결합, 에틸렌, 프로필렌, 또는 메틸렌옥시이며; Sp⁷은, 단결합, 또는 탄소수 1~5의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서 -CH₂-는 -O- 또는 -NH-로 치환될 수도 있고; R⁶는, 탄소수 1~8의 알킬 또는 불소이며; h는, 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5이며; X³는 -OH, -COOH, -SH, -OCH₃, 또는 -NH₂이며; X⁴는 단결합 또는 -O-이다.

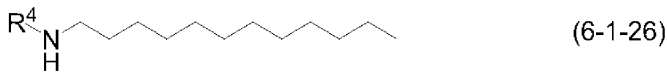
[0083] 항 20. 제2 첨가물이 식(6-1-1)~식(6-1-29)으로 표시되는 화합물의 군으로부터 선택된 1개 이상의 화합물인, 항 17에 기재된 액정 조성물.



[0084]



[0085]



[0086]

[0087]

식(6-1-1)~식(6-1-29)에 있어서, R⁴는, 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있다.

[0088]

항 21. 액정 조성물의 중량을 기준으로, 제2 첨가물의 비율이 10 중량% 미만인, 항 1 내지 20 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물.

[0089]

항 22. 항 1 내지 21 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물을 함유하는 액정 표시 소자.

[0090]

항 23. 액정 표시 소자의 동작 모드가, IPS 모드, TN 모드, FFS 모드, 또는 FPA 모드이며, 액정 표시 소자의 구동 방식이 액티브 매트릭스 방식인, 항 22에 기재된 액정 표시 소자.

[0091]

항 24. 항 1 내지 21 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물을 함유하고, 이 액정 조성물 중의 중합성 화합물이 중합된, 고분자 지지 배향형 액정 표시 소자.

[0092]

항 25. 항 1 내지 21 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물을 함유하고, 이 액정 조성물 중의 중합성 화합물이 중합된, 배향막을 가지고 있지 않은 액정 표시 소자.

[0093]

항 26. 항 1 내지 21 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물의, 액정 표시 소자에서의 사용.

[0094]

항 27. 항 1 내지 21 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물의, 고분자 지지 배향형 액정 표시 소자에서의 사용.

[0095]

항 28. 항 1 내지 21 중 어느 한 항에 기재된 액정 조성물의, 배향막을 가지고 있지 않은 액정 표시 소자에서의 사용.

[0096]

본 발명은, 다음의 항도 포함한다. (a) 상기한 액정 조성물을 2개의 기관의 사이에 배치하고, 이 조성물에 전압을 인가한 상태에서 광을 조사하고, 이 조성물에 함유되는 중합성 화합물을 중합시킴으로써, 상기한 액정 표시 소자를 제조하는 방법. (b) 네마틱상의 상한 온도가 70℃ 이상이며, 파장 589 nm에서의 광학 이방성(25℃에서 측정)이 0.08 이상이며, 그리고, 주파수 1 kHz에서의 유전율 이방성(25℃에서 측정)이 2 이상인, 상기한 액정 조성물.

[0097]

본 발명은, 다음의 항도 포함한다. (c) 상기한 중합성 화합물(1)을 2개 이상 함유하는 상기한 조성물. (d) 상기한 중합성 화합물(1)과는 상이한 중합성 화합물을 더 함유하는 상기한 조성물. (e) 광학 활성 화합물, 산화 방지제, 자외선 흡수제, 색소, 소포제, 중합성 화합물, 중합 개시제, 중합 금지제, 극성 화합물과 같은 첨가물의 하나, 2개 또는 3개 이상을 함유하는 상기한 조성물. (f) 상기한 조성물을 함유하는 AM 소자. (g) 상기한 조성물을 함유하고, 그리고 TN, ECB, OCB, IPS, FFS, VA, 또는 FPA의 모드를 가지는 소자. (h) 상기한 조성물을 함유하는 투과형 소자. (i) 상기한 조성물을, 네마틱상을 가지는 조성물로서 사용하는 것. (j) 상기한 조성물에 광학 활성 화합물을 첨가함으로써 광학 활성인 조성물로서의 사용.

[0098] 본 발명의 조성물을 다음의 순서로 설명한다. 첫째로, 조성물의 구성을 설명한다. 둘째로, 성분 화합물의 주요한 특성, 및 이 화합물이 조성물에 미치는 주요한 효과를 설명한다. 셋째로, 조성물에서의 성분의 조합, 성분의 바람직한 비율 및 그 근거를 설명한다. 넷째로, 성분 화합물의 바람직한 형태를 설명한다. 다섯째로, 바람직한 성분 화합물을 나타낸다. 여섯째로, 조성물에 첨가할 수도 있는 첨가물을 설명한다. 일곱째로, 성분 화합물의 합성법을 설명한다. 마지막으로, 조성물의 용도를 설명한다.

[0099] 첫째로, 조성물의 구성을 설명한다. 본 발명의 조성물은 조성물 A와 조성물 B로 분류된다. 조성물 A는, 화합물(2), 화합물(3), 및 화합물(4)로부터 선택된 액정성 화합물 외에, 그 외의 액정성 화합물, 첨가물 등을 더 함유할 수도 있다. 「그 외의 액정성 화합물」은, 화합물(2), 화합물(3), 및 화합물(4)과는 상이한 액정성 화합물이다. 이와 같은 화합물은, 특성을 더욱 조정할 목적으로 조성물에 혼합된다. 첨가물은, 광학 활성 화합물, 산화 방지제, 자외선 흡수제, 색소, 소포제, 중합성 화합물, 중합 개시제, 중합 금지제, 극성 화합물 등이다.

[0100] 조성물 B는, 실질적으로 화합물(2), 화합물(3), 및 화합물(4)로부터 선택된 액정성 화합물만으로 이루어진다. 「실질적으로」는, 조성물이 첨가물을 함유해도 되지만, 그 외의 액정성 화합물을 함유하지 않는 것을 의미한다. 조성물 B는 조성물 A와 비교하여 성분의 수가 적다. 비용을 낮추는 관점에서, 조성물 B는 조성물 A보다 바람직하다. 그 외의 액정성 화합물을 혼합함으로써 특성을 더욱 조정할 수 있는 관점에서, 조성물 A는 조성물 B보다 바람직하다.

[0101] 둘째로, 성분 화합물의 주요한 특성, 및 이 화합물이 조성물의 특성에 미치는 주요한 효과를 설명한다. 성분 화합물의 주요한 특성을 본 발명의 효과에 기초하여 표 2에 정리하여 나타내었다. 표 2의 기호에 있어서, L은 크거나 또는 높은 것을, M은 중간 정도의 것을, S는 작거나 또는 낮은 것을 의미한다. 기호 L, M, S는, 성분 화합물의 사이의 정성적(定性的) 비교에 기초한 분류이며, 기호 0는, 값이 제로이거나, 또는 제로에 가까운 것을 의미한다.

[표 2] 화합물의 특성

특성	화합물(2)	화합물(3)	화합물(4)
상한온도	S~L	S~L	S~M
점도	M~L	S~M	L
광학이방성	M~L	M~L	M~L
유전율이방성	S~L ¹⁾	0	L ²⁾
비저항	L	L	L

1) 유전율이방성의 값은 양이며, 기호는 절대값의 대소를 나타냄
 2) 유전율이방성의 값은 음이며, 기호는 절대값의 대소를 나타냄

[0103] 성분 화합물을 조성물에 혼합했을 때, 성분 화합물이 조성물의 특성에 미치는 주요한 효과는 다음과 같다. 화합물(1)은, 중합에 의해 중합체를 부여한다. 이 중합체는, 액정 분자의 배향을 안정화하므로, 소자의 응답 시간을 단축하고, 그리고 화상의 소부를 개선한다. 화합물(2)은, 유전율 이방성을 높이고 그리고, 하한 온도를 낮춘다. 화합물(3)은, 점도를 낮춘다. 화합물(4)은, 단축 방향에서의 유전율을 높인다. 화합물(5) 및 화합물(6)은, 극성기의 작용으로 기관 표면에 흡착하고, 액정 분자의 배향을 제어한다. 액정 분자의 배향의 관점에서, 화합물(1)의 중합체는 효과적이다. 화합물(5) 또는 화합물(6)도 효과적이다. 화합물(1) 및 화합물(5), 또는 화합물(1) 및 화합물(6)의 조합은 더욱 효과적이다. 이 조합에 의해 상승(相乘) 효과를 기대할 수 있다. 이 조합은, 화합물(5)만, 또는 화합물(6)만 인 것보다 양호한 장기 안정성을 기대할 수 있다.

[0105] 셋째로, 조성물에서의 성분의 조합, 성분의 바람직한 비율 및 그 근거를 설명한다. 조성물에서의 성분의 바람직한 조합은, 화합물(1)+화합물(2)+화합물(5), 화합물(1)+화합물(2)+화합물(3)+화합물(5), 화합물(1)+화합물(2)+화합물(3)+화합물(4)+화합물(5), 화합물(1)+화합물(2)+화합물(6), 화합물(1)+화합물(2)+화합물(3)+화합물(6), 화합물(1)+화합물(2)+화합물(3)+화합물(4)+화합물(6), 화합물(1)+화합물(2)+화합물(5)+화합물(6), 화합물(1)+화합물(2)+화합물(3)+화합물(5)+화합물(6), 또는 화합물(1)+화합물(2)+화합물(3)+화합물(4)+화합물(5)+화합물(6)이다. 더욱 바람직한 조합은, 화합물(1)+화합물(2)+화합물(3)+화합물(5)이다.

[0106] 화합물(1)은, 고분자 지지 배향형 소자에 적합시킬 목적으로, 조성물에 첨가된다. 화합물(1)의 바람직한 비율은, 소자의 장기적 신뢰성을 향상시키기 위해 약 0.03 중량% 이상이며, 소자의 표시 불량을 방지하기 위해

약 10 중량% 이하이다. 더욱 바람직한 비율은, 약 0.1 중량%~약 2 중량%의 범위이다. 특히 바람직한 비율은, 약 0.2 중량%~약 1.0 중량%의 범위이다.

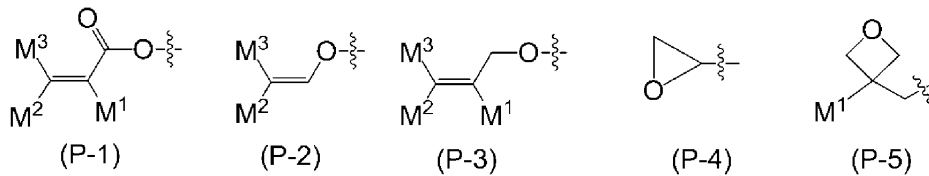
[0107] 화합물(2)의 바람직한 비율은, 유전율 이방성을 높이기 위해 약 10 중량% 이상이며, 하한 온도를 낮추기 위해, 또는 점도를 낮추기 위해 약 90 중량% 이하이다. 더욱 바람직한 비율은 약 15 중량%~약 75 중량%의 범위이다. 특히 바람직한 비율은 약 20 중량%~약 65 중량%의 범위이다.

[0108] 화합물(3)의 바람직한 비율은, 상한 온도를 높이기 위해, 또는 점도를 낮추기 위해 약 10 중량% 이상이며, 유전율 이방성을 높이기 위해 약 90 중량% 이하이다. 더욱 바람직한 비율은 약 20 중량%~약 85 중량%의 범위이다. 특히 바람직한 비율은 약 30 중량%~약 80 중량%의 범위이다.

[0109] 화합물(4)의 바람직한 비율은, 유전율 이방성을 높이기 위해 약 3 중량% 이상이며, 하한 온도를 낮추기 위해 약 25 중량% 이하이다. 더욱 바람직한 비율은 약 5 중량%~약 20 중량%의 범위이다. 특히 바람직한 비율은 약 5 중량%~약 15 중량%의 범위이다.

[0110] 화합물(5) 또는 화합물(6)은, 액정 분자의 배향을 제어할 목적으로, 조성물에 첨가된다. 화합물(5) 또는 화합물(6)의 바람직한 비율은, 액정 분자를 배향시키기 위해 약 0.05 중량% 이상이며, 소자의 표시 불량을 방지하기 위해 약 10 중량% 이하이다. 더욱 바람직한 비율은, 약 0.1 중량%~약 7 중량%의 범위이다. 특히 바람직한 비율은, 약 0.5 중량%~약 5 중량%의 범위이다.

[0111] 네째로, 성분 화합물의 바람직한 형태를 설명한다. 식(1)에 있어서, P^1 , P^2 , 및 P^3 는 독립적으로, 중합성기이다. 바람직한 P^1 , P^2 , 또는 P^3 는, 식(P-1)~식(P-5)으로 표시되는 거의 균으로부터 선택된 중합성기이다. 더욱 바람직한 P^1 , P^2 , 또는 P^3 는, 식(P-1), 식(P-2), 또는 식(P-3)으로 표시되는 기이다. 특히 바람직한 P^1 , P^2 , 또는 P^3 는, 식(P-1) 또는 식(P-2)으로 표시되는 기이다. 가장 바람직한 P^1 , P^2 , 또는 P^3 는, 식(P-1)으로 표시되는 기이다. 식(P-1)으로 표시되는 바람직한 기는, $-OCO-CH=CH_2$ 또는 $-OCO-C(CH_3)=CH_2$ 이다. 식(P-1)~식(P-5)의 파선은, 결합하는 부위를 나타낸다.



[0112] 식(P-1)~식(P-5)에 있어서, M^1 , M^2 , 및 M^3 는 독립적으로, 수소, 불소, 탄소수 1~5의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~5의 알킬이다. 바람직한 M^1 , M^2 , 또는 M^3 는, 반응성을 높이기 위해 수소 또는 메틸이다. 더욱 바람직한 M^1 은 수소 또는 메틸이며, 더욱 바람직한 M^2 또는 M^3 는 수소이다.

[0114] Sp^1 , Sp^2 , 및 Sp^3 는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 $-CH_2-$ 는, $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, 또는 $-OCOO-$ 로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 $-CH_2-CH_2-$ 는, $-CH=CH-$ 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있다. 바람직한 Sp^1 , Sp^2 , 또는 Sp^3 는, 단결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-CH=CH-$, 또는 $-CH=CH-CO-$ 이다. 더욱 바람직한 Sp^1 , Sp^2 또는 Sp^3 는, 단결합이다. 단, 환 A 및 환 C가 페닐일 때, Sp^1 및 Sp^3 는 단결합이다.

[0115] 환 A 및 환 C는 독립적으로, 시클로헥실, 시클로헥세닐, 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 테트라하이드로피란-2-일, 1,3-디옥산-2-일, 피리미딘-2-일, 또는 피리딘-2-일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있다. 바람직한 환 A 또는 환 C는, 페닐이다. 환 B는, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 1,4-페닐렌, 나프탈렌-1,2-디일, 나프탈렌-1,3-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 나프탈렌-1,5-디일, 나프탈렌-1,6-디일, 나프탈렌-1,7-디일, 나프탈렌-1,8-디일, 나프탈렌-2,3-디일, 나프탈렌-2,6-디일, 나프탈렌-2,7-디일, 테트라하이드로피란-2,5-디일, 1,3-디옥산-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 또는 피리딘-2,5-디일이며, 이들 환에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬로 치환될 수도 있다. 바람직한 환 B

는, 1,4-페닐렌 또는 2-플루오로-1,4-페닐렌이다.

[0116] Z^1 및 Z^2 는 독립적으로, 단결합 또는 탄소수 1~10의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서, 1개 이상의 $-CH_2-$ 는, $-O-$, $-CO-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 로 치환될 수도 있고, 그리고 1개 이상의 $-CH_2-CH_2-$ 는, $-CH=CH-$, $-C(CH_3)=CH-$, $-CH=C(CH_3)-$, 또는 $-C(CH_3)=C(CH_3)-$ 로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있다. 바람직한 Z^1 또는 Z^2 는, 단결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 이다. 더욱 바람직한 Z^1 또는 Z^2 는, 단결합이다.

[0117] a는, 0, 1, 또는 2이다. 바람직한 a는, 0 또는 1이다. b, c, 및 d는 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 또는 4이며, 그리고 b, c, 및 d의 합은, 1 이상이다. 바람직한 b, c, 및 d는, 1 또는 2이다. 단, 환 A 및 환 C가 페닐일 때, a는 1 또는 2이다. 따라서, 비페닐 골격을 가지는 중합성 화합물은 제외된다.

[0118] 식(2), 식(3), 및 식(4)에 있어서, R^1 은, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이다. 바람직한 R^1 은, 자외선 또는 열에 대한 안정성을 높이기 위해, 탄소수 1~12의 알킬이다. R^2 및 R^3 는 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐이다. 바람직한 R^2 또는 R^3 는, 점도를 낮추기 위해, 탄소수 2~12의 알케닐이며, 안정성을 높이기 위해 탄소수 1~12의 알킬이다. R^7 및 R^8 은 독립적으로, 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 1~12의 알콕시, 탄소수 2~12의 알케닐, 또는 탄소수 2~12의 알케닐 옥시이다. 바람직한 R^7 또는 R^8 은, 안정성을 높이기 위해 탄소수 1~12의 알킬이며, 유전율 이방성을 높이기 위해 탄소수 1~12의 알콕시이다.

[0119] 바람직한 알킬은, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 또는 옥틸이다. 더욱 바람직한 알킬은, 점도를 낮추기 위해 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 또는 헵틸이다.

[0120] 바람직한 알콕시는, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 펜틸옥시, 헥실옥시, 또는 헵틸옥시이다. 점도를 낮추기 위해, 더욱 바람직한 알콕시는, 메톡시 또는 에톡시이다.

[0121] 바람직한 알케닐은, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 4-펜테닐, 1-헥세닐, 2-헥세닐, 3-헥세닐, 4-헥세닐, 또는 5-헥세닐이다. 더욱 바람직한 알케닐은, 점도를 낮추기 위해 비닐, 1-프로페닐, 3-부테닐, 또는 3-펜테닐이다. 이들 알케닐에서의 $-CH=CH-$ 의 바람직한 입체 배치는, 2중 결합의 위치에 의존한다. 점도를 낮추기 위한 목적 등을 고려하여 1-프로페닐, 1-부테닐, 1-펜테닐, 1-헥세닐, 3-펜테닐, 3-헥세닐과 같은 알케닐에 있어서는 트랜스가 바람직하다. 2-부테닐, 2-펜테닐, 2-헥세닐과 같은 알케닐에 있어서는 시스가 바람직하다.

[0122] 바람직한 알케닐옥시는, 비닐옥시, 알릴옥시, 3-부테닐옥시, 3-펜테닐옥시, 또는 4-펜테닐옥시이다. 점도를 낮추기 위해, 더욱 바람직한 알케닐옥시는, 알릴옥시 또는 3-부테닐옥시이다.

[0123] 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 알킬의 바람직한 예는, 플루오로메틸, 2-플루오로에틸, 3-플루오로프로필, 4-플루오로부틸, 5-플루오로펜틸, 6-플루오로헥실, 7-플루오로헵틸, 또는 8-플루오로옥틸이다. 더욱 바람직한 예는, 유전율 이방성을 높이기 위해 2-플루오로에틸, 3-플루오로프로필, 4-플루오로부틸, 또는 5-플루오로펜틸이다.

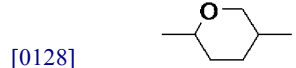
[0124] 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 알케닐의 바람직한 예는, 2,2-디플루오로비닐, 3,3-디플루오로-2-프로페닐, 4,4-디플루오로-3-부테닐, 5,5-디플루오로-4-펜테닐, 또는 6,6-디플루오로-5-헥세닐이다. 더욱 바람직한 예는, 점도를 낮추기 위해 2,2-디플루오로비닐 또는 4,4-디플루오로-3-부테닐이다.

[0125] 환 D는, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2,6-디플루오로-1,4-페닐렌, 피리미딘-2,5-디일, 1,3-디옥산-2,5-디일, 또는 테트라하이드로피란-2,5-디일이다. 바람직한 환 D는, 광학 이방성을 높이기 위해 1,4-페닐렌 또는 2-플루오로-1,4-페닐렌이다.

