

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2017年8月31日(31.08.2017)



(10) 国際公開番号

WO 2017/145611 A1

- (51) 国際特許分類:
C09K 19/56 (2006.01) C09K 19/34 (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01) C09K 19/42 (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01) C09K 19/54 (2006.01)
C09K 19/20 (2006.01) G02F 1/13 (2006.01)
C09K 19/30 (2006.01) G02F 1/1337 (2006.01)
C09K 19/32 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2017/002357
- (22) 国際出願日: 2017年1月24日(24.01.2017)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2016-034071 2016年2月25日(25.02.2016) JP
- (71) 出願人: J N C 株式会社(JNC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1008105 東京都千代田区大手町二丁目2番1号 Tokyo (JP). J N C 石油化学株式会社(JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) [JP/JP]; 〒1000004 東京都千代田区大手町二丁目2番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 齋藤 将之(SAITO Masayuki); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C 石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP).
- (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

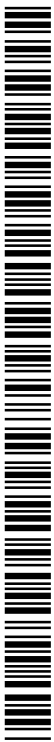
— 国際調査報告 (条約第 21 条(3))

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

(54) 発明の名称: 液晶組成物および液晶表示素子

(57) Abstract: Provided are: a liquid crystal composition in which vertical alignment of liquid crystal molecules can be achieved by the action of a polymer; and a liquid crystal display element which comprises the composition. The liquid crystal composition, which is a nematic liquid crystal composition comprising a polar compound carrying at least one polymerizable group as a first additive and a polymerizable compound carrying at least three polymerizable groups as a second additive and having negative dielectric anisotropy, may comprise a specific liquid crystalline compound having largely negative dielectric anisotropy as a first component and a specific liquid crystalline compound having a high upper limit temperature or a low viscosity as a second component. The liquid crystal display element comprises the composition.

(57) 要約: 重合体の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能な液晶組成物、この組成物を含有する液晶表示素子を提供する。第一添加物として少なくとも1つの重合性基を有する極性化合物、および第二添加物として少なくとも3つの重合性基を有する重合性化合物を含有し、負の誘電率異方性を有するネマチック液晶組成物であり、この組成物は、第一成分として負に大きな誘電率異方性を有する特定の液晶性化合物、第二成分として高い上限温度または小さな粘度を有する特定の液晶性化合物を含有してもよく、そしてこの組成物を含有する液晶表示素子である。



WO 2017/145611 A1

明 細 書

発明の名称：液晶組成物および液晶表示素子

技術分野

[0001] 本発明は、誘電率異方性が負の液晶組成物、この組成物を含有する液晶表示素子などに関する。特に、重合性基を有する極性化合物（またはその重合体）および重合性化合物（またはこの重合体）を含有し、これらの化合物の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能である液晶組成物、および液晶表示素子に関する。

背景技術

[0002] 液晶表示素子において、液晶分子の動作モードに基づいた分類は、P C (p hase change)、T N (twisted nematic)、S T N (super twisted nematic)、E C B (electrically controlled birefringence)、O C B (optically compensated bend)、I P S (in-plane switching)、V A (vertical alignment)、F F S (fringe field switching)、F P A (field-induced photo-reactive alignment) などのモードである。素子の駆動方式に基づいた分類は、P M (passive matrix) とA M (active matrix) である。P Mは、スタティック (static)、マルチプレックス (multiplex) などに分類され、A Mは、T F T (thin film transistor)、M I M (metal insulator metal) などに分類される。T F Tの分類は非晶質シリコン (amorphous silicon) および多結晶シリコン (polycrystal silicon) である。後者は製造工程によって高温型と低温型とに分類される。光源に基づいた分類は、自然光を利用する反射型、バックライトを利用する透過型、そして自然光とバックライトの両方を利用する半透過型である。

[0003] 液晶表示素子はネマチック相を有する液晶組成物を含有する。この組成物は適切な特性を有する。この組成物の特性を向上させることによって、良好な特性を有するA M素子を得ることができる。2つの特性における関連を下記の表1にまとめる。組成物の特性を市販されているA M素子に基づいてさ

らに説明する。ネマチック相の温度範囲は、素子の使用できる温度範囲に関連する。ネマチック相の好ましい上限温度は約70℃以上であり、そしてネマチック相の好ましい下限温度は約-10℃以下である。組成物の粘度は素子の応答時間に関連する。素子で動画を表示するためには短い応答時間が好ましい。1ミリ秒でもより短い応答時間が望ましい。したがって、組成物における小さな粘度が好ましい。低い温度における小さな粘度はさらに好ましい。

[0004] 表1. 組成物とAM素子における特性

番号	組成物の特性	AM素子の特性
1	ネマチック相の温度範囲が広い	使用できる温度範囲が広い
2	粘度が小さい	応答時間が短い
3	光学異方性が適切である	コントラスト比が大きい
4	正または負に誘電率異方性が大きい	しきい値電圧が低く、消費電力が小さい コントラスト比が大きい
5	比抵抗が大きい	電圧保持率が大きく、コントラスト比が大きい
6	紫外線および熱に安定である	寿命が長い