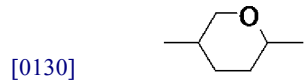
[0126] 환 E 및 환 F는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 2-플루오로-1,4-페닐렌, 또는 2,5-디플루오로-1,4-페닐렌이다. 바람직한 환 E 또는 환 F는 점도를 낮추기 위해, 또는 상한 온도를 높이기 위해, 1,4-시클로헥실렌

이며, 하한 온도를 낮추기 위해 1,4-페닐렌이다.

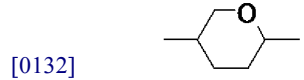
[0127] 환 Q 및 환 V는 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 1,4-페닐렌, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 1,4-페닐렌, 또는 테트라하이드로피란-2,5-디일이다. 바람직한 환 Q 또는 환 V는, 점도를 낮추기 위해 1,4-시클로헥실렌이며, 유전율 이방성을 높이기 위해 테트라하이드로피란-2,5-디일이며, 광학 이방성을 높이기 위해 1,4-페닐렌이다. 환 U는, 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌, 2-클로로-3-플루오로-1,4-페닐렌, 2,3-디플루오로-5-메틸-1,4-페닐렌, 3,4,5-트리플루오로나프탈렌-2,6-디일, 또는 7,8-디플루오로크로만-2,6-디일이다. 바람직한 환 U는, 유전율 이방성을 높이기 위해 2,3-디플루오로-1,4-페닐렌이다. 테트라하이드로피란-2,5-디일은,



[0129] 또는



[0131]이며, 바람직하게는



[0133]이다.

[0134] Z^3 는, 단결합, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, 또는 $-\text{OCF}_2-$ 이다. 바람직한 Z^3 는, 점도를 낮추기 위해 단결합이다. Z^4 는, 단결합, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{COO}-$, 또는 $-\text{OCO}-$ 이다. 바람직한 Z^4 는, 점도를 낮추기 위해 단결합이며, 하한 온도를 낮추기 위해 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 이며, 상한 온도를 높이기 위해 $-\text{COO}-$ 또는 $-\text{OCO}-$ 이다. Z^7 및 Z^8 은 독립적으로, 단결합, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{COO}-$, 또는 $-\text{OCO}-$ 이다. 바람직한 Z^7 또는 Z^8 은, 점도를 낮추기 위해 단결합이며, 유전율 이방성을 높이기 위해 메틸렌옥시이다.

[0135] X^1 및 X^2 는 독립적으로, 수소 또는 불소이다. 바람직한 X^1 또는 X^2 는, 유전율 이방성을 높이기 위해 불소이다.

[0136] Y^1 은, 불소, 염소, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알킬, 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 1~12의 알콕시, 또는 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 탄소수 2~12의 알케닐옥시이다. 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 알킬의 바람직한 예는, 트리플루오로메틸이다. 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 알콕시의 바람직한 예는, 트리플루오로메톡시이다. 1개 이상의 수소가 불소 또는 염소로 치환된 알케닐옥시의 바람직한 예는, 트리플루오로비닐옥시이다. 바람직한 Y^1 은, 하한 온도를 낮추기 위해 불소이다.

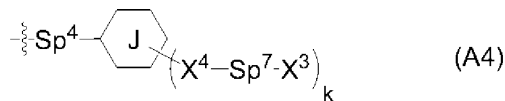
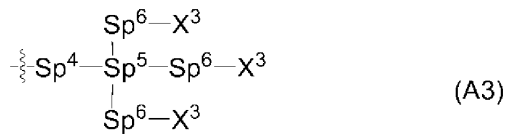
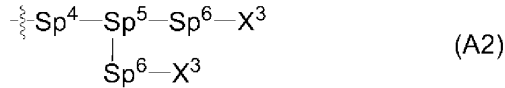
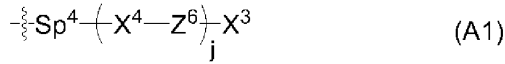
[0137] e는, 1, 2, 3, 또는 4이다. 바람직한 e는, 하한 온도를 낮추기 위해 2이며, 유전율 이방성을 높이기 위해 3이다. f는, 1, 2, 또는 3이다. 바람직한 f는 점도를 낮추기 위해 1이며, 상한 온도를 높이기 위해 2 또는 3이다. p는, 1, 2, 또는 3이며, q는, 0 또는 1이며, p와 q의 합은 3 이하이다. 바람직한 p는 점도를 낮추기 위해 1이며, 상한 온도를 높이기 위해 2 또는 3이다. 바람직한 q는 점도를 낮추기 위해 0이며, 하한 온도를 낮추기 위해 1이다.

[0138] 식(5) 및 식(6)에 있어서, R^5 는, 극성기이다. 극성기를 가지는 극성 화합물은, 조성물에 첨가하므로, 안정적인 것이 바람직하다. 극성 화합물을 조성물에 첨가했을 때, 이 화합물이 소자의 전압 유지율을 낮추지 않는 것이 바람직하다. 극성 화합물은, 낮은 휘발성을 가지는 것이 바람직하다. 바람직한 몰 질량은 130 g/mol 이상이다. 더욱 바람직한 몰 질량은 150 g/mol~500 g/mol의 범위이다. 바람직한 극성 화합물은, 아크릴로일옥시($-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}_2$), 메타크릴로일옥시($-\text{OCO}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{C}=\text{CH}_2$)와 같은 중합성기를 가지고 있지 않다.

[0139] 극성기는, 유리 기관 또는 금속 산화물 막의 표면과의 비공유 결합적인 상호작용을 가진다. 바람직한 극성기는, 질소, 산소, 유황, 및 인으로부터 선택된 헤테로 원자를 가진다. 바람직한 극성기는, 이들 헤테로 원자를 하나 이상, 또는 2개 이상을 가진다. 더욱 바람직한 극성기는, 알코올, 제1급, 제2급, 및 제3급의 아민, 케톤, 카르

본산, 티올, 에스테르, 에테르, 티오에테르, 및 이들의 조합의 군으로부터 선택된 화합물로부터 수소를 제거하는 것에 의해 유도된 1가의 기이다. 이들 기의 구조는, 직쇄형, 분지형, 환형, 또는 이들의 조합이라도 된다. 특히 바람직한 극성기는, 1개 이상의 OH 구조의 산소 원자 또는 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자를 가진다. 가장 바람직한 극성기는 하이드록시기(탄소-OH)이다.

[0140] 극성기(R⁵)의 예는, 식(A1)~식(A4)으로 표시되는 기이다.

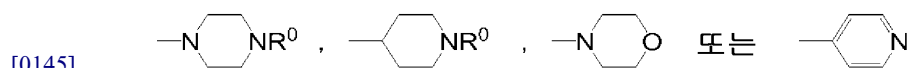


[0141]

[0142] 식(A1)~식(A4)에 있어서, Sp⁴, Sp⁶, 및 Sp⁷은 독립적으로, 단결합 또는 기(-Sp''-X''-)이며, 그리고, X''는, MES기 또는 R⁴에 결합한다. Sp''는, 탄소수 1~20의 알킬렌이며, 바람직하게는 탄소수 1~12의 알킬렌이며, 이 알킬렌에 있어서 1개 이상의 -CH₂-는, -O-, -S-, -NH-, -N(R⁰)-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, -S-CO-, -CO-S-, -N(R⁰)-CO-O-, -O-CO-N(R⁰)-, -N(R⁰)-CO-N(R⁰)-, -CH=CH-, 또는 -C≡C-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소, 염소, 또는 -CN으로 치환될 수도 있고, X''는, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, -CO-N(R⁰)-, -N(R⁰)-CO-, -N(R⁰)-CO-N(R⁰)-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -CF₂CF₂-, -CH=N-, -N=CH-, -N=N-, -CH=CR⁰-, -CY²=CY³-, -C≡C-, -CH=CH-CO-O-, -O-CO-CH=CH-, 또는 단결합이며, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, 그리고 Y² 및 Y³는 독립적으로, 수소, 불소, 염소, 또는 -CN이다. 바람직한 X''는, -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -O-COO-, -CO-NR⁰-, -NR⁰-CO-, -NR⁰-CO-NR⁰-, 또는 단결합이다. Sp⁵는, >CH-, >CR¹¹-, >N-, 또는 >C<이다. 즉, 식(A2)에서의 Sp⁵는, >CH-, >CR¹¹-, 또는 >N-이며, 식(A3)에서의 Sp⁵는 >C<인 것을 의미한다.

[0143] 바람직한 Sp''는, -(CH₂)_{p1}-, -(CH₂CH₂O)_{q1}-CH₂CH₂-, -CH₂CH₂-S-CH₂CH₂-, 또는 -CH₂CH₂-NHCH₂CH₂-이며, 여기서 p1은 1~12의 정수이며, q1은 1~3의 정수이다. 바람직한 기(-Sp''-X''-)는, -(CH₂)_{p1}-, -(CH₂)_{p1}-O-, -(CH₂)_{p1}-O-CO-, -(CH₂)_{p1}-O-CO-O-이며, 여기서 p1 및 q1은, 전술한 의미를 가진다. 더욱 바람직한 기 Sp''는, 에틸렌, 프로필렌, 부틸렌, 펜틸렌, 헥실렌, 헵틸렌, 옥틸렌, 노닐렌, 데실렌, 운데실렌, 도데시렌, 옥타데시렌, 에틸렌옥시에틸렌, 메틸렌옥시부틸렌, 에틸렌티오에틸렌, 에틸렌-N-메틸이미노에틸렌, 1-메틸알킬렌, 에테닐렌, 프로페닐렌, 및 부테닐렌이다.

[0144] X³는, -NH₂, -NHR¹¹, -NR¹¹₂, -OR¹¹, -OH, -COOH, -SH, -SR¹¹,



[0146] 이며, 여기서 R¹¹은, 탄소수 1~15의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -C≡C-, -CH=CH-, -COO-

, -OCO-, -CO-, 또는 -O-로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이다.

[0147] X⁴는, -O-, -CO-, -NH-, -NR¹¹-, -S-, 또는 단결합이며, Z⁶는, 탄소수 1~15의 알킬렌, 탄소수 5~6의 지환식기, 또는 1개 이상의 환과 알킬렌의 조합을 나타내고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, -OH, -OR¹¹, -COOH, -NH₂, -NHR¹¹, -NR¹¹₂, 불소, 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R¹¹은 전술한 의미를 가진다. j는, 0, 1, 2, 또는 3이다.

[0148] 특히 바람직한 질소 함유기 R⁵는, -NH₂, -NH-(CH₂)_{n3}H, -(CH₂)_n-NH₂, -(CH₂)_n-NH-(CH₂)_{n3}H, -NH-(CH₂)_n-NH₂, -NH-(CH₂)_n-NH-(CH₂)_{n3}H, -(CH₂)_{n1}-NH-(CH₂)_{n2}-NH₂, -(CH₂)_{n1}-NH-(CH₂)_{n2}-NH-(CH₂)_{n3}H, -O-(CH₂)_n-NH₂, -(CH₂)_{n1}-O-(CH₂)_n-NH₂, -(CH₂)_{n1}-NH-(CH₂)_{n2}-OH, -O-(CH₂)_{n1}-NH-(CH₂)_{n2}-NH₂, -O-(CH₂)_{n1}-NH-(CH₂)_{n2}-OH, 또는 -(CH₂)_{n1}-NH-(CH₂)_{n2}-NH-(CH₂)_{n3}H이며, 여기서 n, n1, n2, 및 n3는 독립적으로, 1~12의 정수이며, 바람직하게는 1, 2, 3, 또는 4이다.

[0149] 특히 바람직한 질소 비함유기 R⁵는, -OH, -(CH₂)_n-OH, -O-(CH₂)_n-OH, -[O-(CH₂)_{n1}]_{n2}-OH, -COOH, -(CH₂)_n-COOH, -O-(CH₂)_n-COOH, 또는 -[O-(CH₂)_{n1}]_{n2}-COOH이며, 여기서 n, n1, 및 n2는 독립적으로, 1~12의 정수이며, 바람직하게는 1, 2, 3, 또는 4이다.

[0150] 액정 조성물로서의 높은 용해도의 관점에서, R⁵는 -OH 또는 -NH₂인 것이 특히 바람직하다. -OH는, 높은 앵커력을 가지므로 -O-, -CO-, 또는 -COO-보다 바람직하다. 복수의 헤테로 원자(질소, 산소)를 가지는 기는, 특히 바람직하다. 이와 같은 극성기를 가지는 화합물은, 낮은 농도라도 유효하다.

[0151] 식(5)에 있어서, MES는 1개 이상의 환을 구비하는 메소젠기이다. 메소젠기는, 당업자에게 주지(周知)이다. 메소젠기는, 화합물이 액정상(중간상)을 가질 때, 액정상의 형성에 기여하는 부분을 의미한다. 화합물(5)의 바람직한 예는, 화합물(5-1)이다.

[0152] 식(5-1)에 있어서, 환 G 및 환 I는 독립적으로, 탄소수 6~25의 방향족기, 탄소수 5~25의 복소 방향족기, 탄소수 3~25의 지환식기, 또는 탄소수 4~25의 복소 지환식기이며, 이들 기는 축합환이라도 되며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 기 T로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서 바람직한 탄소의 수는 4~25이다. 기 T의 의미는, 이 단락의 마지막에서 설명한다. 바람직한 환 G 또는 환 I는, 1,4-페닐렌, 나프탈렌-1,4-디일, 나프탈렌-2,6-디일(이들 3개의 기에 있어서 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는, 질소(>N-)로 치환될 수도 있다), 1,4-시클로헥실렌(이 기에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -O- 또는 -S-로 치환될 수도 있다), 3,3'-비시클로부틸리렌, 1,4-시클로헥세닐렌, 비시클로[1.1.1]헵탄-1,3-디일, 비시클로[2.2.2]옥탄-1,4-디일, 스피로[3.3]헵탄-2,6-디일, 피페리딘-1,4-디일, 데카하이드로나프탈렌-2,6-디일, 1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌-2,6-디일, 인단-2,5-디일, 옥타하이드로-4,7-메타노인단-2,5-디일, 또는 퍼하이드로시클로펜타[a]페난트렌-3,17-디일(특히, 고난-3,17-디일)이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는 기 T로 치환될 수도 있고, 여기서 기 T는, -OH, -(CH₂)_i-OH, 할로겐, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, -N(R⁰)₂, -(CH₂)_i-N(R⁰)₂, 탄소수 6~20의 아릴 또는 헤테로아릴, 탄소수 1~25의 알킬, 알콕시, 탄소수 2~25의 알킬카르보닐, 알콕시카르보닐, 알킬카르보닐옥시, 또는 알콕시카르보닐옥시이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는, 1, 2, 3, 또는 4이다.

[0153] Z⁵는, 단결합, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -(CH₂)_i-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -(CF₂)_i-, -CH=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, 또는 -C(R⁰)₂-이다. R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, i는, 1, 2, 3, 또는 4이다. 바람직한 Z⁵는, 단결합이다.

[0154] R⁵는, 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-

, -OCO-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이며, 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는, 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 단 R⁵는, OH 구조의 산소 원자, SH 구조의 유황 원자, 및 제1급, 제2급, 또는 제3급의 아민 구조의 질소 원자 중 하나 이상을 가진다. 바람직한 R⁵는, 1개 이상의 >NH, -OH, 또는 -SH를 가진다. R⁶는, 수소, 할로젠, 탄소수 1~25의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 제3급 탄소(>CH-)는, 질소(>N-)로 치환될 수도 있고, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 수소는, 불소 또는 염소로 치환될 수도 있고, 여기서 R⁰는, 수소 또는 탄소수 1~12의 알킬이다. 바람직한 R⁶는, 알킬이다.

- [0155] 방향족기는, 아릴 또는 치환된 아릴을 지칭한다. 복소 방향족기는, 헤테로아릴 또는 치환된 헤테로아릴을 가리킨다. 헤테로아릴은, 1개 이상의 헤테로 원자를 가지는 방향족기를 나타낸다. 아릴 및 헤테로아릴은 단환 또는 다환 중 어느 하나라도 된다. 즉 이들 기는 1개 이상의 환을 포함하고, 이 환은 축합(예를 들면, 나프틸)되어도 되고, 2개의 환은 공유 결합으로 연결(예를 들면, 비페닐)되어도 되거나, 또는 축합환 및 연결환의 조합을 가질 수도 있다. 바람직한 헤테로아릴은, 질소, 산소, 유황, 및 인의 군으로부터 선택된 1개 이상의 헤테로 원자를 가진다.
- [0156] 바람직한 아릴 또는 헤테로아릴은, 탄소수 6~25를 가지고, 5원환, 6원환, 또는 7원환이라도 된다. 바람직한 아릴 또는 헤테로아릴은, 단환이라도 되고, 2환 또는 3환이라도 된다. 이들 기는 축합환이라도 되고, 치환되어도 된다.
- [0157] 바람직한 아릴은, 벤젠, 비페닐, 터페닐, [1,1':3',1"]터페닐, 나프탈렌, 안트라센, 비나프틸, 페난트렌, 피렌, 디하이드로피렌, 크리센, 페릴렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌, 플루오렌, 인텐, 인데노플루오렌, 스피로비플루오렌으로부터 1개의 수소를 제거하는 것에 의해 유도되는 1가의 기이다.
- [0158] 바람직한 헤테로아릴은, 피롤, 피라졸, 이미다졸, 1, 2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 테트라졸, 퓨란, 티오펜, 셀레노펜, 옥사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸 등의 5원환 화합물, 또는 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진 등의 6원환 화합물로부터 1개의 수소를 제거하는 것에 의해 유도되는 1가의 기이다.
- [0159] 바람직한 헤테로아릴은, 인돌, 이소인돌, 인돌리진, 인다졸, 벤조이미다졸, 벤조트리아졸, 퓨린, 나프타이미다졸, 페난트라이미다졸, 피리다이미다졸, 피라진이미다졸, 퀴족살린이미다졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 벤조티아졸, 벤조퓨란, 이소벤조퓨란, 디벤조퓨란, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 프테리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 벤조이소퀴놀린, 아크리딘, 페노티아진, 페녹사진, 벤조피리다진, 벤조피리미진, 퀴녹살린, 페나진, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트리딘, 페난트롤린, 티에노[2,3b]티오펜, 티에노[3,2b]티오펜, 디티에노티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 벤조티아디아조치오펜 등의 축합환 화합물로부터 1개의 수소를 제거하는 것에 의해 유도되는 1가의 기이기도 하다. 바람직한 헤테로아릴은, 이들 5원환, 6원환, 축합환으로부터 선택된 2개의 기를 조합한 환으로부터 1개의 수소를 제거하는 것에 의해 유도되는 1가의 기이기도 하다. 이들 헤테로아릴은, 알킬, 알콕시, 티오알킬, 불소, 플루오로알킬, 아릴, 또는 헤테로아릴로 치환되어도 된다.
- [0160] 지환식기 및 복소 지환식기는, 포화라도 되고, 불포화라도 된다. 즉, 이들 기는, 단결합만을 가져도 되고, 단결합과 다중 결합의 조합을 가져도 된다. 불포화의 환보다 포화의 환이 바람직하다. 바람직한 복소 지환식기는, 질소, 산소, 유황, 및 인으로부터 선택된 1개 이상의 헤테로 원자를 가진다.
- [0161] 지환식기 및 복소 지환식기는, 1개의 환이라도 되고, 복수의 환이라도 된다. 이들 기의 바람직한 예는, 탄소수 3~25의 단환, 2환, 또는 3환이며, 이들 기는 축합환이라도 되고, 치환되어도 된다. 이들 기의 바람직한 예는, 5원환, 6원환, 7원환, 또는 8원환이며, 이들 기에 있어서, 1개 이상의 탄소는 규소로 치환될 수도 있고, 1개 이상의 >CH-는 >N-으로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 -CH₂-는 -O- 또는 -S-로 치환될 수도 있다.
- [0162] 바람직한 지환식기 및 복소 지환식기는, 시클로펜탄, 테트라하이드로퓨란, 테트라하이드로티오퍼란, 피롤리딘 등의 5원환, 시클로헥산, 시클로헥센, 테트라하이드로피란, 테트라하이드로티오피란, 1,3-디옥산, 1,3-디티안,

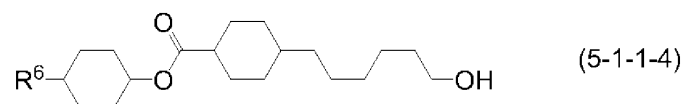
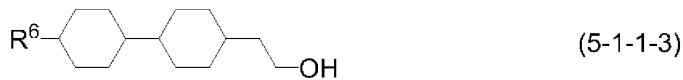
피페리딘 등의 6원환, 시클로헥탄 등의 7원환, 테트라하이드로나프탈렌, 데카하이드로나프탈렌, 인단, 비시클로[1.1.1]펜탄, 비시클로[2.2.2]옥탄, 스피로[3.3]헵탄, 옥타하이드로-4,7-메타노인단 등의 축합환으로부터 2개의 수소를 제거하는 것에 의해 유도되는 2가의 기이다.

[0163] h는, 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5이다.

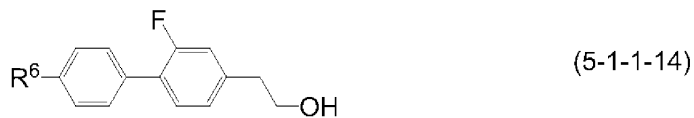
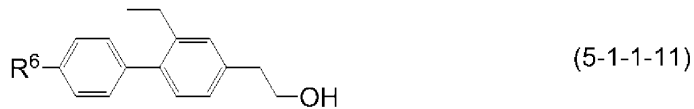
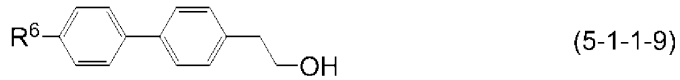
[0164] 식(6)에 있어서, R⁴는 탄소수 4~20의 알킬이며, 이 알킬에 있어서, 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 탄소수 3~8의 시클로알킬렌으로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있다. g는, 1 또는 2이며, 바람직하게는 1이다.

[0165] 바람직한 R⁴는, 탄소수 4~20의 알킬이다. 더욱 바람직한 R⁴는, 탄소수 6~18의 알킬이다. 1개 이상의 -CH₂-는, -CH=CH-, -CF=CH-, -CH=CF-, -C≡C-, 또는 -O-로 치환될 수도 있고, 그리고, 1개 이상의 수소는 불소 또는 염소로 치환될 수도 있다.

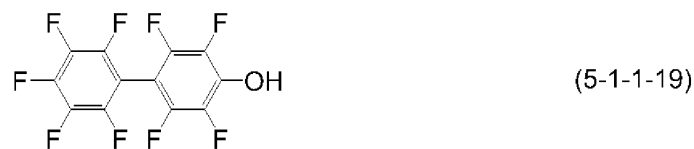
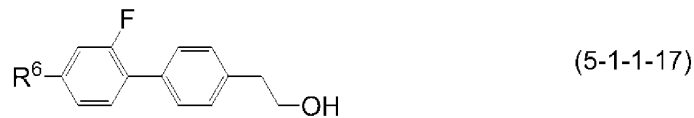
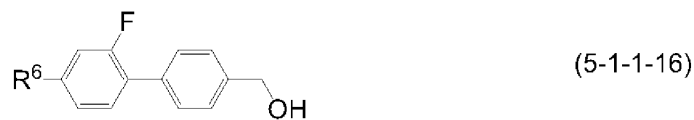
[0166] 특히 바람직한 화합물(5-1)은, 하기 화합물로부터 선택된다.



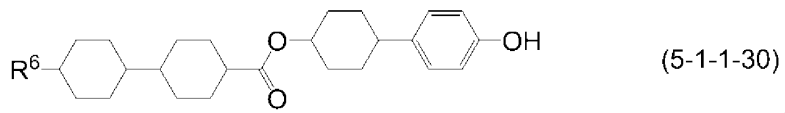
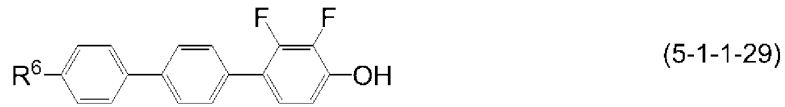
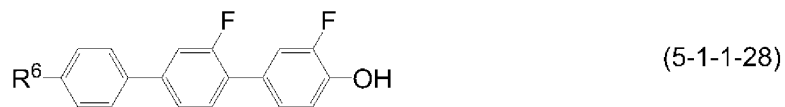
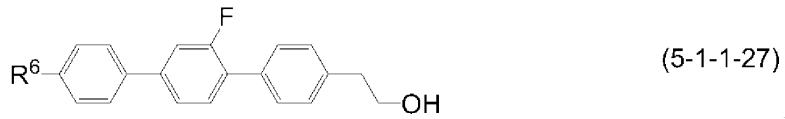
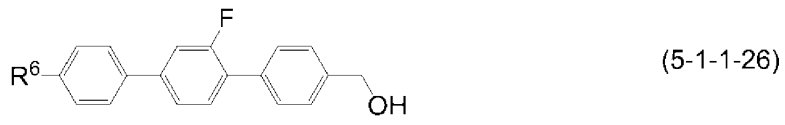
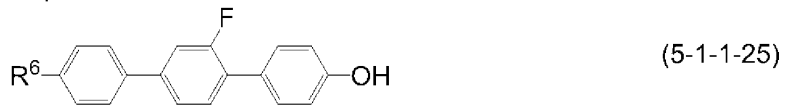
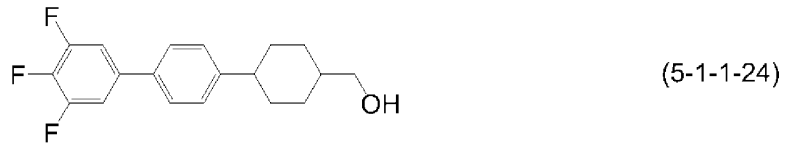
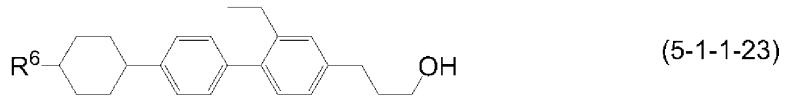
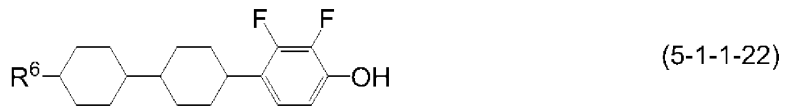
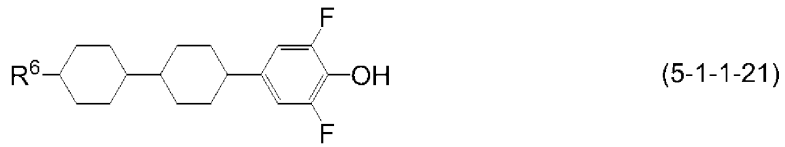
[0167]



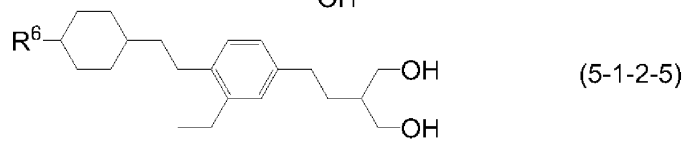
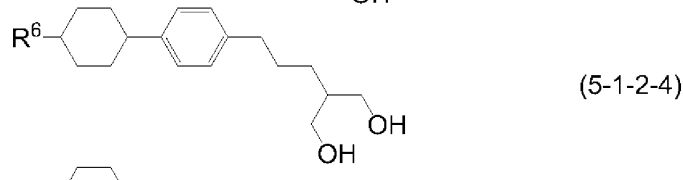
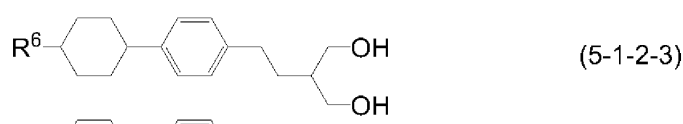
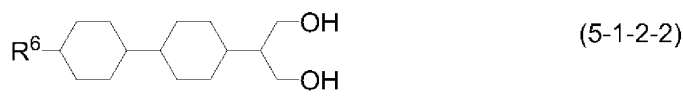
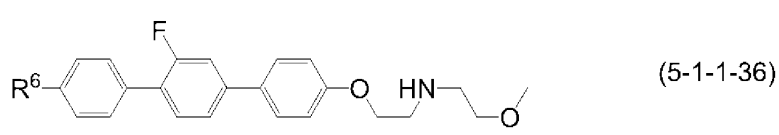
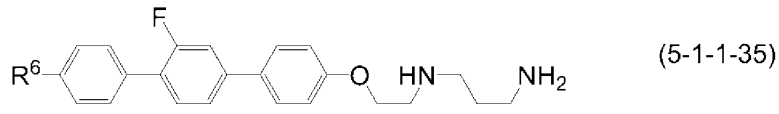
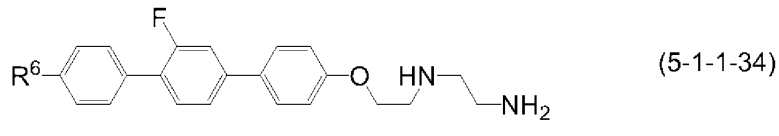
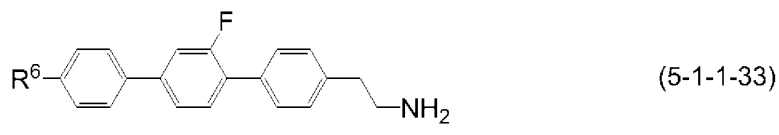
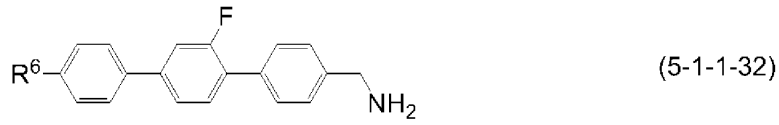
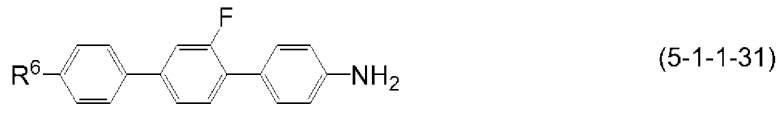
[0168]



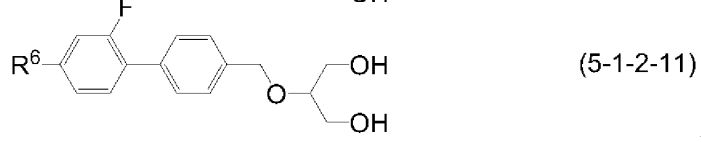
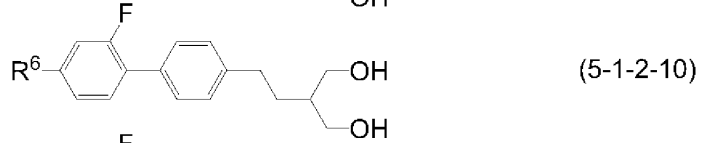
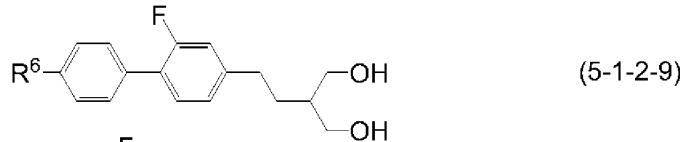
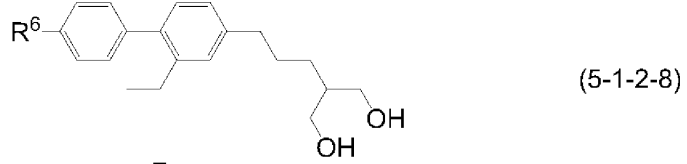
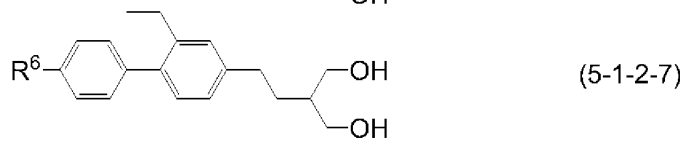
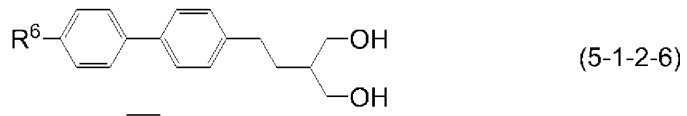
[0169]



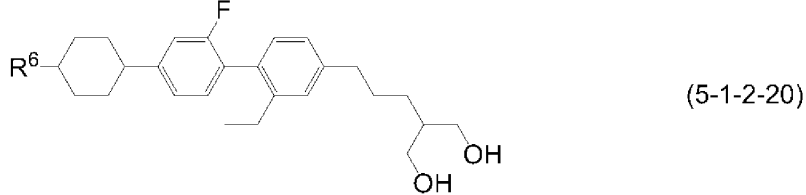
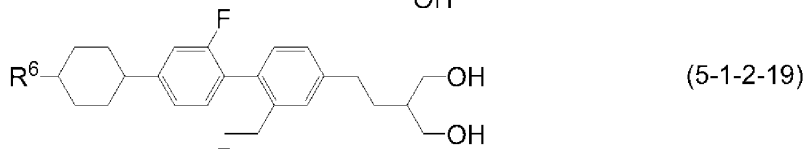
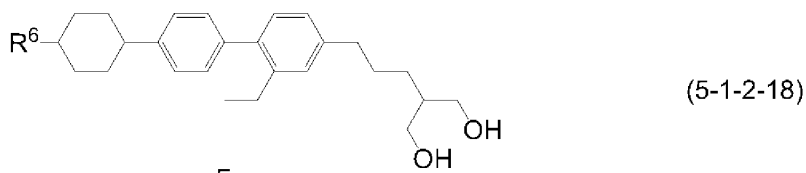
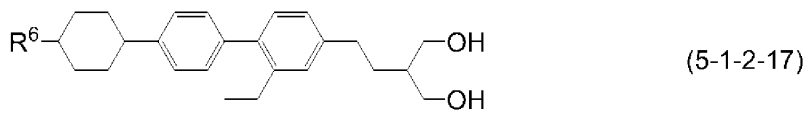
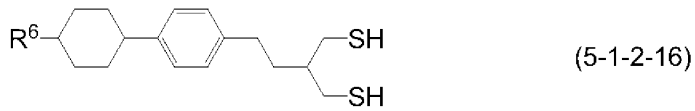
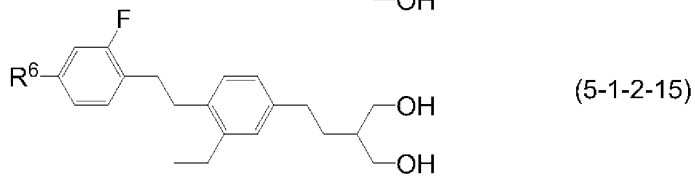
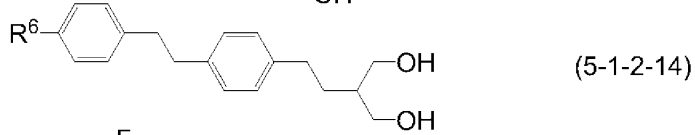
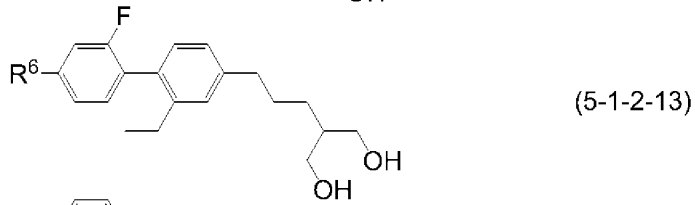
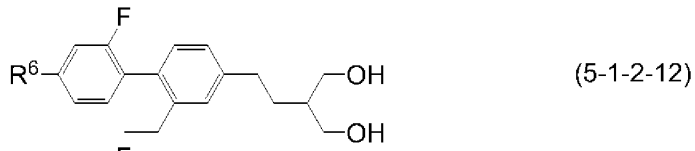
[0170]



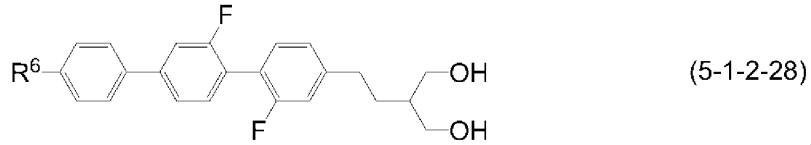
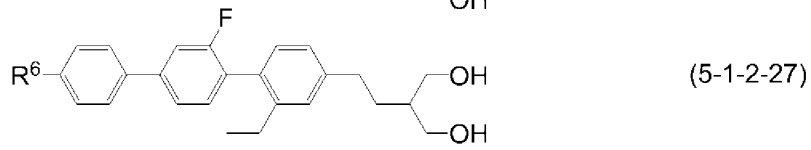
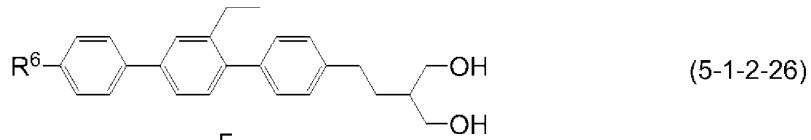
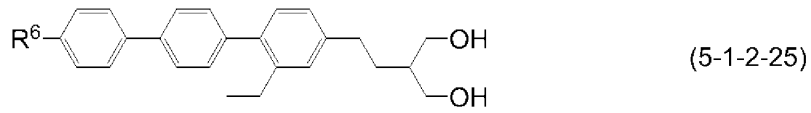
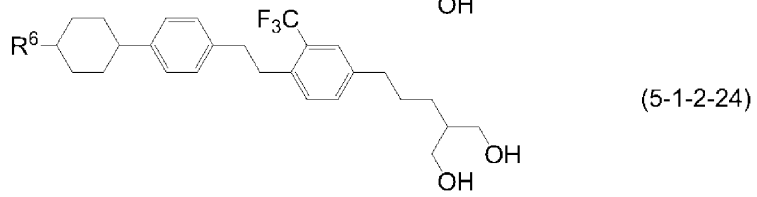
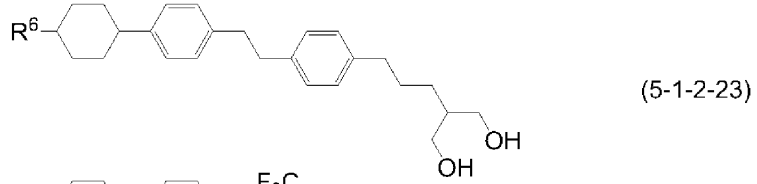
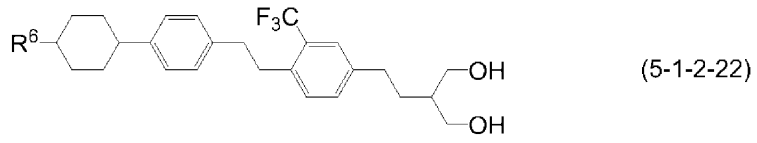
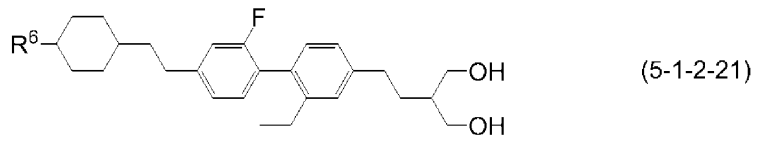
[0171]