[0005] 組成物の光学異方性は、素子のコントラスト比に関連する。素子のモードに応じて、大きな光学異方性または小さな光学異方性、すなわち適切な光学異方性が必要である。組成物の光学異方性 (Δn) と素子のセルギャップ (d) との積 ($\Delta n \times d$) は、コントラスト比を最大にするように設計される。積の適切な値は動作モードの種類に依存する。この値は、VAモードの素子では約0.30 μm から約0.40 μm の範囲であり、IPSモードまたはFFSモードの素子では約0.20 μm から約0.30 μm の範囲である。これらの場合、小さなセルギャップの素子には大きな光学異方性を有する組成物が好ましい。組成物における大きな誘電率異方性は、素子における低いしきい値電圧、小さな消費電力と大きなコントラスト比に寄与する。したがって、大きな誘電率異方性が好ましい。組成物における大きな比抵抗は、素子における大きな電圧保持率と大きなコントラスト比とに寄与する。したがって、初期段階において室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。長時間使用したあと、室温

だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。紫外線や熱に対する組成物の安定性は、素子の寿命に関連する。この安定性が高いとき、素子の寿命は長い。このような特性は、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いるAM素子に好ましい。

[0006] 汎用の液晶表示素子において、液晶分子の垂直配向は、特定のポリイミド配向膜によって達成される。高分子支持配向（PSA；polymer sustained alignment）型の液晶表示素子では、重合体の効果を活用する。まず、少量の重合性化合物を添加した組成物を素子に注入する。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。重合性化合物は重合して、組成物中に重合体の網目構造を生成する。この組成物では、重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。重合体のこのような効果は、TN、ECB、OCB、IPS、VA、FFS、FPAのようなモードを有する素子に期待できる。

[0007] 一方、配向膜を有しない液晶表示素子では、重合体および重合性基を有しない極性化合物を含有する液晶組成物が用いられる。まず、少量の重合性化合物および少量の極性化合物を添加した組成物を素子に注入する。ここで、極性化合物は基板表面に吸着され、配列する。この配列にしたがって液晶分子が配向される。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。ここで、重合性化合物が重合し、液晶分子の配向を安定化させる。この組成物では、重合体および極性化合物によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。さらに、配向膜を有しない素子では、配向膜を形成する工程が不要である。配向膜がないので、配向膜と組成物との相互作用によって、素子の電気抵抗が低下することはない。重合体と極性化合物の組合せによるこのような効果は、TN、ECB、OCB、IPS、VA、FFS、FPAのようなモードを有する素子に期待できる。

[0008] TNモードを有するAM素子においては正の誘電率異方性を有する組成物

が用いられる。VAモードを有するAM素子においては負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。IPSモードまたはFFSモードを有するAM素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。高分子支持配向型のAM素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。負の誘電率異方性を有する液晶組成物の例は次の特許文献1から6に開示されている。本発明では、重合性基を有する極性化合物（またはその重合体）および重合性化合物（またはこの重合体）を液晶性化合物と組み合わせ、この組成物を、配向膜を有しない液晶表示素子に用いた。

先行技術文献

特許文献

- [0009] 特許文献1：国際公開第2014/090362号パンフレット
- 特許文献2：国際公開第2014/094959号パンフレット
- 特許文献3：国際公開第2013/004372号パンフレット
- 特許文献4：国際公開第2012/104008号パンフレット
- 特許文献5：国際公開第2012/038026号パンフレット
- 特許文献6：特開昭50-35076号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

- [0010] 本発明の1つの目的は、重合性基を有する極性化合物（またはこの重合体）および重合性化合物（またはこの重合体）を含有する液晶組成物であり、ここで極性化合物および重合性化合物は、液晶性化合物との高い相溶性を有する。別の目的は、この極性化合物および重合性化合物から生成した重合体の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能な液晶組成物である。別の目的は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性などの特性において、少なくとも1つの特性を充足する液晶組成物である。別の目的は、少なくとも2つの

特性のあいだで適切なバランスを有する液晶組成物である。別の目的は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。別の目的は、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するAM素子である。

課題を解決するための手段

[0011] 本発明は、第一添加物として少なくとも1つの重合性基を有する極性化合物、および第二添加物として少なくとも3つの重合性基を有する重合性化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物、およびこの組成物を含有する液晶表示素子に関する。

発明の効果

[0012] 本発明の1つの長所は、重合性基を有する極性化合物（またはこの重合体）および重合性化合物（またはこの重合体）を含有する液晶組成物であり、ここで極性化合物および重合性化合物は、液晶性化合物との高い相溶性を有する。別の長所は、この極性化合物および重合性化合物から生成した重合体の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能な液晶組成物である。別の長所は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性などの特性において、少なくとも1つの特性を充足する液晶組成物である。別の長所は、少なくとも2つの特性のあいだで適切なバランスを有する液晶組成物である。別の長所は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。別の長所は、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するAM素子である。

発明を実施するための形態

[0013] この明細書における用語の使い方は次のとおりである。「液晶組成物」および「液晶表示素子」の用語をそれぞれ「組成物」および「素子」と略すことがある。「液晶表示素子」は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。「液晶性化合物」は、ネマチック相、スメクチック相などの液

晶相を有する化合物および液晶相を有しないが、ネマチック相の温度範囲、粘度、誘電率異方性のような特性を調節する目的で組成物に混合される化合物の総称である。この化合物は、例えば1,4-シクロヘキシレンや1,4-フェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状 (rod like) である。「重合性化合物」は、組成物中に重合体を生成させる目的で添加する化合物である。アルケニルを有する液晶性化合物は、その意味では重合性ではない。

[0014] 液晶組成物は、複数の液晶性化合物を混合することによって調製される。この液晶組成物に、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物のような添加物が必要に応じて添加される。液晶性化合物や添加物は、このような手順で混合される。液晶性化合物の割合（含有量）は、添加物を添加した場合であっても、添加物を含まない液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。添加物の割合（添加量）は、添加物を含まない液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。重量百万分率（ppm）が用いられることがある。重合開始剤および重合禁止剤の割合は、例外的に重合性化合物の重量に基づいて表される。

[0015] 「ネマチック相の上限温度」を「上限温度」と略すことがある。「ネマチック相の下限温度」を「下限温度」と略すことがある。「比抵抗が大きい」は、組成物が初期段階において室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有し、そして長時間使用したあと室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有することを意味する。「電圧保持率が大きい」は、素子が初期段階において室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有し、そして長時間使用したあと室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有することを意味する。組成物や素子では、経時変化試験（加速劣化試験を含む）の前後で特性が検討されることがある。「誘電率異方性を上げる」の表現は、誘電率異方性が正である組成物のときは、その値が正に増加することを意味し、誘電率異方性が負である組成物の

ときは、その値が負に増加することを意味する。

[0016] 式(1)で表される化合物を「化合物(1)」と略すことがある。式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を「化合物(1)」と略すことがある。「化合物(1)」は、式(1)で表される1つの化合物、2つの化合物の混合物、または3つ以上の化合物の混合物を意味する。他の式で表される化合物についても同様である。「少なくとも1つの‘A’」の表現は、‘A’の数は任意であることを意味する。「少なくとも1つの‘A’は、‘B’で置き換えられてもよい」の表現は、‘A’の数が1つのとき、‘A’の位置は任意であり、‘A’の数が2つ以上のときも、それらの位置は制限なく選択できる。このルールは、「少なくとも1つの‘A’が、‘B’で置き換えられた」の表現にも適用される。

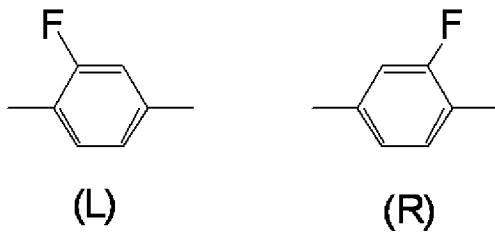
[0017] 「少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよい」のような表現がこの明細書で使われる。この場合、 $-CH_2-CH_2-CH_2-$ は、隣接しない $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられることによって $-O-CH_2-O-$ に変換されてもよい。しかしながら、隣接した $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられることはない。この置き換えでは $-O-O-CH_2-$ (ペルオキシド)が生成するからである。すなわち、この表現は、「1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよい」と「少なくとも2つの隣接しない $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよい」の両方とを意味する。このルールは、 $-O-$ への置き換えだけでなく、 $-CH=CH-$ や $-COO-$ のような二価基への置き換えにも適用される。アルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ が炭素数3から8のシクロアルキレンで置き換えられることがある。アルキルの炭素数は、この置き換えによって増加する。このようなとき、最大の炭素数は30である。このルールは、アルキルのような一価基だけでなく、アルキレンのような二価基にも適用される。

[0018] 成分化合物の化学式において、末端基 R^1 の記号を複数の化合物に用いる。これらの化合物において、任意の2つの R^1 が表す2つの基は同一であってもよく、または異なってもよい。例えば、化合物(1-1)の R^1 がエチルであ

り、化合物（1-2）のR¹がエチルであるケースがある。化合物（1-1）のR¹がエチルであり、化合物（1-2）のR¹がプロピルであるケースもある。このルールは、他の記号に適用される。式（1）において、aが2のとき、2つの環Aが存在する。この化合物において、2つの環Aが表す2つの環は、同一であってもよく、または異なってもよい。このルールは、aが2より大きいとき、任意の2つの環Aにも適用される。このルールは、他の記号に適用される。このルールは、化合物（5-7）における2つの-S p¹-P⁵のような場合にも適用される。

[0019] 六角形で囲んだA、B、C、Dなどの記号はそれぞれ環A、環B、環C、環Dなどの環に対応し、六員環、縮合環などの環を表す。式（3）において、この六角形を横切る斜線は、環上の任意の水素が-S p¹-P¹などの基で置き換えられてもよいことを表す。‘k’などの添え字は、置き換えられた基の数を示す。添え字‘k’が0のとき、そのような置き換えはない。添え字‘k’が2以上のとき、環J上には複数の-S p¹-P¹が存在する。-S p¹-P¹が表す複数の基は、同一であってもよく、または異なってもよい。「環Aおよび環Cは独立して、X、Y、またはZである」の表現では、主語が複数であるから、「独立して」を用いる。主語が「環A」であるときは、主語が単数であるから「独立して」を用いない。「環A」が複数の式で使われる場合には、「同一であってもよく、または異なってもよい」のルールが「環A」に適用される。他の基についても同様である。

[0020] 2-フルオロ-1, 4-フェニレンは、下記の2つの二価基を意味する。化学式において、フッ素は左向き（L）であってもよく、または右向き（R）であってもよい。このルールは、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイルのような、環から2つの水素を除くことによって生成した、非対称な二価基にも適用される。このルールは、カルボニルオキシ（-C O O-または-O C O-）のような二価の結合基にも適用される。