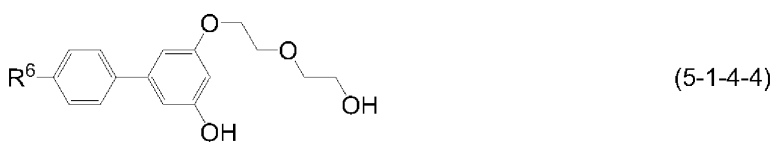
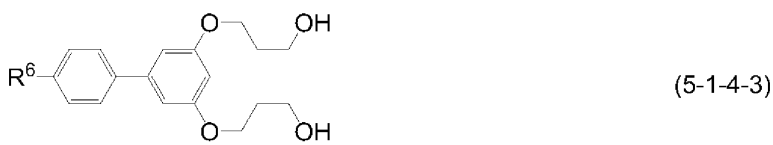
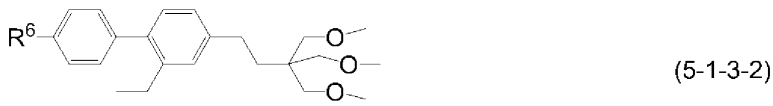
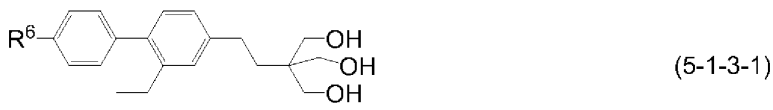
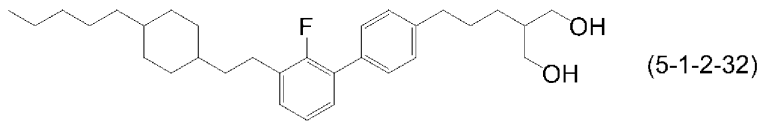
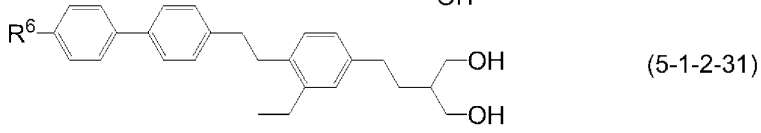
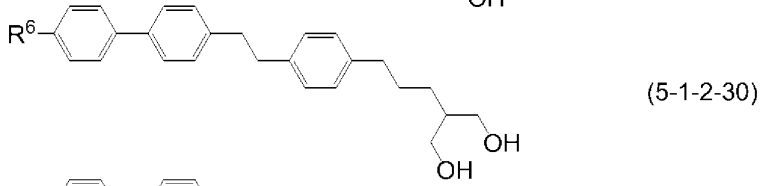
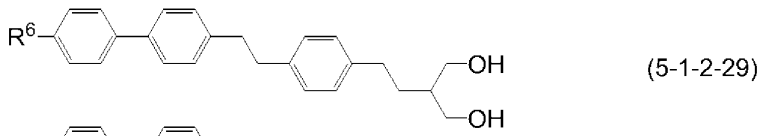
[0172]



[0173]



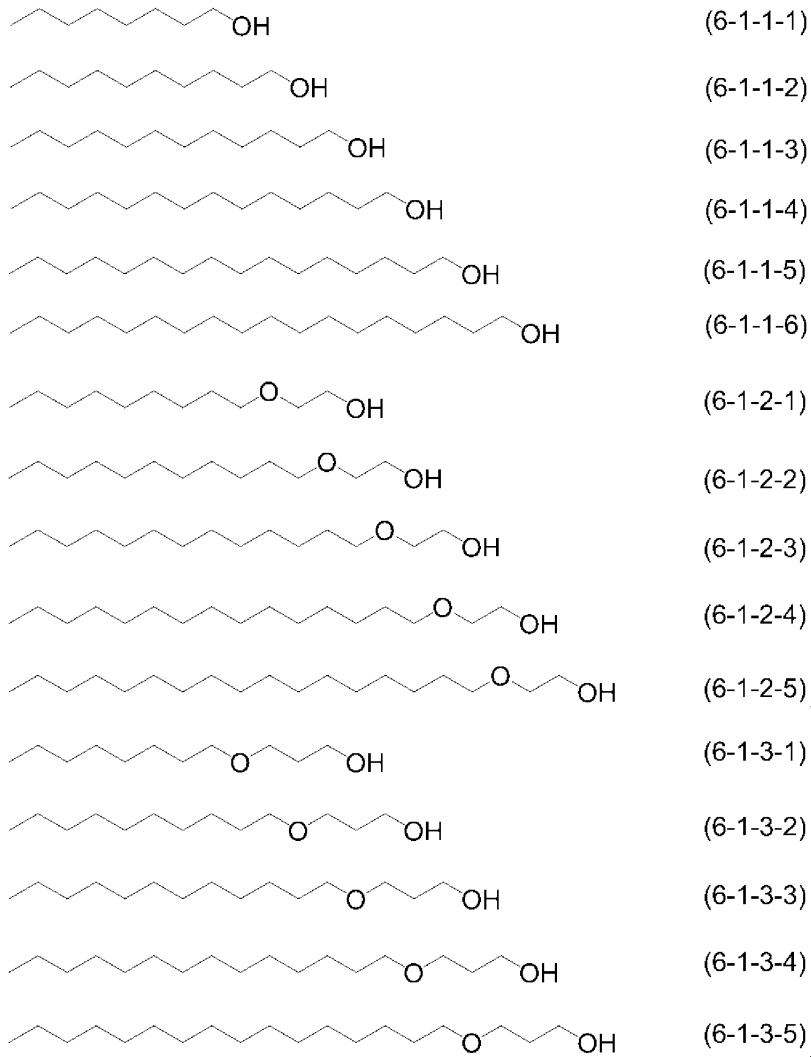
[0174]



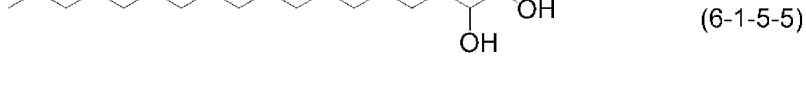
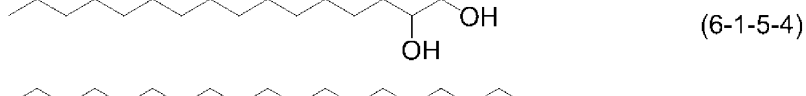
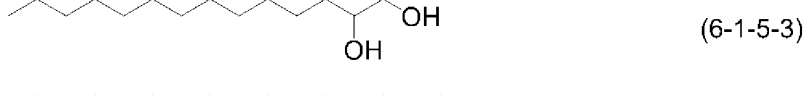
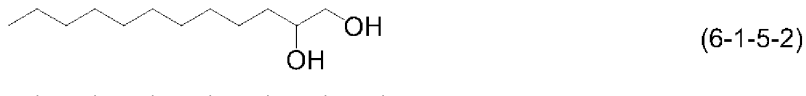
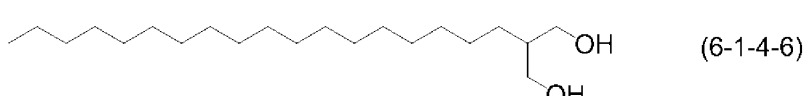
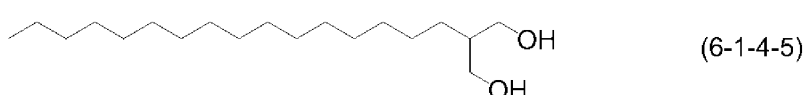
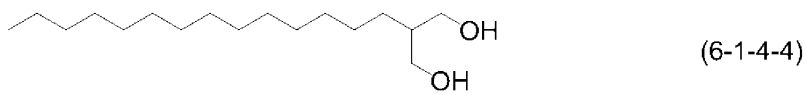
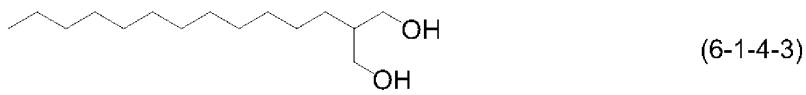
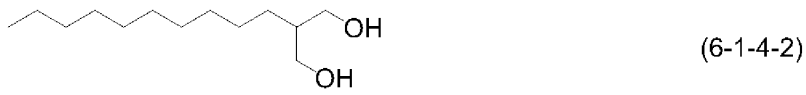
[0175]

[0176] 식(5-1-1-1)~식(5-1-4-4)에 있어서, R⁶는 탄소수 1~8의 알킬 또는 불소이다.

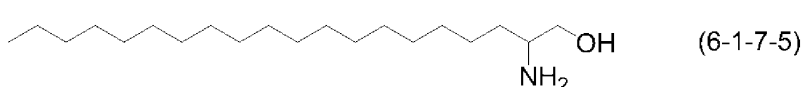
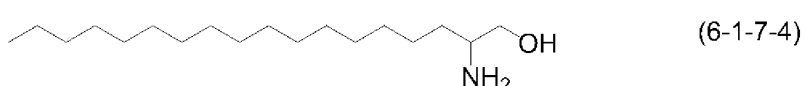
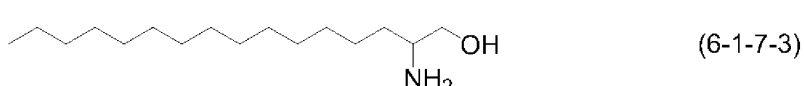
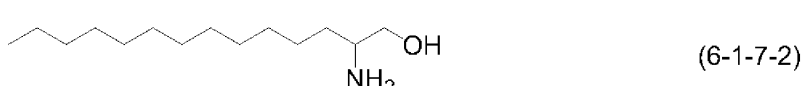
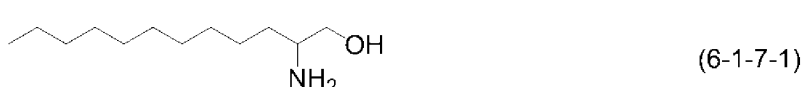
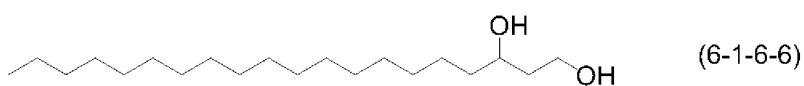
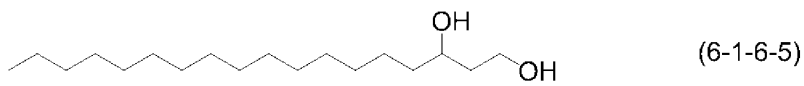
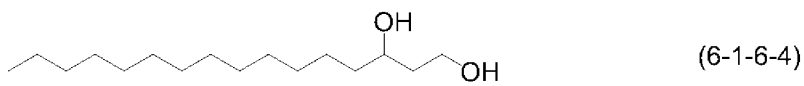
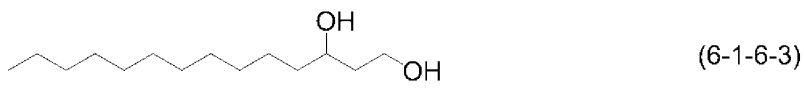
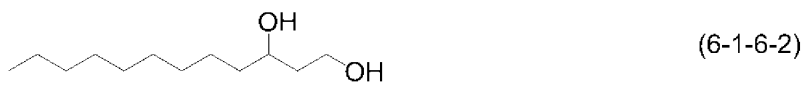
[0177] 특히 바람직한 화합물(6-1)은, 하기 화합물(6-1-1-1)~화합물(6-1-29-1)로부터 선택된다.



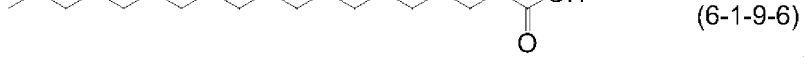
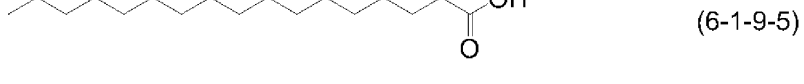
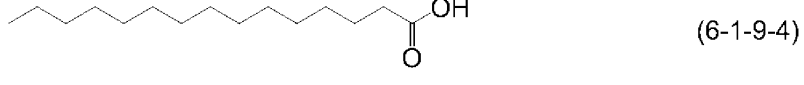
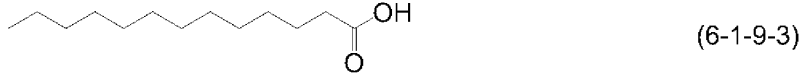
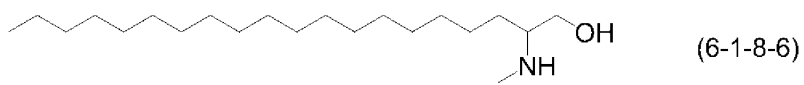
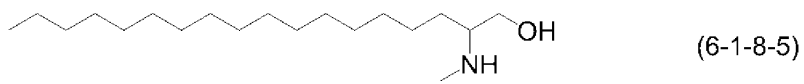
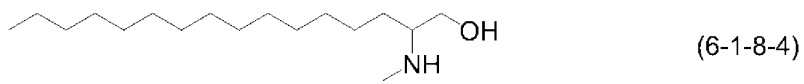
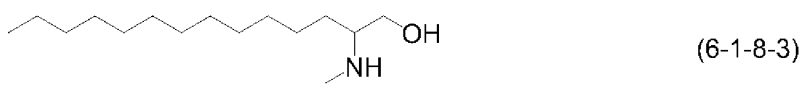
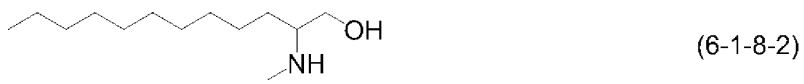
[0178]



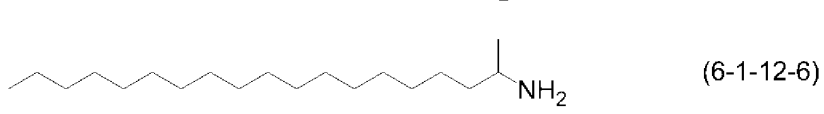
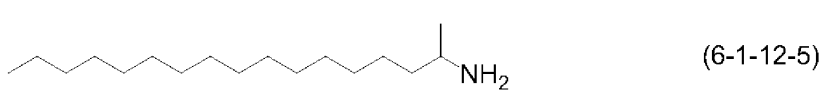
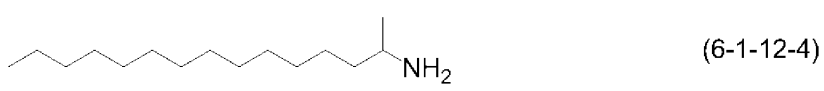
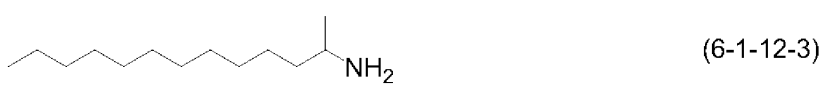
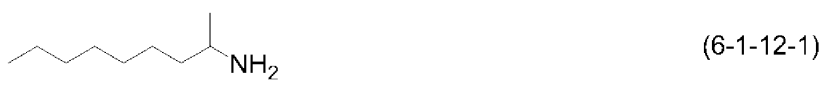
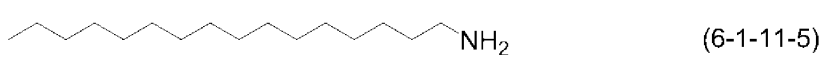
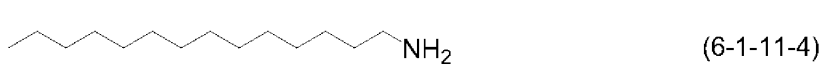
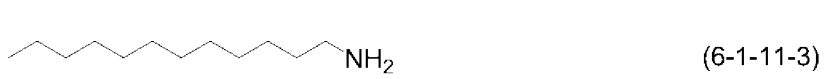
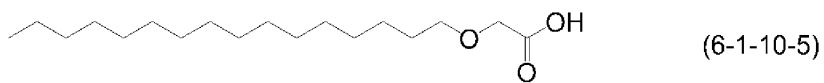
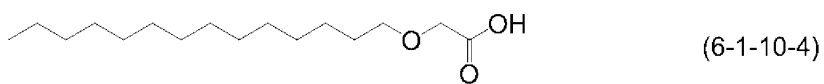
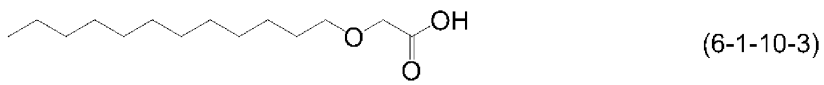
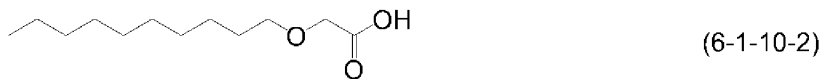
[0179]



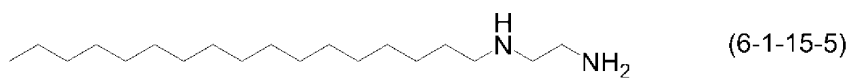
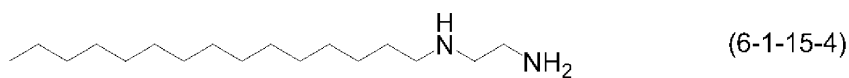
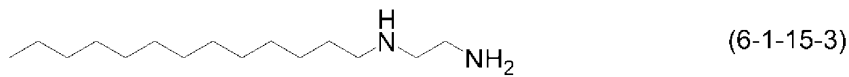
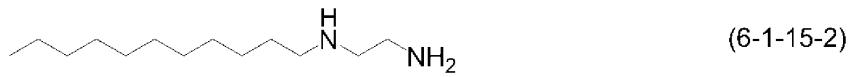
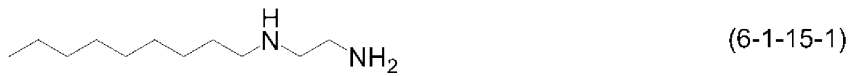
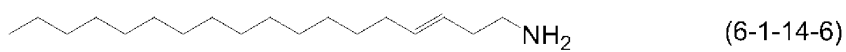
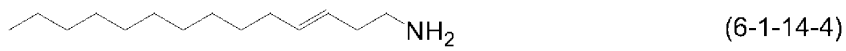
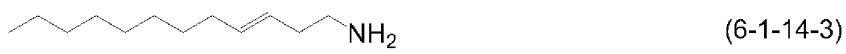
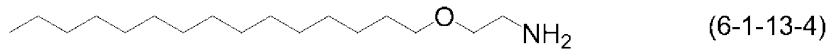
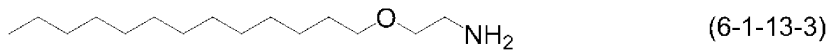
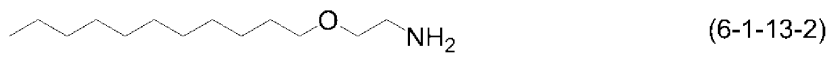
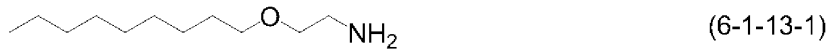
[0180]



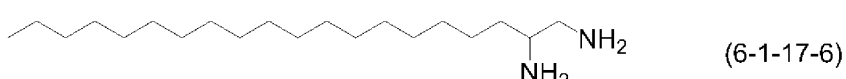
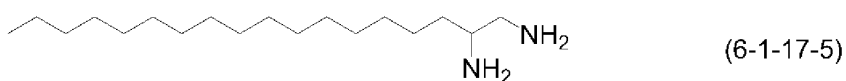
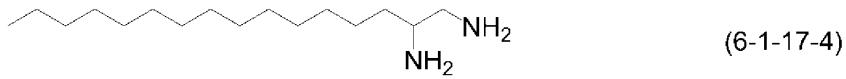
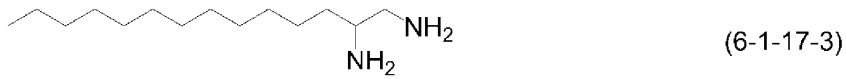
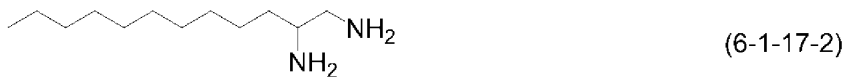
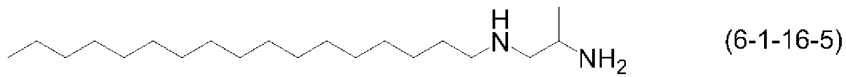
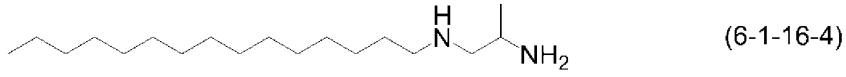
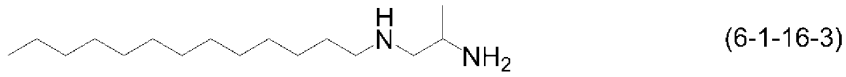
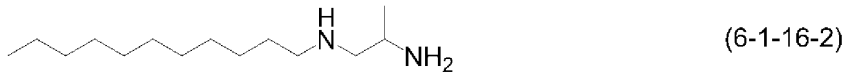
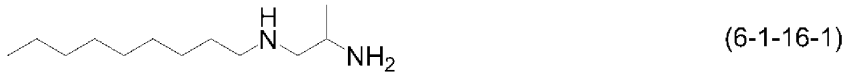
[0181]



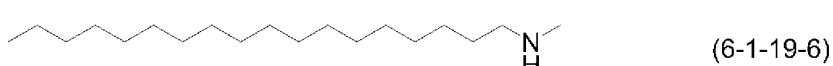
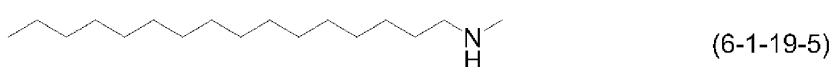
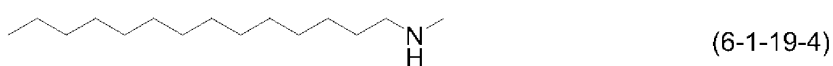
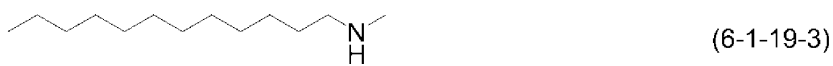
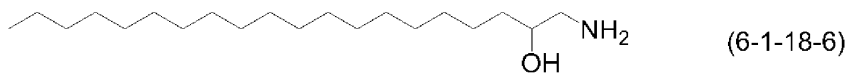
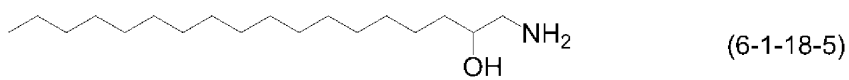
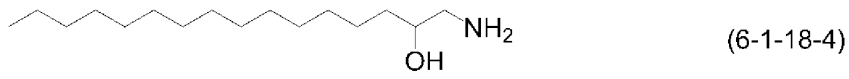
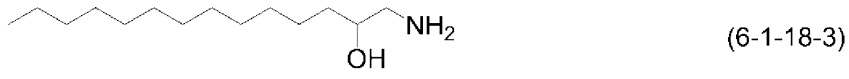
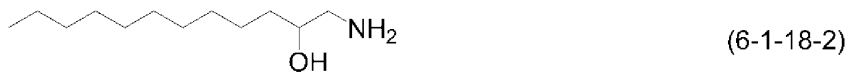
[0182]



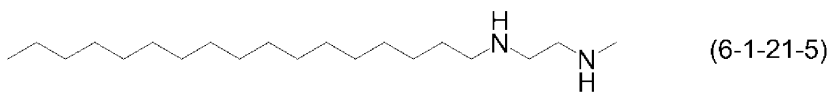
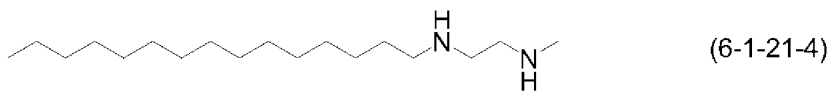
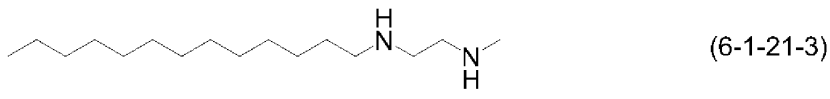
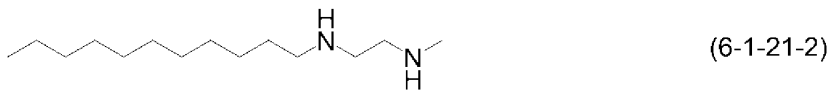
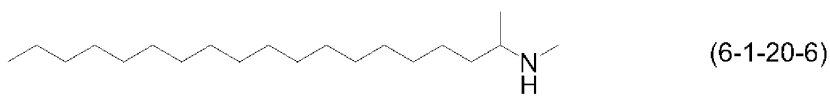
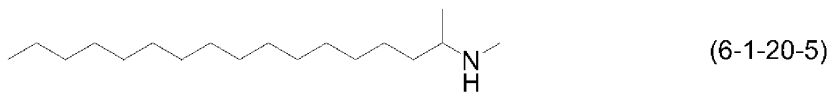
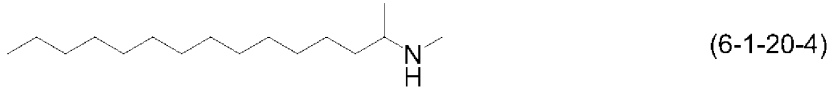
[0183]



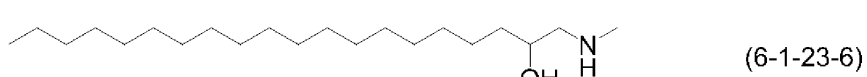
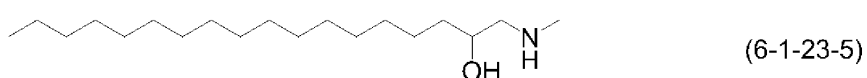
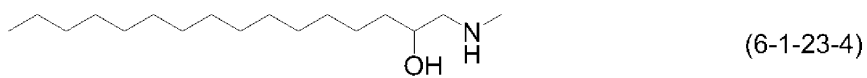
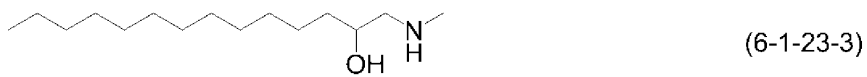
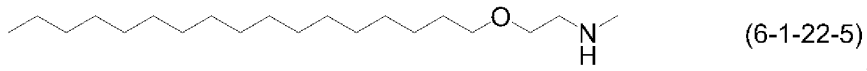
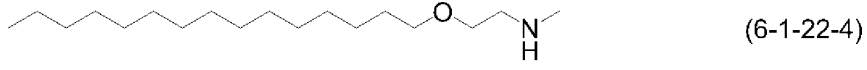
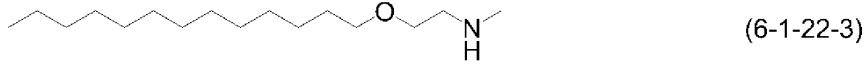
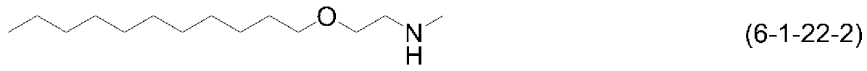
[0184]



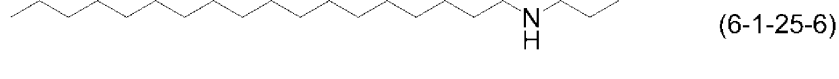
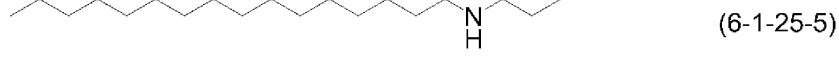
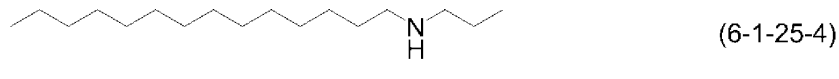
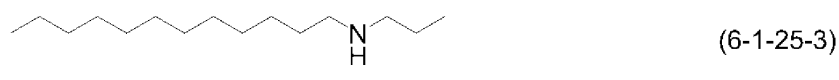
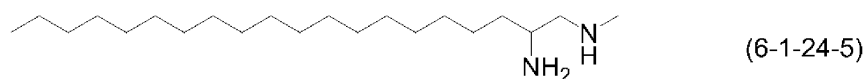
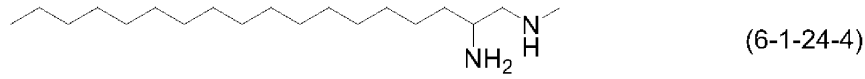
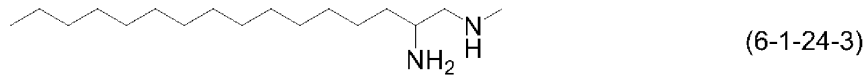
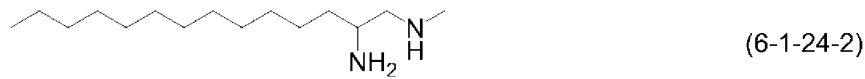
[0185]



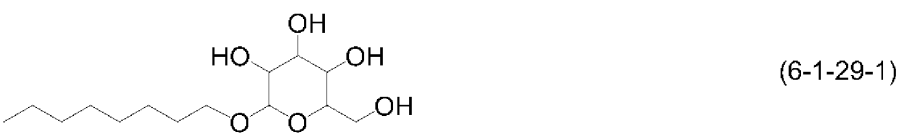
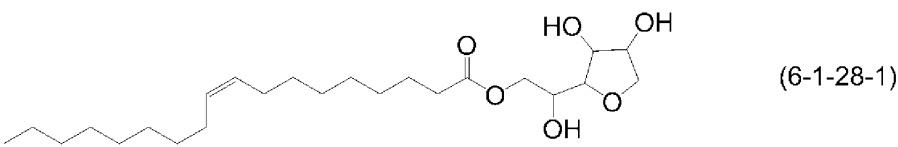
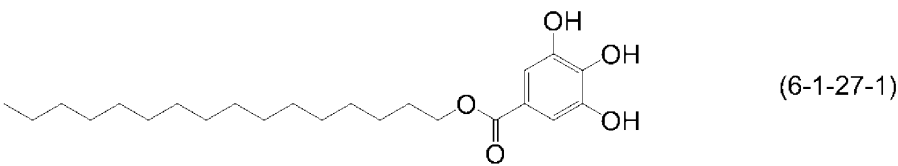
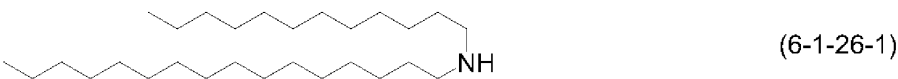
[0186]



[0187]



[0188]

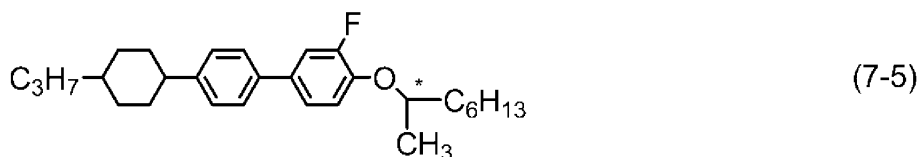
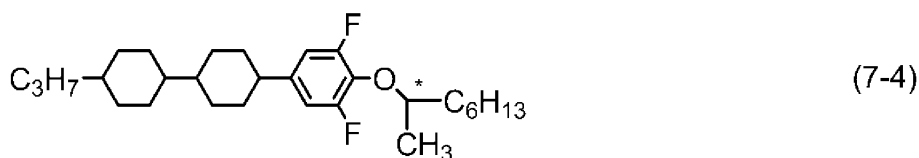
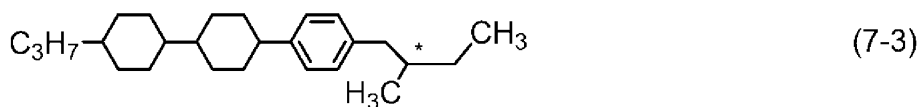
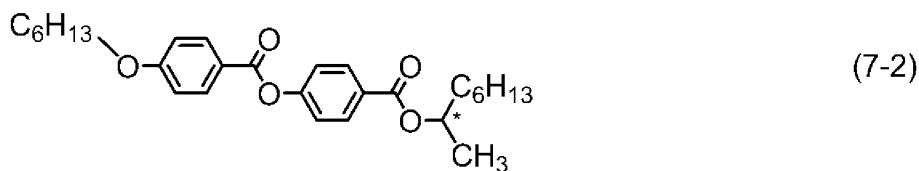
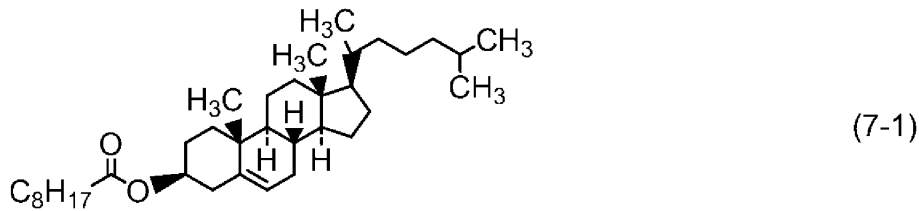


[0189]

[0190]

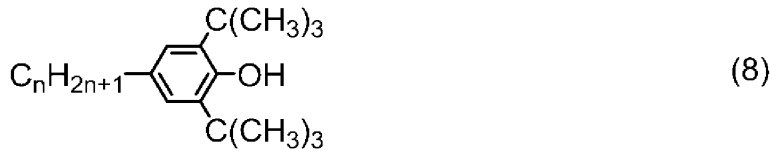
다섯째로, 바람직한 성분 화합물을 나타낸다. 바람직한 화합물(1)은, 항 3에 기재된 화합물(1-1)~화합물(1-12)이다. 이들 화합물에 있어서, 제1 첨가물 중 하나 이상이, 화합물(1-7), 화합물(1-8), 화합물(1-9), 또는 화합물(1-10)인 것이 바람직하다. 제1 첨가물 중 2개 이상이, 화합물(1-8) 및 화합물(1-9), 또는 화합물(1-2) 및 화합물(1-7)의 조합인 것이 바람직하다.

- [0191] 바람직한 화합물(2)은, 항 6에 기재된 화합물(2-1)~화합물(2-46)이다. 이들 화합물에 있어서, 제1 성분 중 하나 이상이, 화합물(2-1), 화합물(2-7), 화합물(2-11), 화합물(2-12), 화합물(2-22), 화합물(2-23), 화합물(2-24), 또는 화합물(2-36)인 것이 바람직하다.
- [0192] 바람직한 화합물(3)은, 항 9에 기재된 화합물(3-1)~화합물(3-13)이다. 이들 화합물에 있어서, 제2 성분 중 하나 이상이, 화합물(3-1), 화합물(3-3), 화합물(3-5), 화합물(3-6), 화합물(3-7), 화합물(3-8), 화합물(3-9), 또는 화합물(3-13)인 것이 바람직하다. 제2 성분중 2개 이상이 화합물(3-1) 및 화합물(3-3), 화합물(3-1) 및 화합물(3-5), 또는 화합물(3-1) 및 화합물(3-6)의 조합인 것이 바람직하다.
- [0193] 바람직한 화합물(4)은, 항 12에 기재된 화합물(4-1)~화합물(4-21)이다. 이들 화합물에 있어서, 제3 성분 중 하나 이상이, 화합물(4-1), 화합물(4-4), 화합물(4-5), 화합물(4-7), 화합물(4-10), 또는 화합물(4-15)인 것이 바람직하다. 제3 성분 중 2개 이상이, 화합물(4-1) 및 화합물(4-7), 화합물(4-1) 및 화합물(4-15), 화합물(4-4) 및 화합물(4-7), 화합물(4-4) 및 화합물(4-15), 화합물(4-5) 및 화합물(4-7), 또는 화합물(4-5) 및 화합물(4-10)의 조합인 것이 바람직하다.
- [0194] 바람직한 화합물(5)은, 항 16에 기재된 화합물(5-1)이다. 더욱 바람직한 화합물(5)은, 항 19에 기재된 화합물(5-1-1)~화합물(5-1-4)이다. 바람직한 화합물(6)은, 항 17에 기재된 화합물(6-1)이다. 더욱 바람직한 화합물(6)은, 항 20에 기재된 화합물(6-1-1)~화합물(6-1-29)이다. 일반적으로 화합물(5)은 화합물(6)보다 바람직하다.
- [0195] 여섯째로, 조성물에 첨가할 수도 있는 첨가물을 설명한다. 이와 같은 첨가물은, 광학 활성 화합물, 산화방지제, 자외선 흡수제, 색소, 소포제, 중합성 화합물, 중합 개시제, 중합 금지제, 극성 화합물 등이다. 액정 분자의 나선 구조를 유도하여 비틀림각을 부여할 목적으로 광학 활성 화합물이 조성물에 첨가된다. 이와 같은 화합물의 예는, 화합물(7-1)~화합물(7-5)이다. 광학 활성 화합물의 바람직한 비율은 약 5 중량% 이하이다. 더욱 바람직한 비율은 약 0.01 중량%~약 2 중량%의 범위이다.



[0196]

[0197] 대기중에서의 가열에 의한 비저항의 저하를 방지하기 위해, 또는 소자를 장시간 사용한 후, 실온에서만 아니라 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 전압 유지율을 유지하기 위해, 산화 방지제가 조성물에 첨가된다. 산화 방지제의 바람직한 예는, n이 1~9의 정수인 화합물(8) 등이다.



[0198]

[0199] 화합물(8)에 있어서, 바람직한 n은, 1, 3, 5, 7, 또는 9이다. 더욱 바람직한 n은 7이다. n이 7인 화합물 8은, 휘발성이 작으므로, 소자를 장시간 사용한 후, 실온에서만 아니라 상한 온도에 가까운 온도에서도 큰 전압 유지율을 유지하는 데 유효하다. 산화 방지제의 바람직한 비율은, 그 효과를 얻기 위해 약 50 ppm 이상이며, 상한 온도를 낮추지 않도록, 또는 하한 온도를 높이지 않도록 약 600 ppm 이하이다. 더욱 바람직한 비율은, 약 100 ppm~약 300 ppm의 범위이다.

[0200] 자외선 흡수제의 바람직한 예는, 벤조페논 유도체, 벤조에이트 유도체, 트리아졸 유도체 등이다. 입체 장애가 있는 아민과 같은 광 안정제도 보다 바람직하다. 이들 흡수제나 안정제에서의 바람직한 비율은, 그 효과를 얻기 위해 약 50 ppm 이상이며, 상한 온도를 낮추지 않도록, 또는 하한 온도를 높이지 않도록, 약 10000 ppm 이하이다. 더욱 바람직한 비율은 약 100 ppm~약 10000 ppm의 범위이다.

[0201] GH(guest host) 모드의 소자에 적합시키기 위해, 아조계 색소, 안트라퀴논계 색소 등과 같은 2색성 색소(dichroic dye)가 조성물에 첨가된다. 색소의 바람직한 비율은, 약 0.01 중량%~약 10 중량%의 범위이다. 거품을 방지하기 위해, 디메틸실리콘 오일, 메틸페닐실리콘 오일 등의 소포제가 조성물에 첨가된다. 소포제의 바람직한 비율은, 그 효과를 얻기 위해 약 1 ppm 이상이며, 표시 불량을 방지하기 위해 약 1000 ppm 이하이다. 더욱 바람직한 비율은, 약 1 ppm~약 500 ppm의 범위이다.