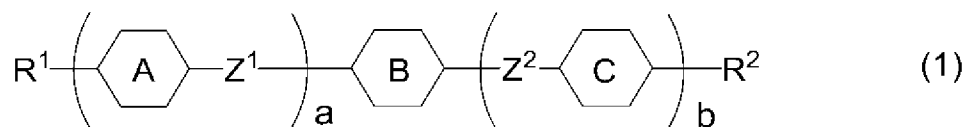


[0021] 液晶性化合物のアルキルは、直鎖状または分岐状であり、環状アルキルを含まない。直鎖状アルキルは、分岐状アルキルよりも好ましい。これらのことは、アルコキシ、アルケニルなどの末端基についても同様である。1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置は、上限温度を上げるためにシスよりもトランスが好ましい。

[0022] 本発明は、下記の項などである。

[0023] 項1. 第一添加物として少なくとも1つの重合性基を有する極性化合物、および第二添加物として少なくとも3つの重合性基を有する重合性化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

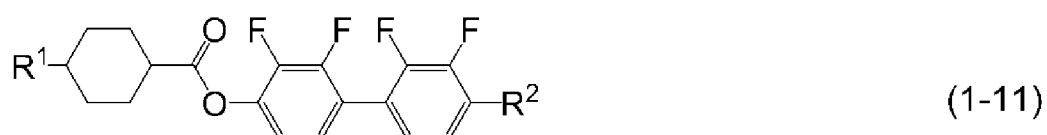
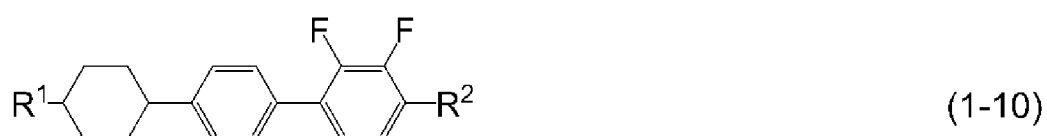
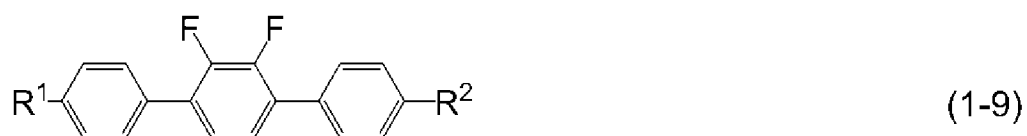
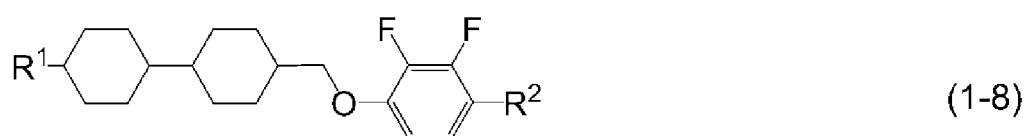
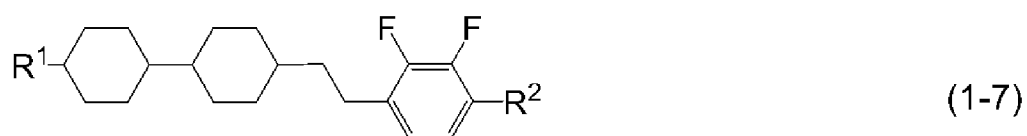
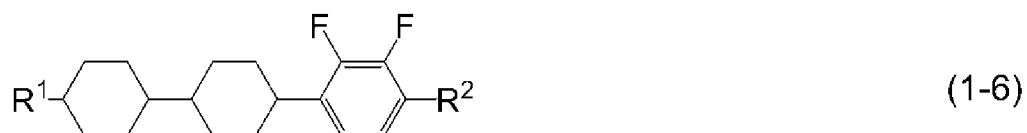
[0024] 項2. 第一成分として式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1に記載の液晶組成物。