[0202] 고분자 지지 배향(PSA)형 소자에 적합시키기 위해 중합성 화합물이 사용된다. 화합물(1)은 이 목적에 적합하다. 화합물(1)과 함께, 화합물(1)과는 상이한, 그 외의 중합성 화합물을 조성물에 첨가할 수도 있다. 그 외의 중합성 화합물의 바람직한 예는, 아크릴레이트, 메타크릴레이트, 비닐 화합물, 비닐옥시 화합물, 프로페닐에테르, 에폭시 화합물(옥시란, 옥세탄), 비닐케톤 등 화합물이다. 더욱 바람직한 예는, 아크릴레이트 또는 메타크릴레이트이다. 화합물(1)의 바람직한 비율은, 중합성 화합물의 전체 중량을 기준으로 약 10 중량% 이상이다. 더욱 바람직한 비율은, 약 50 중량% 이상이다. 특히 바람직한 비율은, 약 80 중량% 이상이다. 특히 바람직한 비율은, 100 중량%이기도 하다. 화합물(1)의 종류를 변경하는 것에 의해, 또는 화합물(1)에 그 외의 중합성 화합물을 적절한 비로 조합함으로써, 중합성 화합물의 반응성이나 액정 분자의 프리틸트각을 조정할 수 있다. 프리틸트각을 최적화함으로써, 소자의 짧은 응답 시간을 달성할 수 있다. 액정 분자의 배향이 안정화되므로, 큰 콘트라스트비나 긴 수명을 달성할 수 있다.

[0203] 화합물(1)과 같은 중합성 화합물은 자외선 조사에 의해 중합한다. 광중합 개시제 등의 적절한 개시제 존재 하에서 중합시켜도 된다. 중합을 위한 적절한 조건, 개시제의 적절한 타입, 및 적절한 양은, 당업자에게는 기지(既知)이며, 문헌에 기재되어 있다. 예를 들면, 광중합 개시제인 Irgacure651(등록상표; BASF), Irgacure184(등록상표; BASF), 또는 Darocur1173(등록상표; BASF)가 라디칼 중합에 대하여 적절하다. 광중합 개시제의 바람직한 비율은, 중합성 화합물의 전체 중량을 기준으로 약 0.1 중량%~약 5 중량%의 범위이다. 더욱 바람직한 비율은 약 1 중량%~약 3 중량%의 범위이다.

[0204] 화합물(1)과 같은 중합성 화합물을 보관할 때, 중합을 방지하기 위해 중합 금지제를 첨가해도 된다. 중합성 화합물은, 통상은 중합 금지제를 제거하지 않는 채 조성물에 첨가된다. 중합 금지제의 예는, 하이드로퀴논, 메틸 하이드로퀴논과 같은 하이드로퀴논 유도체, 4-tert-부틸카테콜, 4-메톡시페놀, 페노티아진 등이다.

[0205] 일곱째로, 성분 화합물의 합성법을 설명한다. 이들 화합물은 기지의 방법에 의해 합성할 수 있다. 합성법을 예시한다. 화합물(1-2)은 일본 공개특허 평7-101900호 공보에 기재된 방법으로 합성한다. 화합물(2-2) 및 화합물(2-7)은, 일본 공개특허 평2-233626호 공보에 기재된 방법으로 합성한다. 화합물(3-5)은, 일본 공개특허 제소 57-165328호 공보에 기재된 방법으로 합성한다. 화합물(4-1) 및 화합물(4-7)은, 일본특표 평2-503441호 공보에 기재된 방법으로 합성한다. 화합물(5-1)은, 국제공개 2012-038026호 공보에 기재된 방법으로 합성한다. 화합물(6)의 일부는 시판되고 있다. 식(8)의 n이 1인 화합물은, 알드리치(Sigma-Aldrich Corporation)로부터 입수할 수 있다. n이 7인 화합물(8) 등은, 미국 특허 3660505호 명세서에 기재된 방법에 의해 합성한다.

- [0206] 합성법을 기재하지 않은 화합물은, 오가닉·신세스(Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc.), 오가닉·리액션즈(Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc.), 콤프리헨시브·오가닉·신세스(Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press), 신실험 화학 강좌(마루젠) 등의 서적에 기재된 방법에 의해 합성할 수 있다. 조성물은, 이와 같이 하여 얻은 화합물로부터 공지된 방법에 의해 조제된다. 예를 들면, 성분 화합물을 혼합하고, 그리고 가열에 의해 서로 용해시킨다.
- [0207] 마지막으로, 조성물의 용도를 설명한다. 대부분의 조성물은, 약 -10℃ 이하의 하한 온도, 약 70℃ 이상의 상한 온도, 그리고, 약 0.07~약 0.20의 범위의 광학 이방성을 가진다. 성분 화합물의 비율을 제어함으로써, 또는 그 외의 액정성 화합물을 혼합함으로써, 약 0.08~약 0.25의 범위의 광학 이방성을 가지는 조성물을 조제할 수도 있다. 또한, 시행 착오에 의해 약 0.10~약 0.30의 범위의 광학 이방성을 가지는 조성물을 조제할 수도 있다. 이 조성물을 함유하는 소자는 큰 전압 유지율을 가진다. 이 조성물은 AM 소자에 적절하다. 이 조성물은 투과형 AM 소자에 특별히 적합하다. 이 조성물은, 네마틱상을 가지는 조성물로서의 사용이 가능하며, 광학 활성 화합물을 첨가함으로써 광학 활성인 조성물로서의 사용이 가능하다.
- [0208] 이 조성물은 AM 소자로의 사용이 가능하다. 또한 PM 소자로의 사용도 가능하다. 이 조성물은, PC, TN, STN, ECB, OCB, IPS, FFS, VA, FPA 등의 모드를 가지는 AM 소자 및 PM 소자로의 사용이 가능하다. TN, OCB, IPS 모드 또는 FFS 모드를 가지는 AM 소자로의 사용은 특히 바람직하다. IPS 모드 또는 FFS 모드를 가지는 AM 소자에 있어서, 전압이 무인가일 때, 액정 분자의 배향이 유리 기판에 대하여 평행할 수도 있고, 또는 수직일 수도 있다. 이들 소자가 반사형, 투과형, 또는 반투과형이라도 된다. 투과형의 소자로의 사용은 바람직하다. 비결정 실리콘-TFT 소자 또는 다결정 실리콘-TFT 소자로의 사용도 가능하다. 이 조성물을 마이크로 캡슐화하여 제작한 NCAP(nematic curvilinear aligned phase)형 소자나, 조성물 중에 3차원의 메쉬형 고분자를 형성한 PD(polymer dispersed)형 소자에도 사용할 수 있다.
- [0209] 종래의 고분자 지지 배향형의 소자를 제조하는 방법의 일례는, 다음과 같다. 어레이 기판과 컬러 필터 기판으로 불리우는 2개의 기판을 구비하는 소자를 조립한다. 이 기판은 배향막을 가진다. 이 기판 중 1개 이상은, 전극층을 가진다. 액정성 화합물을 혼합하여 액정 조성물을 조제한다. 이 조성물에 중합성 화합물을 첨가한다. 필요에 따라 첨가물을 더욱 첨가할 수도 있다. 이 조성물을 소자에 주입한다. 이 소자에 전압을 인가한 상태에서 광조사한다. 이 때 자외선을 사용하는 것이 바람직하다. 광조사에 의해 중합성 화합물을 중합시킨다. 이 중합에 의해, 중합체를 함유하는 조성물이 생성된다. 고분자 지지 배향형의 소자는, 전술한 바와 같은 수순으로 제조한다.
- [0210] 이 수순에 있어서, 전압을 인가했을 때, 액정 분자가 배향막 및 전기장의 작용에 의해 배향한다. 이 배향에 따라 중합성 화합물의 분자도 배향한다. 이 상태에서 중합성 화합물이 자외선에 의해 중합하므로, 이 배향을 유지한 중합체가 생성된다. 이 중합체의 효과에 의해, 소자의 응답 시간이 단축된다. 화상의 소부는, 액정 분자의 동작 불량이므로, 이 중합체의 효과에 의해 소부도 동시에 개선되게 된다. 그리고, 조성물 중의 중합성 화합물을 사전에 중합시키고, 이 조성물을 액정 표시 소자의 기판의 사이에 배치하는 것도 가능할 것이다.
- [0211] 배향막을 가지고 있지 않은 소자를 제조하는 방법의 일례는, 다음과 같다. 어레이 기판과 컬러 필터 기판으로 불리우는 2개의 기판을 가지는 소자를 준비한다. 이 기판은 배향막을 가지고 있지 않다. 이 기판 중 1개 이상은, 전극층을 가진다. 액정성 화합물을 혼합하여 액정 조성물을 조제한다. 이 조성물에 중합성 화합물 및 극성 화합물을 첨가한다. 필요에 따라 첨가물을 더욱 첨가할 수도 있다. 이 조성물을 소자에 주입한다. 이 소자에 전압을 인가한 상태에서 광조사한다. 이 때 자외선을 사용하는 것이 바람직하다. 광조사에 의해 중합성 화합물을 중합시킨다. 이 중합에 의해, 중합체 및 극성 화합물을 포함하는 조성물의 층이 기판 상에 형성된다.
- [0212] 이 수순에 있어서, 극성 화합물은, 극성기가 기판 표면과 상호 작용 하므로, 기판 상에 배열한다. 이 배열에 따라 액정 분자가 배향된다. 전압을 인가했을 때, 액정 분자의 배향이 더욱 촉진되고, 이 배향에 따라 중합성 화합물도 배향한다. 이 상태에서 중합성 화합물이 자외선에 의해 중합하므로, 이 배향을 유지한 중합체가 생성된다. 이 중합체의 효과에 의해, 액정 분자의 배향이 추가적으로 안정화하고, 소자의 응답 시간이 단축된다. 화상의 소부는, 액정 분자의 동작 불량이므로, 이 중합체의 효과에 의해 소부도 동시에 개선되게 된다.
- [0213] [실시예]
- [0214] 실시예에 의해 본 발명을 보다 상세하게 설명한다. 본 발명은 이들 실시예에 의해서는 제한되지 않는다. 본 발명은, 조성물 M1과 조성물 M2의 혼합물을 포함한다. 본 발명은, 실시예의 조성물 중 2개 이상을 혼합한 혼합물도 포함한다. 합성한 화합물은, NMR 분석 등의 방법에 의해 확인했다. 화합물, 조성물 및 소자의 특성은, 하기

방법에 의해 측정하였다.

[0215] NMR 분석: 측정 시에는, 브루커바이오스핀사에서 제조한 DRX-500을 사용하였다. ¹H-NMR의 측정에서는, 시료를 CDCl₃ 등의 중수소화 용매에 용해시키고, 측정은, 실온에서, 500 MHz, 적산 횟수 16회의 조건에서 행하였다. 테트라메틸실란을 내부 표준으로서 사용하였다. ¹⁹F-NMR의 측정에서는, CFC1₃을 내부 표준으로서 사용하고, 적산 횟수 24회로 행하였다. 핵자기 공명 스펙트럼의 설명에 있어서, s는 싱글렛, d는 더블렛, t는 트리플렛, q는 퀴넷, quin은 퀴넷, sex는 섉스렛, m은 말리플렛, br은 브로드(broad)인 것을 의미한다.

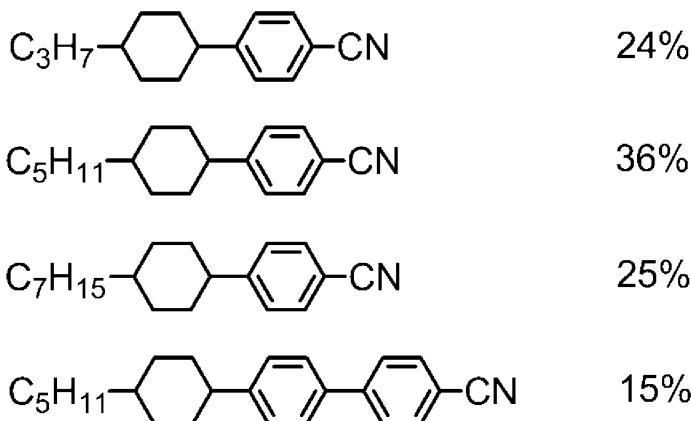
[0216] 가스 크로마토 분석: 측정 시에는 시마즈 제작소에서 제조한 GC-14B형 가스 크로마토그래프를 사용하였다. 캐리어(carrier) 가스는 헬륨(2 mL/분)이다. 시료 기화실을 280℃, 검출기(FID)를 300℃로 설정하였다. 성분 화합물의 분리에는, Agilent Technologies Inc.에서 제조한 캐피러리 컬럼 DB-1(길이 30m, 내경(內徑) 0.32mm, 막 두께 0.25μm; 고정 액상(液相)은 디메틸폴리실록산; 무극성)을 사용하였다. 이 컬럼은, 200℃에서 2분간 유지한 후, 5℃분의 비율로 280℃까지 승온(昇溫)하였다. 시료는 아세톤 용액(0.1 중량%)에 조제한 후, 그 1μL를 시료 기화실에 주입하였다. 기록계는 시마즈 제작소에서 제조한 C-R5A형 Chromatopac, 또는 그와 동등물이다. 얻어진 가스 크로마토그램은, 성분 화합물에 대응하는 피크의 유지 시간 및 피크의 면적을 나타낸다.

[0217] 시료를 회석하기 위한 용매는, 클로로포름, 헥산 등을 사용할 수도 있다. 성분 화합물을 분리하기 위해, 다음의 캐피러리 컬럼을 사용해도 된다. Agilent Technologies Inc.에서 제조한 HP-1(길이 30m, 내경 0.32mm, 막 두께 0.25μm), Restek Corporation제의 Rtx-1(길이 30m, 내경 0.32mm, 막 두께 0.25μm), SGE International Pty. Ltd에서 제조한 BP-1(길이 30m, 내경 0.32mm, 막 두께 0.25μm). 화합물 피크의 중첩을 방지할 목적으로 시마즈 제작소에서 제조한 캐피러리 컬럼 CBP1-M50-025(길이 50m, 내경 0.25mm, 막 두께 0.25μm)를 사용할 수도 있다.

[0218] 조성물에 함유되는 액정성 화합물의 비율은, 다음과 같은 방법으로 산출해도 된다. 액정성 화합물의 혼합물을 가스 크로마토그래피(FID)로 분석한다. 가스 크로마토그램에서의 피크의 면적비는 액정성 화합물의 비율에 상당한다. 상기한 캐피러리 컬럼을 사용했을 때는, 각각의 액정성 화합물의 보정 계수를 1로 간주해도 된다. 따라서, 액정성 화합물의 비율(중량%)은, 피크의 면적비로부터 산출할 수 있다.

[0219] 측정 시료: 조성물 및 소자의 특성을 측정할 때는, 조성물을 그대로 시료로서 사용하였다. 화합물의 특성을 측정할 때는, 이 화합물(15 중량%)을 모액정(85 중량%)에 혼합함으로써 측정용의 시료를 조제하였다. 측정에 의해 얻어진 값으로부터 외삽법에 의해 화합물의 특성값을 산출하였다. (외삽값)={(시료의 측정값)-0.85×(모액정의 측정값)} / 0.15. 이 비율로 스펙터상(또는 결정)이 25℃에서 석출(析出)할 때는, 화합물과 모액정의 비율을 10 중량%:90 중량%, 5 중량%:95 중량%, 1 중량%:99 중량%의 순서로 변경하였다. 이 외삽법에 의해 화합물에 대한 상한 온도, 광학 이방성, 점도, 및 유전율 이방성의 값을 구하였다.

[0220] 하기 모액정을 사용하였다. 성분 화합물의 비율은 중량%로 나타낸다.



[0221]

[0222] 측정 방법: 특성의 측정은 하기 방법으로 행하였다. 이들 중 대부분은, 사단법인 전자 정보 기술 산업 협회(Japan Electronics and Information Technology Industries Association; JEITA라고 함)에서 심의 제정되는 JEITA 규격(JEITA·ED-2521B)에 기재된 방법, 또는 이것을 변경한 방법이다. 측정에 사용한 TN 소자에는, 박막 트랜지스터(TFT)를 장착하지 않았다.

[0223] (1) 네마틱상의 상한 온도(NI; ℃: 편광(偏光) 현미경을 구비한 용점 측정 장치의 핫 플레이트에 시료를 두고,

1℃/분의 속도로 가열하였다. 시료의 일부가 네마틱상으로부터 등방성(等方性) 액체로 변화되었을 때의 온도를 측정하였다. 네마틱상의 상한 온도를 「상한 온도」로 약칭하는 경우가 있다.

- [0224] (2) 네마틱상의 하한 온도(T_C ; ℃: 네마틱상을 가지는 시료를 유리병에 넣고, 0℃, -10℃, -20℃, -30℃ 및 -40℃의 프리저(freezer) 중에 10일간 보관한 후, 액정상을 관찰하였다. 예를 들면, 시료가 -20℃에서는 네마틱상인 채이며, -30℃에서는 결정 또는 스멕틱상으로 변화되었을 때, T_C 를 <-20℃로 기재하였다. 네마틱상의 하한 온도를 「하한 온도」로 약칭하는 경우가 있다.
- [0225] (3) 점도(벌크(bulk) 점도; η ; 20℃에서 측정; mPa·s): 측정 시에는 도쿄 계기 가부시키가이샤에서 제조한 E형 회전 점도계(粘度計)를 사용하였다.
- [0226] (4) 점도(회전 점도; γ 1; 25℃에서 측정; mPa·s): 측정은, M. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37(1995)에 기재된 방법에 따라 행하였다. 트위스트 각이 0°이며, 그리고, 2장의 유리 기판의 간격(셀 갭)이 5 μ m인 TN 소자에 시료를 넣었다. 이 소자에 16 V~19.5 V의 범위에서 0.5 V마다 단계적으로 인가하였다. 0.2초의 무인가의 후, 단 1개의 직사각형파(직사각형 펄스; 0.2초)와 무인가(2초)의 조건에서 인가를 반복하였다. 이 인가에 의해 발생한 과도 전류(transient current)의 피크 전류(peak current)와 피크 시간(peak time)을 측정하였다. 이들 측정값과 M. Imai 등의 논문, 40 페이지의 계산식(8)으로부터 회전 점도의 값을 얻었다. 이 계산에 필요한 유전율 이방성은, 측정(6)에 기재된 방법으로 측정하였다.
- [0227] (5) 광학 이방성(굴절율 이방성; Δn ; 25℃에서 측정): 측정은, 파장 589 nm의 광을 사용하여, 집안경에 편광판을 장착한 압베(Abbe) 굴절계에 의해 행하였다. 주프리즘의 표면을 일방향으로 러빙한 후, 시료를 주프리즘에 적하하였다. 굴절율 n_{\parallel} 은 편광의 방향이 러빙의 방향과 평행일 때 측정하였다. 굴절율 n_{\perp} 은 편광의 방향이 러빙의 방향과 수직일 때 측정하였다. 광학 이방성의 값은, $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$ 의 식으로부터 계산하였다.
- [0228] (6) 유전율 이방성($\Delta \epsilon$; 25℃에서 측정): 2장의 유리 기판의 간격(셀 갭)이 9 μ m이며, 그리고, 트위스트 각이 80℃인 TN 소자에 시료를 넣었다. 이 소자에 사인파(10 V, 1 kHz)를 인가하고, 2초 후에 액정 분자의 장축(長軸) 방향에서의 유전율(ϵ_{\parallel})을 측정하였다. 이 소자에 사인파(0.5 V, 1 kHz)를 인가하고, 2초 후에 액정 분자의 단축 방향에서의 유전율(ϵ_{\perp})을 측정하였다. 유전율 이방성의 값은, $\Delta \epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 의 식으로부터 계산하였다.
- [0229] (7) 임계값 전압(V_{th} ; 25℃에서 측정; V): 측정 시에는 오오츠카전자 가부시키가이샤에서 제조한 LCD5100형 휘도계를 사용하였다. 광원은 할로겐 램프였다. 2장의 유리 기판의 간격(셀 갭)이 0.45/ Δn (μ m)이며, 트위스트 각이 80℃인 노멀리 화이트 모드(normally white mode)의 TN 소자에 시료를 넣었다. 이 소자에 인가하는 전압(32 Hz, 직사각형파)은 0 V로부터 10 V까지 0.02 V씩 단계적으로 증가시켰다. 이 때, 소자에 수직 방향으로부터 광을 조사하고, 소자를 투과한 광량을 측정하였다. 이 광량이 최대로 되었을 때가 투과율 100%이며, 이 광량이 최소였을 때가 투과율 0%인 전압-투과율 곡선을 작성하였다. 임계값 전압은 투과율이 90%로 되었을 때의 전압으로 나타낸다.
- [0230] (8) 전압 유지율(VHR-1; 25℃에서 측정; %): 측정에 사용한 TN 소자는 폴리이미드 배향막을 가지고, 그리고 2장의 유리 기판의 간격(셀 갭)은 5 μ m였다. 이 소자는 시료를 주입한 후 자외선으로 경화하는 접착제로 밀폐했다. 이 TN 소자에 펄스 전압(5 V로 60마이크로초)을 인가하여 충전하였다. 감쇠(減衰)하는 전압을 고속 전압계로 16.7밀리초 동안 측정하고, 단위 주기에서의 전압 곡선과 가로축의 사이의 면적 A를 구하였다. 면적 B는 감쇠하지 않을 때의 면적이다. 전압 유지율은 면적 B에 대한 면적 A의 백분율로 나타낸다.
- [0231] (9) 전압 유지율(VHR-2; 80℃에서 측정; %): 25℃ 대신 80℃에서 측정된 점 이외에는, 상기와 동일한 수순으로 전압 유지율을 측정하였다. 얻어진 값을 VHR-2로 나타낸다.
- [0232] (10) 전압 유지율(VHR-3; 25℃에서 측정; %): 자외선을 조사한 후, 전압 유지율을 측정하여, 자외선에 대한 안정성을 평가하였다. 측정에 사용한 TN 소자는 폴리이미드 배향막을 가지고, 그리고 셀 갭은 5 μ m였다. 이 소자에 시료를 주입하고, 광을 20분간 조사하였다. 광원은 초고압 수은 램프 USH-500D(우시오전기 제조)이며, 소자와 광원의 간격은 20cm였다. VHR-3의 측정에서는, 16.7밀리초 동안 감쇠하는 전압을 측정하였다. 큰 VHR-3를 가지는 조성물은 자외선에 대하여 큰 안정성을 가진다. VHR-3는 90% 이상이 바람직하고, 95% 이상이 더욱 바람직하다.
- [0233] (11) 전압 유지율(VHR-4; 25℃에서 측정; %): 시료를 주입한 TN 소자를 80℃의 항온조 내에서 500시간 가열한 후, 전압 유지율을 측정하여, 열에 대한 안정성을 평가하였다. VHR-4의 측정에서는, 16.7밀리초 동안 감쇠하는

전압을 측정하였다. 큰 VHR-4를 가지는 조성물은 열에 대하여 큰 안정성을 가진다.