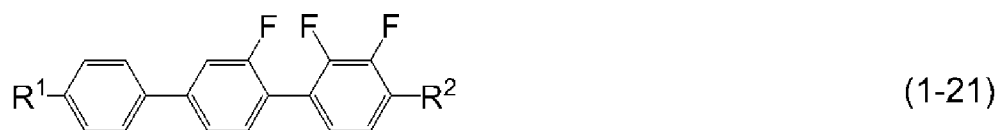
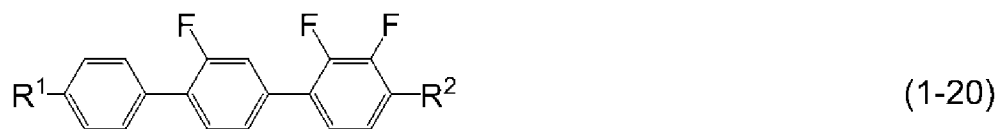
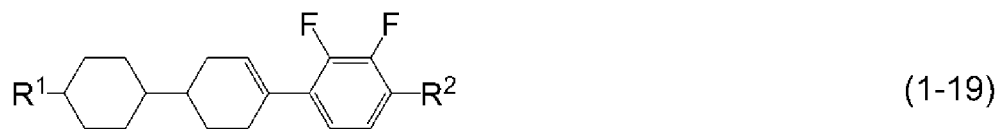
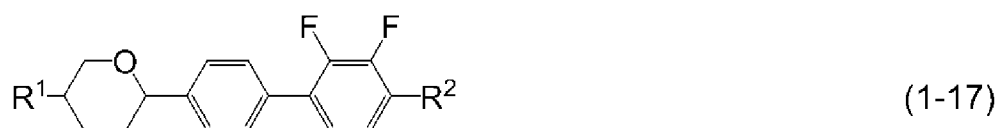
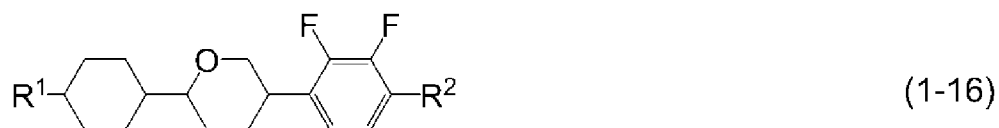
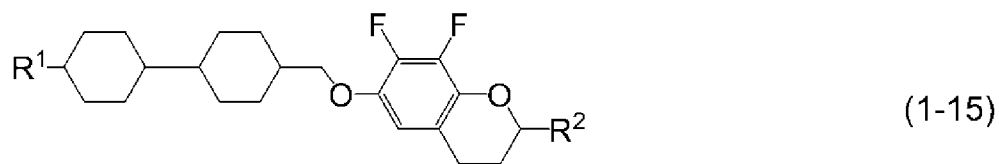
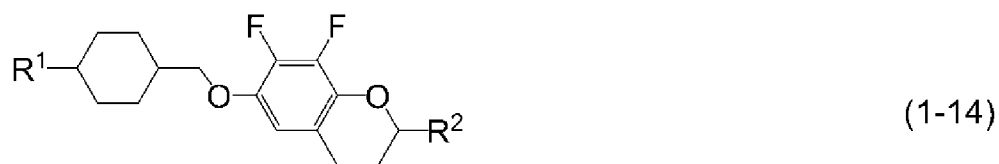
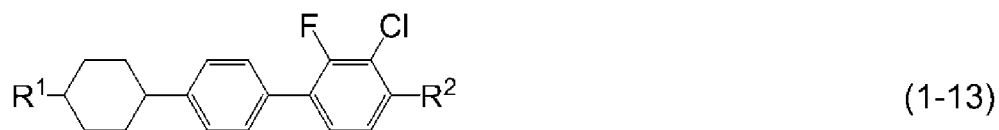
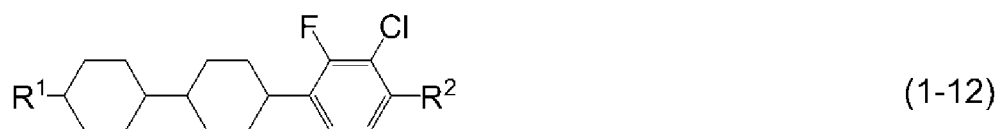


式(1)において、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシであり；環Aおよび環Cは独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたナフタレン-2, 6-ジイル、クロマン-2, 6-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたクロマン-2

, 6-ジイルであり; 環Bは、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、2-クロロ-3-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-5-メチル-1, 4-フェニレン、3, 4, 5-トリフルオロナフタレン-2, 6-ジイル、または7, 8-ジフルオロクロマン-2, 6-ジイルであり; Z^1 および Z^2 は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ であり; aは、1、2、または3であり、bは、0または1であり、そして、aとbとの和は3以下である。

[0025] 項3. 第一成分として式(1-1)から式(1-22)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1または2に記載の液晶組成物。

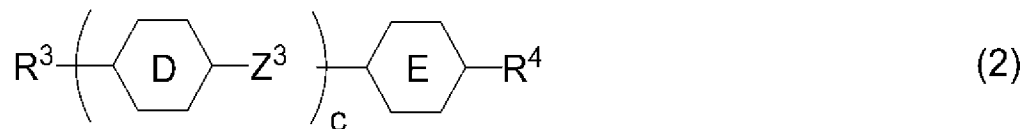




式(1-1)から式(1-22)において、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシである。

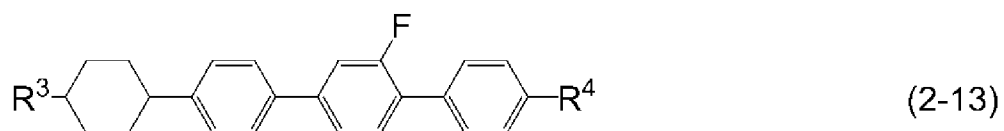
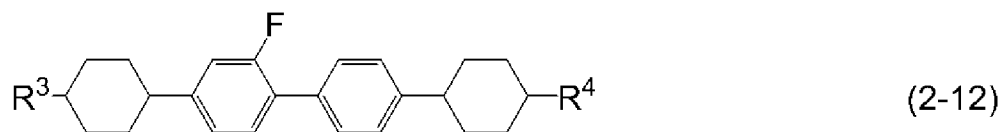
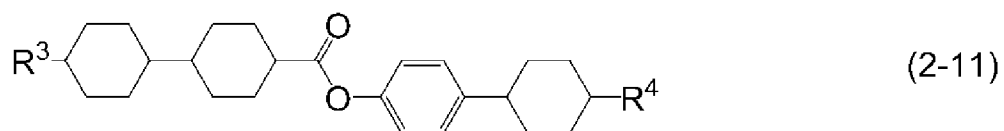
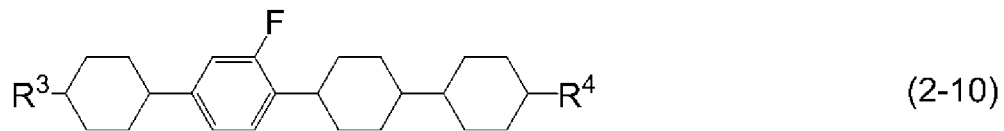
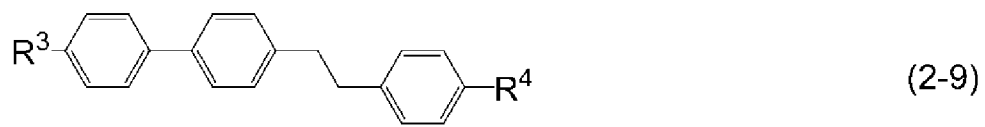
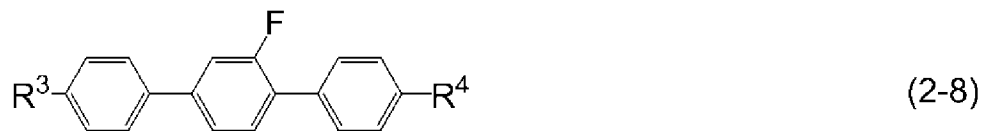
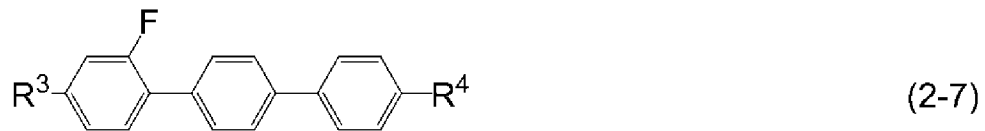
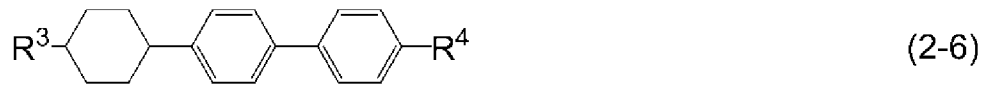
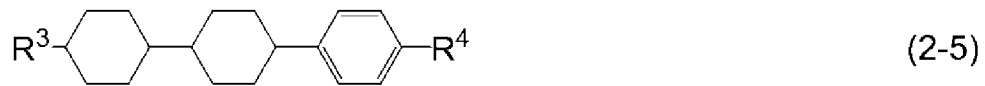
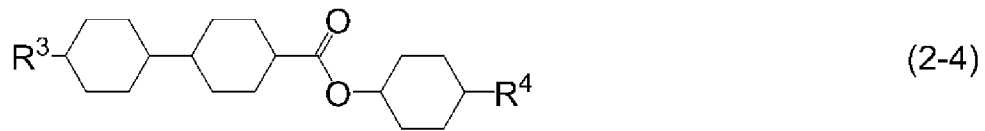
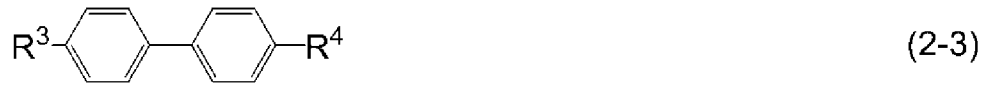
[0026] 項4. 液晶組成物の重量に基づいて、第一成分の割合が10重量%から90重量%の範囲である、項1から3のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0027] 項5. 第二成分として式(2)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から4のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(2)において、 R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり；環Dおよび環Eは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり； Z^3 は、単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、または $-\text{OCO}-$ であり； c は、1、2、または3である。

[0028] 項6. 第二成分として式(2-1)から式(2-13)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から5のいずれか1項に記載の液晶組成物。

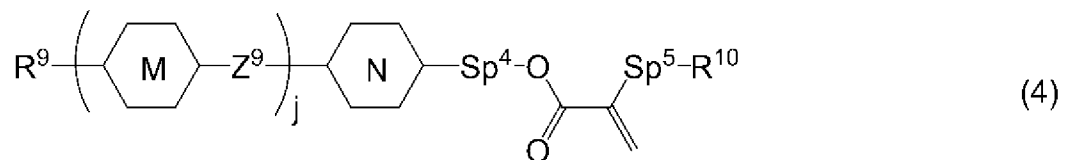
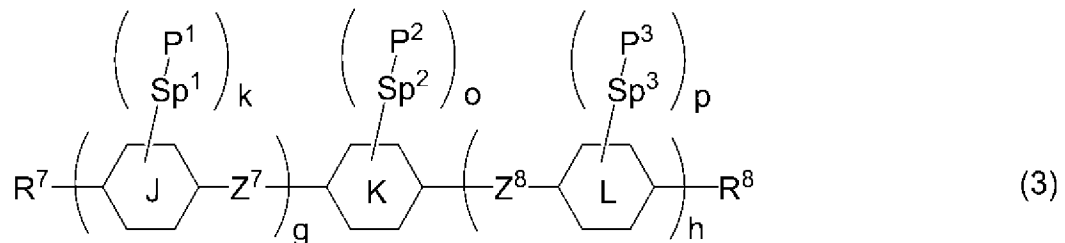