[0234] (12) 응답 시간 (τ ; 25°C에서 측정; ms): 측정 시에는 오오즈카전자 가부시키가이샤에서 제조한 LCD5100형 휘도계를 사용하였다. 광원은 할로젠 램프였다. 로우 패스·필터(Low-pass filter)는 5 kHz로 설정하였다. 2장의 유리 기판의 간격(셀 갭)이 3.5 μm 이며, 배향막을 가지고 있지 않은 FFS 소자에 시료를 넣었다. 이 소자를 자외선으로 경화하는 접착제로 밀폐했다. 이 소자에, 30 V의 전압을 인가하면서 78 mW/cm^2 (405 nm)의 자외선을 359초간(28 J) 조사하였다. 자외선의 조사 시에는, 아이그래픽스 가부시키가이샤에서 제조한, 자외 경화용 멀티 메탈 램프 M04-L41을 사용하였다. 이 소자에 직사각형파(120 Hz)를 인가하였다. 이 때, 소자에 수직 방향으로부터 광을 조사하고, 소자를 투과한 광량을 측정하였다. 이 광량이 최대로 되었을 때가 투과율 100%이며, 이 광량이 최소였을 때가 투과율 0%인 것으로 간주했다. 직사각형파의 최대 전압은 투과율이 90%로 되도록 설정하였다. 직사각형파의 최저 전압은 투과율이 0%가 되는 2.5 V로 설정하였다. 응답 시간은 투과율 90%로부터 10%로 변화하는데 필요로 한 시간(하강 시간; fall time; 밀리초)으로 나타낸다.

[0235] (13) 탄성 상수(K; 25°C에서 측정; pN): 측정에는 요코가와·휴렛팩커드 가부시키가이샤에서 제조한 HP4284A형 LCR 미터를 사용하였다. 2장의 유리 기판의 간격(셀 갭)이 20 μm 인 수평 배향 소자에 시료를 넣었다. 이 소자에 0볼트~20볼트 전하를 인가하고, 정전(靜電) 용량 및 인가 전압을 측정하였다. 측정된 정전 용량(C)과 인가 전압(V)의 값을 「액정 디바이스 핸드북」(일간공업신문사), 75 페이지에 있는 식(2.98), 식(2.101)을 사용하여 피팅하고, 식(2.99)으로부터 K11 및 K33의 값을 얻었다. 다음으로, 동(同) 171페이지에 있는 식(3.18)에, 방금 구한 K11 및 K33의 값을 사용하여 K22를 산출하였다. 탄성 상수 K는, 이와 같이 하여 구한 K11, K22, 및 K33의 평균값으로 나타낸다.

[0236] (14) 비저항(ρ ; 25°C에서 측정; Ωcm): 전극을 구비한 용기에 시료 1.0 mL를 넣었다. 이 용기에 직류 전압(10 V)을 인가하고, 10초 후의 직류 전류를 측정하였다. 비저항은 다음의 식으로부터 산출하였다. (비저항)={ (전압) \times (용기의 전기 용량)} / { (직류 전류) \times (진공의 유전율)}.

[0237] (15) 프리틸트각($^{\circ}$): 프리틸트각의 측정 시에는, 분광 엘립소미터 M-2000U(J. A. Woollam Co., Inc. 제조)를 사용하였다.

[0238] (16) 배향 안정성(액정 배향축 안정성): 액정 표시 소자의 전극층의 액정 배향축의 변화를 평가하였다. 스트레스 인가 전의 전극층의 액정 배향 각도 ϕ (before)를 측정하고, 그 후, 소자에 직사각형파 4.5 V, 60 Hz를 20분간 인가한 후, 1초간 쇼트하고, 1초 후 및 5분 후에 다시 전극층의 액정 배향 각도 ϕ (after)를 측정하였다. 이들 값으로부터, 1초 후 및 5분 후의 액정 배향 각도의 변화 $\Delta\phi$ (deg.)를 하기 식을 사용하여 산출하였다.

[0239]
$$\Delta\phi(\text{deg.}) = \phi(\text{after}) - \phi(\text{before})$$

[0240] 이들 측정은 J. Hilfiker, B. Johs, C. Herzinger, J. F. Elman, E. Montbach, D. Bryant, and P. J. Bos, Thin Solid Films, 455-456, (2004) 596-600을 참고하여 행하였다. $\Delta\phi$ 가 작은 것이 액정 배향축의 변화율이 작고, 액정 배향축의 안정성이 양호하다고 할 수 있다.

[0241] 조성물의 실시예를 이하에 나타낸다. 성분 화합물은, 하기 표 3의 정의에 기초하여 기호에 의해 나타낸다. 표 3에 있어서, 1,4-시클로헥실렌에 대한 입체 배치는 트랜스이다. 실시예에 있어서 기호화된 화합물의 뒤에 있는 괄호 내의 번호는, 화합물이 속하는 화학식을 나타낸다. (-)의 기호는 그 외의 액정성 화합물을 의미한다. 액정성 화합물의 비율(백분율)은, 액정 조성물의 중량을 기준으로 한 중량 백분율(중량%)이다. 마지막으로, 조성물의 특성값을 정리하여 나타내었다.

[0242] [표 3] 기호를 사용한 화합물의 표기법

$R-(A_1)-Z_1-\dots-Z_n-(A_n)-R'$			
1) 좌측말단기 R-	기호	4) 환 -A _n -	기호
$C_nH_{2n+1}-$	n-		H
$C_nH_{2n+1}O-$	nO-		Dh
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}-$	mOn-		dh
$CH_2=CH-$	V-		B
$C_nH_{2n+1}-CH=CH-$	nV-		B(F)
$CH_2=CH-C_nH_{2n}-$	Vn-		B(2F)
$C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-$	mVn-		B(F,F)
$CF_2=CH-$	VFF-		B(F,F)
$CF_2=CH-C_nH_{2n}-$	VFFn-		B(2F,5F)
$F-C_nH_{2n}-$	Fn-		B(2F,5F)
2) 우측말단기 -R'			B(2F,5F)
$-C_nH_{2n+1}$	-n		G
$-OC_nH_{2n+1}$	-On		Py
$-CH=CH_2$	-V		B(2F,3F)
$-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	-Vn		
$-C_nH_{2n}-CH=CH_2$	-nV		
$-C_nH_{2n}-CH=CH-C_mH_{2m+1}$	-nVm		
$-CH=CF_2$	-VFF		
$-COOCH_3$	-EMe		
-F	-F		
-Cl	-Cl		
$-OCF_3$	$-OCF_3$		
$-CF_3$	$-CF_3$		
-CN	-C		
3) 결합기 -Z_n-			
$-C_2H_4-$	2		
$-COO-$	E		
$-CH=CH-$	V		
$-C\equiv C-$	T		
$-CF_2O-$	X		
$-CH_2O-$	1O		
5) 표기에			
예 1	V-HHB-1	예 2	3-BB(F)B(F,F)-F
예 3	3-HGB(F,F)-F	예 4	3-HHEBH-5

[0243]

[0244] 소자의 실시예

[0245] 1. 원료

[0246] 배향막을 가지고 있지 않은 소자를 제작하고, 액정 분자의 수직 배향과 중합성 화합물의 전환율(轉化率)을 검토했다. 처음에 원료를 설명한다. 원료는, 액정 조성물 (M1)~(M11), 중합성 화합물 (RM-1)~(RM-8), 극성 화합물 (PC-1)~(PC-33)이며, 상기 순서로 리스트업하였다.

[0247] [조성물 M1]

3-HHB (F, F) - F	(2-12)	10%
3-HBB (F, F) - F	(2-24)	40%
2-HHBB (F, F) - F	(2-42)	2%
3-HHBB (F, F) - F	(2-42)	5%
4-HHBB (F, F) - F	(2-42)	4%
V-HH-3	(3-1)	25%
V-HHB-1	(3-5)	8%
[0248] 2-BB (F) B-3	(3-8)	6%

[0249] NI=78.9°C; Tc<-20°C; Δn=0.105; Δε=5.7; Vth=1.62 V; η=15.5 mPa·s.

[0250] [조성물 M2]

5-H2B (F) - F	(2-4)	7%
3-HHB-OCF3	(2-8)	10%
3-HHEB-F	(2-17)	7%
5-HHEB-F	(2-17)	5%
2-HBEB (F, F) - F	(2-30)	3%
3-HBEB (F, F) - F	(2-30)	3%
3-BB (F, F) B (F) -OCF3	(2-34)	8%
3-BBB (F, F) - F	(2-35)	3%
3-BB2B (F, F) - F	(2-39)	3%
V-HH-3	(3-1)	31%
1V-HH-4	(3-1)	6%
V-HHB-1	(3-5)	3%
5-HBBH-3	(3-11)	6%
[0251] 5-HB (F) BH-3	(3-12)	5%

[0252] NI=90.5°C; Tc<-20°C; Δn=0.093; Δε=4.3; Vth=2.07 V; η=12.2 mPa·s.

[0253] [조성물 M3]

3-HB-CL	(2-1)	10%
3-HHB-CL	(2-7)	4%
3-HHB (F) -F	(2-11)	7%
3-HBB (F, F) -F	(2-24)	25%
3-HHEBB-F	(2-40)	3%
3-HH2BB (F, F) -F	(2-44)	6%
4-HH2BB (F, F) -F	(2-44)	4%
3-HH-O1	(3-1)	15%
1V-HH-3	(3-1)	18%
3-HBB-2	(3-6)	3%
1-BB (F) B-2V	(3-8)	5%

[0255] NI=84.2°C; Tc<-20°C; Δn=0.104; Δε=4.2; Vth=1.94 V; η=15.9 mPa·s.

[0256] [조성물 M4]

3-HHB (F, F) -F	(2-12)	10%
4-HHB (F, F) -F	(2-12)	6%
5-HHB (F, F) -F	(2-12)	6%
3-HBB (F, F) -F	(2-24)	30%
2-HHBB (F, F) -F	(2-42)	3%
3-HHBB (F, F) -F	(2-42)	4%
4-HHBB (F, F) -F	(2-42)	2%
3-HH-V	(3-1)	25%
1V2-HH-3	(3-1)	6%
V2-HHB-1	(3-5)	4%
3-HHEBH-3	(3-9)	4%

[0258] NI=93.1°C; Tc<-20°C; Δn=0.091; Δε=5.3; Vth=1.83 V; η=14.0 mPa·s.

[0259]	[조성물 M5]		
	3-HHB (F) -OCF3	(2-10)	7%
	3-HBB (F, F) -F	(2-24)	12%
	2-HB (F) B (F, F) -F	(2-25)	4%
	3-HB (F) B (F, F) -F	(2-25)	12%
	3-H2BB (F, F) -F	(2-27)	5%
	3-HHB (F) B (F, F) -F	(2-43)	4%
	5-HHB (F) B (F, F) -F	(2-43)	3%
	3-HH-5	(3-1)	20%
	2-HH-3	(3-1)	4%
	3-HB-O2	(3-2)	6%
	3-HHEH-5	(3-4)	3%
	VFF-HHB-1	(3-5)	10%
	3-HHB-1	(3-5)	5%
[0260]	1V-HBB-2	(3-6)	5%

[0261] NI=81.1°C; Tc<-20°C; Δn=0.091; Δε=5.6; Vth=1.76 V; η=12.0 mPa·s.

[0262]	[조성물 M6]		
	1V2-BB-CL	(2)	3%
	7-HB (F) -F	(2-2)	5%
	7-HB (F, F) -F	(2-3)	7%
	3-HHB (F, F) -F	(2-12)	10%
	3-H2HB (F) -F	(2-13)	6%
	5-H2HB (F) -F	(2-13)	4%
	3-H2HB (F, F) -F	(2-14)	6%
	4-H2HB (F, F) -F	(2-14)	5%
	3-HH2B (F, F) -F	(2-16)	12%
	3-HBB-F	(2-22)	5%
	V-HH-5	(3-1)	17%
	V2-HH-2V	(3-1)	8%
	V2-BB (F) B-1	(3-8)	4%
[0263]	5-HBB (F) B-3	(3-13)	8%

[0264] NI=75.0°C; Tc<-20°C; Δn=0.088; Δε=4.5; Vth=1.89 V; η=14.0 mPa·s.

[0265]	[조성물 M7]		
	3-HGB (F, F) -F	(2-19)	3%
	3-H2GB (F, F) -F	(2-20)	5%
	5-GHB (F, F) -F	(2-21)	10%
	3-HBB (F, F) -F	(2-24)	10%
	2-HHBB (F, F) -F	(2-42)	3%
	3-HHBB (F, F) -F	(2-42)	4%
	2-HH-3	(3-1)	20%
	3-HH-VFF	(3-1)	9%
	1V-HH-3	(3-1)	7%
	1V2-BB-1	(3-3)	4%
	V-HHB-1	(3-5)	7%
	1-BB (F) B-2V	(3-8)	4%
	2-BB (F) B-2V	(3-8)	6%
	3-HHEBH-5	(3-9)	4%
[0266]	1O1-HBBH-5	(-)	4%

[0267] NI=93.0°C; Tc<-20°C; Δn=0.103; Δε=5.4; Vth=1.83 V; η=12.7 mPa·s.

[0268]	[조성물 M8]		
	5-HEB-F	(2-5)	3%
	5-HEB (F, F) -F	(2-6)	5%
	3-HHB-F	(2-9)	5%
	2-HHEB (F, F) -F	(2-18)	4%
	3-HHEB (F, F) -F	(2-18)	7%
	3-HBB (F) -F	(2-23)	9%
	5-HBB (F) -F	(2-23)	6%
	5-HBEB-F	(2-29)	4%
	2-BB (F) B (F, F) -F	(2-36)	4%
	3-BB (F) B (F, F) -F	(2-36)	10%
	3-HHBB (F) -F	(2-41)	4%
	5-HHBB (F) -F	(2-41)	4%
	3-HH-O1	(3-1)	3%
	3-HH-4	(3-1)	6%
	2-HH-5	(3-1)	6%
[0269]	F3-HH-V	(3-1)	20%

[0270] NI=77.7°C; Tc<-20°C; Δn=0.097; Δε=5.7; Vth=1.68 V; η=17.1 mPa·s.

[0271] [조성물 M9]

3-HHB (F, F) - F	(2-12)	10%
3-HH2B (F) - F	(2-15)	8%
3-H2BB (F) - F	(2-26)	7%
3-HB (F) EB-OCF3	(2-28)	8%
3-HH2BB (F, F) - F	(2-44)	5%
4-HH2BB (F, F) - F	(2-44)	3%
1V2-HH-V	(3-1)	6%
1V-HH-V	(3-1)	8%
7-HB-1	(3-2)	3%
1-BB-5	(3-3)	9%
V2-BB-1	(3-3)	4%
1V2-BB-1	(3-3)	6%
3-HHB-O1	(3-5)	5%
V2-HHB-1	(3-5)	5%
1-BB (F) B-2V	(3-8)	6%
2-BB (F) B-2V	(3-8)	3%
3-BB (F) B-2V	(3-8)	4%

[0272]

[0273] NI=90.9℃; Tc<-20℃; Δn=0.131; Δε=5.0; Vth=1.84 V; η=13.6 mPa·s.

[0274] [조성물 M10]

3-H2HB (F, F) - F	(2-14)	6%
3-HBB (F, F) - F	(2-24)	18%
3-BB (F, F) B-F	(2-33)	4%
3-BB (F) B (F, F) - F	(2-36)	10%
3-B2BB (F, F) - F	(2-38)	5%
3-HHB (F) B (F, F) - F	(2-43)	4%
3-HH2BB (F, F) - F	(2-44)	4%
V-HH-3	(3-1)	25%
1V-HH-3	(3-1)	5%
7-HB-1	(3-2)	5%
V2-HHB-1	(3-5)	5%
1-BB (F) B-2V	(3-8)	5%
5-HBB (F) B-3	(3-13)	4%

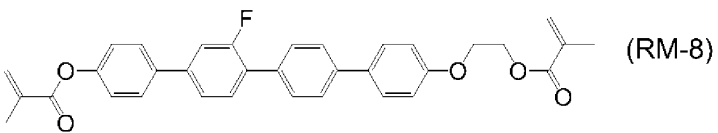
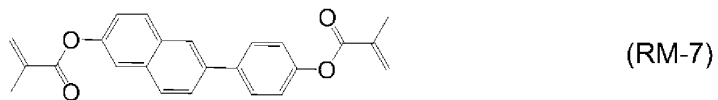
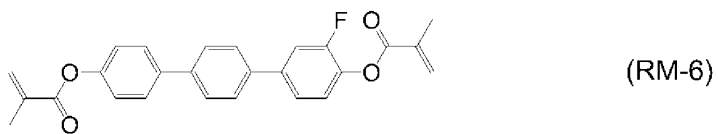
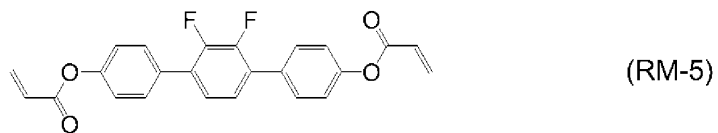
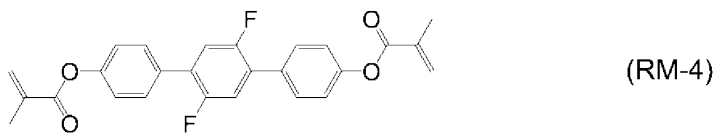
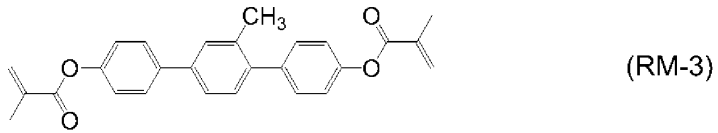
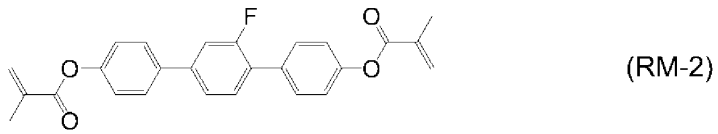
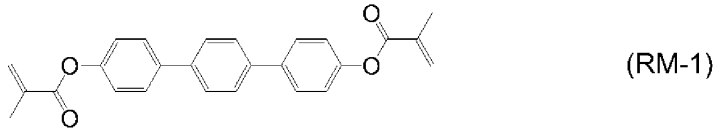
[0275]

[0276] NI=80.2℃; Tc<-20℃; Δn=0.118; Δε=6.2; Vth=1.53 V; η=15.1 mPa·s.