式(2-1)から式(2-13)において、 R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルである。

[0029] 項7. 液晶組成物の重量に基づいて、第二成分の割合が10重量%から70重量%の範囲である、項5または6に記載の液晶組成物。

[0030] 項8. 第一添加物が、窒素、酸素、硫黄、およびリンから選択されたヘテロ原子を有する極性化合物である、項1から7のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0031] 項9. 第一添加物として式(3)および式(4)で表される極性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から8のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(3)において、 R^7 は、水素、フッ素、塩素、または炭素数1から25のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-NR^0-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、または炭素数3から8のシクロアルキレンで置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの第三級炭素($>CH-$)は、窒素($>N-$)で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、ここで R^0 は、水素または炭素数

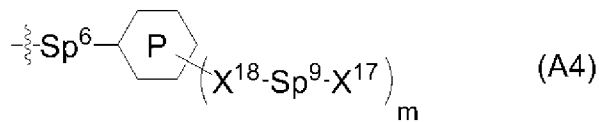
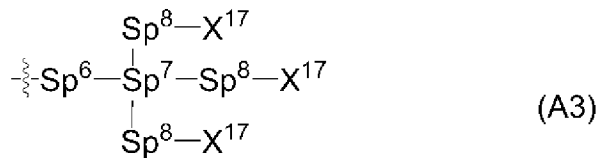
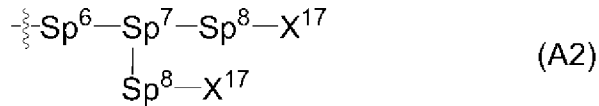
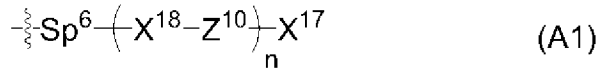
1 から 12 のアルキルであり ; R⁸は、OH構造の酸素原子、SH構造の硫黄原子、および第一級、第二級、または第三級のアミン構造の窒素原子の少なくとも1つを有する極性基であり ; 環J、環K、および環Lは独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-1, 2-ジイル、ナフタレン-1, 3-ジイル、ナフタレン-1, 4-ジイル、ナフタレン-1, 5-ジイル、ナフタレン-1, 6-ジイル、ナフタレン-1, 7-ジイル、ナフタレン-1, 8-ジイル、ナフタレン-2, 3-ジイル、ナフタレン-2, 6-ジイル、ナフタレン-2, 7-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、またはピリジン-2, 5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく ; Z⁷およびZ⁸は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-, -CO-, -COO-, または-OCO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-, -C(CH₃)=CH-, -CH=C(CH₃)-、または-C(CH₃)=C(CH₃)-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく ; P¹、P²、およびP³は、重合性基であり ; Sp¹、Sp²、およびSp³は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-, -COO-, -OCO-, または-OCO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく ; gおよびhは独立して、0、1、2、3、または4であり、そしてgおよびhの和は、0、1、2、3、または4であり ; kおよびp

は独立して、0、1、2、3、または4であり、 \circ は、1、2、3、または4であり；

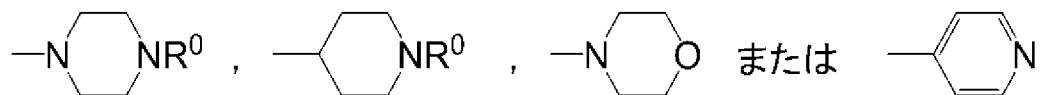
式(4)において、 R^9 は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり； R^{10} は、 $-OH$ 、 $-OR^0$ 、 $-NH_2$ 、 $-NHR^0$ 、または $-N(R^0)_2$ で表される基であり、ここで R^0 は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；環Mおよび環Nは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、またはアントラセン-2,6-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく； Z^9 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ であり； Sp^4 および Sp^5 は独立して、単結合または炭素数1から7のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられても

よく；jは、0、1、2、3、または4である。

[0032] 項10. 項9に記載の式(3)において、R⁸が式(A1)から式(A4)で表される極性基の群から選択された基である、項9に記載の液晶組成物。

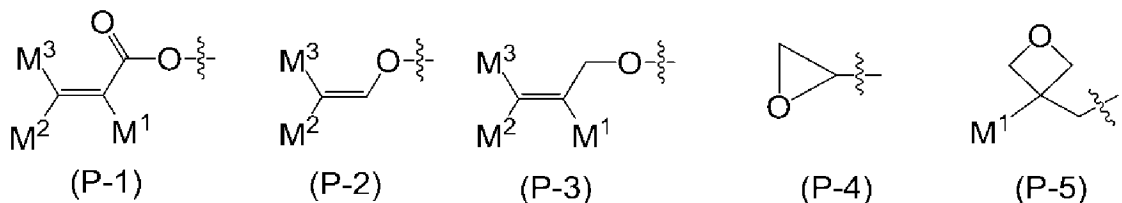


式(A1)から式(A4)において、Sp⁶、Sp⁸、およびSp⁹は独立して、単結合または炭素数1から12のアルキレンであり、このアルキレンにおいて少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-S-、-NH-、-N(R⁰)-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-O-CO-O-、-S-CO-、-CO-S-、-N(R⁰)-CO-O-、-O-CO-N(R⁰)-、-N(R⁰)-CO-N(R⁰)-、-CH=CH-、または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；Sp⁷は、>CH-、>CR⁰-、>N-、または>C<であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；X¹⁷は、-OH、-OR⁰、-COOH、-NH₂、-NHR⁰、-N(R⁰)₂、-SH、-SR⁰、