[0277]	[조성물 M11]		
	3-HHB-F	(2-9)	3%
	3-GHB(F, F)-F	(2-21)	4%
	3-HBB(F)-F	(2-23)	3%
	3-GB(F)B(F)-F	(2-31)	8%
	3-BB(F)B(F, F)-CF3	(2-37)	3%
	3-GB(F)B(F)B(F)-F	(2-45)	2%
	4-GBB(F)B(F, F)-F	(2-46)	3%
	3-HH-V	(3-1)	30%
	F3-HH-V	(3-1)	8%
	3-HB-O2	(3-2)	5%
	1-BB-5	(3-3)	4%
	V-HBB-2	(3-6)	6%
	1-BB(F)B-2V	(3-8)	4%
	2-BB(F)B-2V	(3-8)	6%
	3-BB(F)B-2V	(3-8)	3%
	5-HBBH-3	(3-11)	3%
[0278]	3-dhBB(2F, 3F)-O2	(4-16)	5%

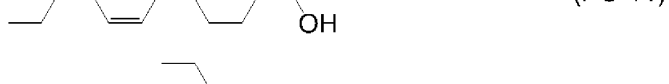
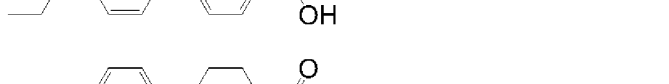
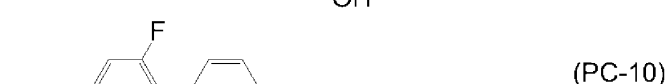
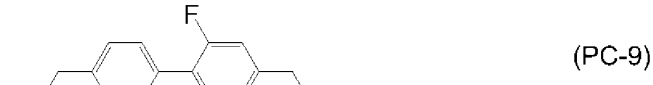
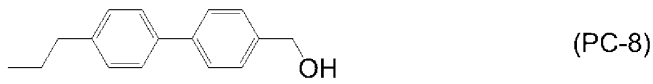
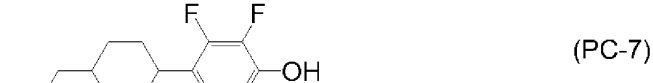
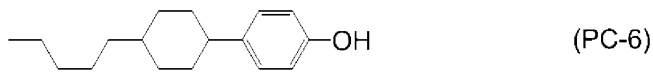
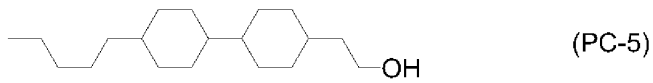
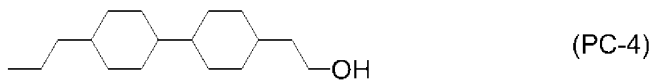
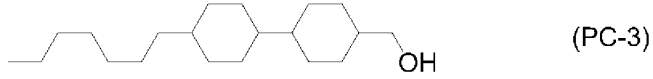
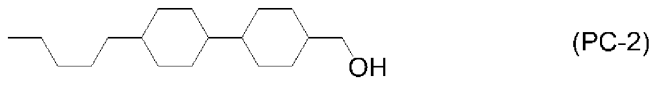
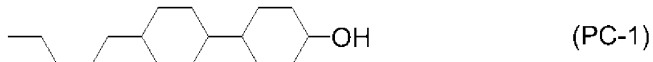
[0279] NI=82.4°C; Tc<-20°C; Δn=0.125; Δε=2.7; Vth=2.10 V; η=17.1 mPa·s.

[0280] 이하의 중합성 화합물(RM-1)~중합성 화합물(RM-8)을 제1 첨가물로서 사용하였다.

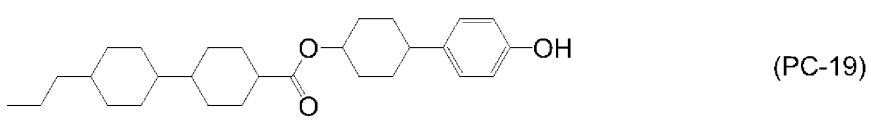
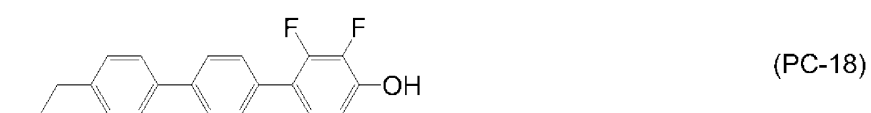
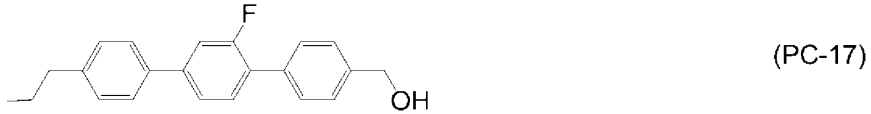
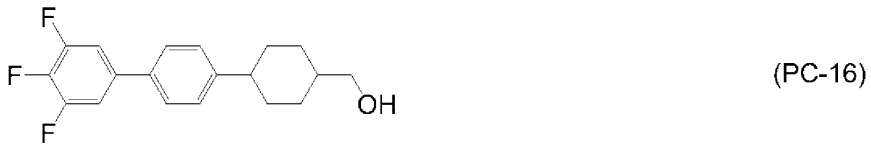
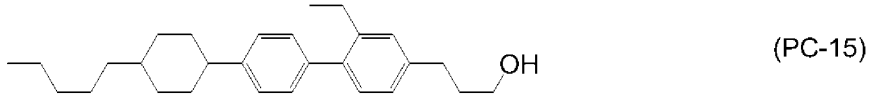
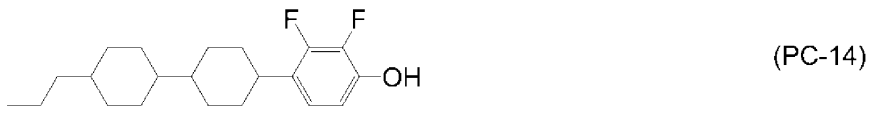
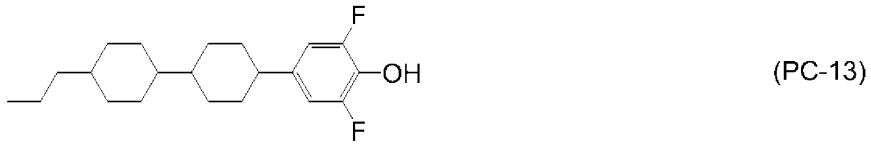


[0281]

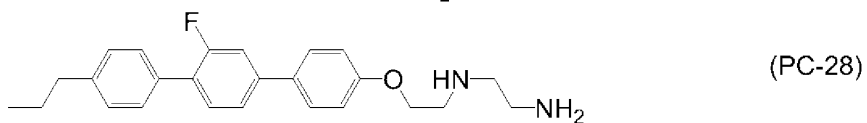
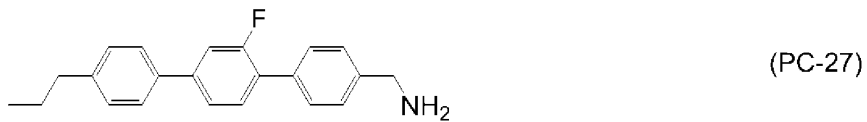
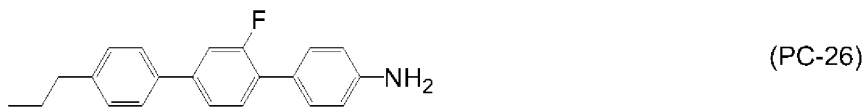
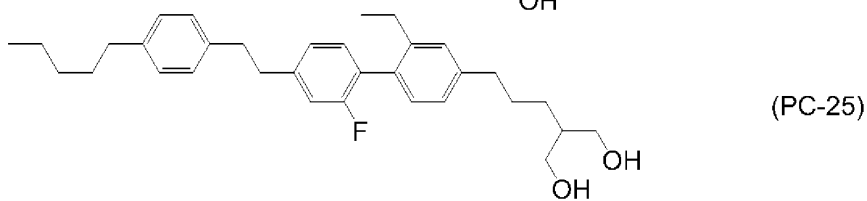
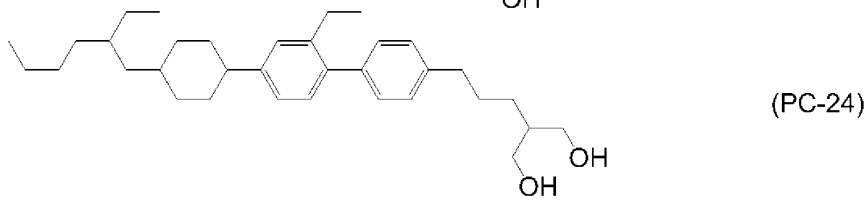
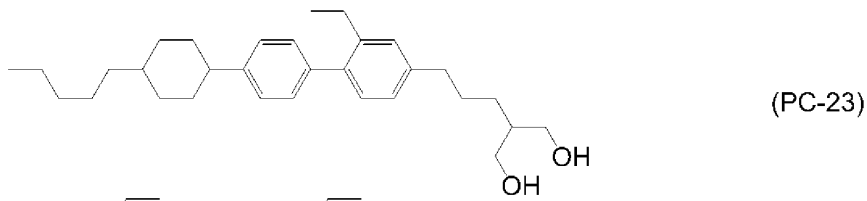
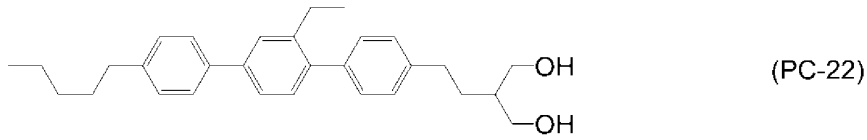
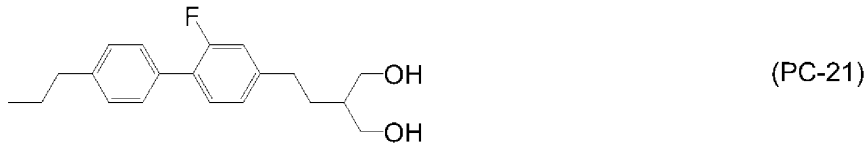
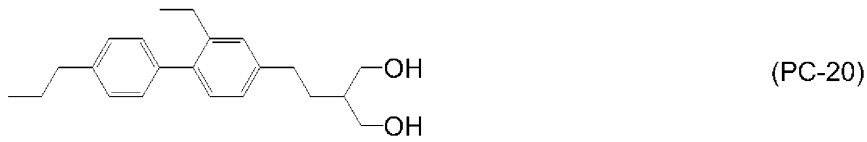
[0282] 이하의 극성 화합물(PC-1)~극성 화합물(PC-33)을 제2 첨가물로서 사용하였다.



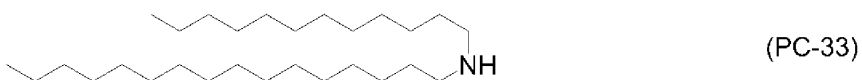
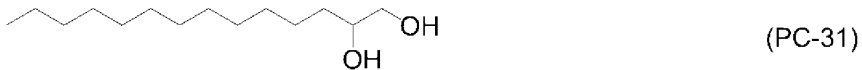
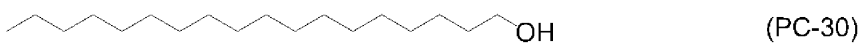
[0283]



[0284]



[0285]



[0286]

[0287]

2. 액정 분자의 수직 배향

[0288] 시험 번호 1

[0289] 조성물(M1)에 중합성 화합물(RM-1)을 0.5 중량%의 비율로, 극성 화합물(PC-1)을 5 중량%의 비율로 첨가하였다. 이 혼합물을 100℃의 핫 스테이지 상에서 2장의 유리 기관의 간격(셀 갭)이 4.0μm인, 배향막을 가지고 있지 않은 소자에 주입하였다. 이 소자에 초고압 수은 램프 USH-250-BY(우시오전기 제조)를 사용하여 자외선을 조사(28 J)함으로써, 중합성 화합물을 중합시켰다. 이 소자를 편광자와 검광자가 직교하여 배치된 편광 현미경에 세팅하고, 아래로부터 소자에 광을 조사하고, 광의 누출의 유무를 관찰하였다. 액정 분자가 충분히 배향하고, 광이 소자를 통과하지 않을 경우에는, 수직 배향이 「양호」로 판단하였다. 소자를 통과한 광이 관찰된 경우에는, 「불량」으로 나타낸다.

[0290] 시험 번호 2~33

[0291] 조성물, 중합성 화합물, 및 극성 화합물을 조합한 혼합물을 사용하여 배향막을 가지고 있지 않은 소자를 제작하였다. 시험 번호 1과 동일한 방법으로 광의 누출의 유무를 관찰하였다. 결과를 표 4에 정리하여 나타내었다.

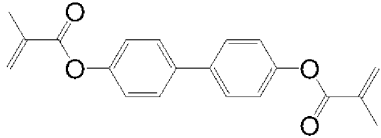
[표 4] 액정 분자의 수직 배향

시험번호	액정조성물	중합성화합물 (0.5중량%)	극성화합물 (5중량%)	수직배향
1	M1	RM-1	PC-1	양호
2	M2	RM-2	PC-2	양호
3	M3	RM-3	PC-3	양호
4	M4	RM-4	PC-4	양호
5	M5	RM-5	PC-5	양호
6	M6	RM-6	PC-6	양호
7	M7	RM-7	PC-7	양호
8	M8	RM-8	PC-8	양호
9	M9	RM-1	PC-9	양호
10	M10	RM-2	PC-10	양호
11	M11	RM-3	PC-11	양호
12	M1	RM-4	PC-12	양호
13	M2	RM-5	PC-13	양호
14	M3	RM-6	PC-14	양호
15	M4	RM-7	PC-15	양호
16	M5	RM-8	PC-16	양호
17	M6	RM-1	PC-17	양호
18	M7	RM-2	PC-18	양호
19	M8	RM-3	PC-19	양호
20	M9	RM-4	PC-20	양호
21	M10	RM-5	PC-21	양호
22	M11	RM-6	PC-22	양호
23	M1	RM-7	PC-23	양호
24	M2	RM-8	PC-24	양호
25	M3	RM-1	PC-25	양호
26	M4	RM-2	PC-26	양호
27	M5	RM-3	PC-27	양호
28	M6	RM-4	PC-28	양호
29	M7	RM-5	PC-29	양호
30	M8	RM-6	PC-30	양호
31	M9	RM-7	PC-31	양호
32	M10	RM-8	PC-32	양호
33	M11	RM-1	PC-33	양호

[0293]

[0294] 3. 중합성 화합물의 전화율

[0295] 조성물에는 극성 화합물과 함께 중합성 화합물을 첨가하였다. 이 중합성 화합물은, 중합에 의해 소비되어 중합체를 제공하였다. 이 반응의 전화율은 큰 것이 바람직하다. 이는, 중합성 화합물의 잔량(미반응 중합성 화합물의 양)은, 화상의 소부의 관점에서 적은 것이 바람직하기 때문이다. 고분자 지지 배향형 소자를 제작할 때는, 액정 분자의 프리틸트각을 최적화할 목적으로, 일반적으로 2단계로 자외선을 조사한다. 다음 시험에서는, 제1단계의 자외선을 조사한 후, 중합성 화합물의 잔량을 측정하고, 전화율을 산출하였다. 비교하기 위해, 하기 중합성 화합물(RM-9)을 선택하였다. 이 화합물은, 기호의 정의에 의해 화합물(1)로부터 제외되어 있다.



(RM-9)

[0296]

[0297] 중합은 다음과 같이 행하였다. 「액정 분자의 수직 배향」의 단락에 기재한 방법으로, 배향막을 가지고 있지 않은 소자를 제작하였다. 이 소자에, 30 V의 전압을 인가하면서 78 mW/cm²(405 nm)의 자외선을 359초간(28 J) 조사하였다. 자외선의 조사에는, 아이그래픽스 가부시키가이샤에서 제조한, 자외 경화용 멀티 메탈 램프 M04-L41을 사용하였다. HPLC에 의해, 중합성 화합물의 잔량을 측정하고, 전화율을 산출하였다. 결과를 표 5에 정리하여 나타내었다. 시험 번호 1~8의 전화율은 38%~46%의 범위였다. 비교예 1에서는, 시험 번호 1에서 사용된 중합성 화합물(RM-1)을 중합성 화합물(RM-9)로 치환하여 중합시켰다. 이 경우에 전화율은 18%였다. 이 비교에 의해, 본 발명의 조성물은, 전화율의 점에서도 우수한 것으로 결론을 내릴 수 있다.

[표 5] 중합성 화합물의 전화율

시험번호	액정조성물	중합성화합물 (0.5중량%)	극성화합물 (5중량%)	중합성화합물의 잔량(중량%)	전화율
1	M1	RM-1	PC-1	0.29	42%
2	M2	RM-2	PC-2	0.30	40%
3	M3	RM-3	PC-3	0.31	38%
4	M4	RM-4	PC-4	0.27	46%
5	M5	RM-5	PC-5	0.28	44%
6	M6	RM-6	PC-6	0.27	46%
7	M7	RM-7	PC-7	0.29	42%
8	M8	RM-8	PC-8	0.30	40%
비교예 1	M1	RM-9	PC-1	0.41	18%

[0299]

[0300] 표 4와 표 5가 나타내는 결과는, 중합성 화합물 및 극성 화합물을 포함하는 액정 조성물을 사용하는 것에 의해, 각 성분의 종류가 상이함에도 불구하고, 배향막이 없어도 액정 분자가 안정적으로 배향하고 있는 것을 나타내고 있다. 이는, 특필(特筆)해야 할 본 발명의 특징이다.

[0301] [산업상 이용가능성]

[0302] 본 발명의 액정 조성물은, 배향막을 가지고 있지 않은 소자에 있어서, 액정 분자의 배향을 제어할 수 있다. 이 조성물은, 높은 상한 온도, 낮은 하한 온도, 작은 점도, 적절한 광학 이방성, 양으로 큰 유전율 이방성, 큰 비저항, 자외선에 대한 높은 안정성, 열에 대한 높은 안정성, 큰 탄성 상수 등의 특성에 있어서, 1개 이상의 특성을 충족하거나, 또는 2개 이상의 특성에 대하여 적절한 밸런스를 가진다. 이 조성물을 함유하는 액정 표시 소자는, 짧은 응답 시간, 큰 전압 유지율, 낮은 임계값 전압, 큰 콘트라스트비, 긴 수명 등의 특성을 가지므로, 액정 프로젝터, 액정 TV 등에 사용할 수 있다.