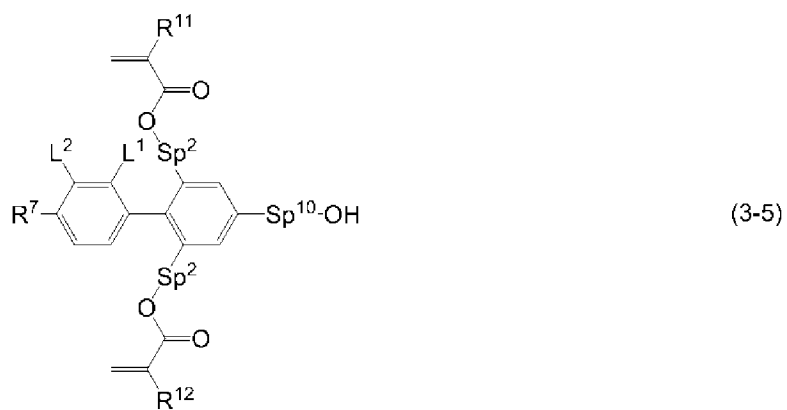
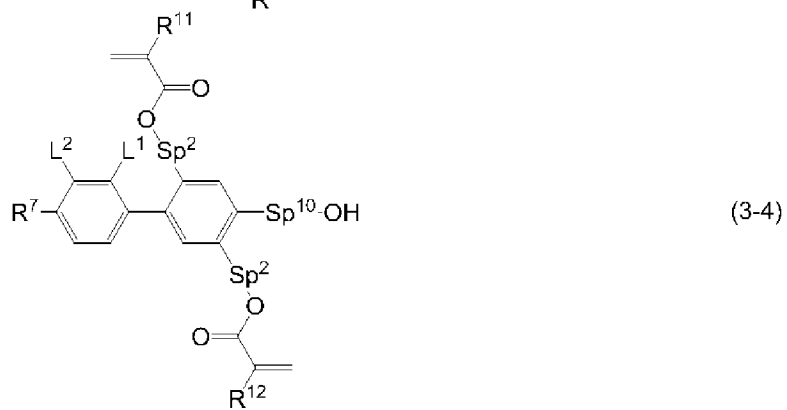
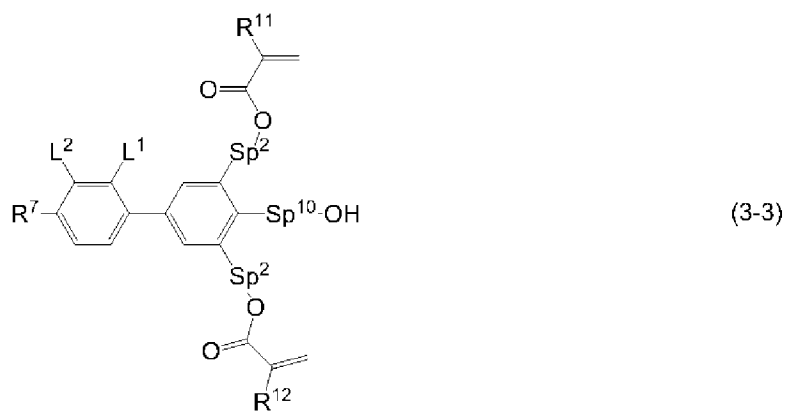
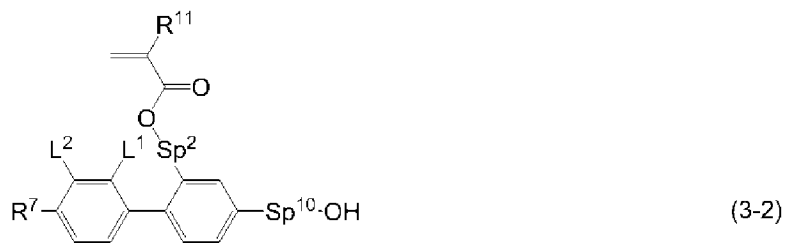
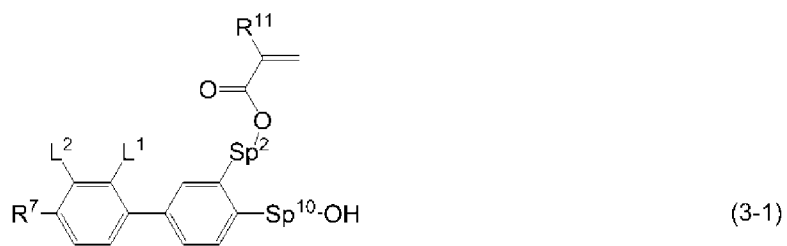
であり、ここで R^0 は、水素または炭素数1から12のアルキルであり； X^{18} は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NH-$ 、 $-NR^0-$ 、 $-S-$ 、または単結合であり、ここで R^0 は、水素または炭素数1から12のアルキルであり； Z^{10} は、単結合または炭素数1から15のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CO-$ 、または $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；環Pは、炭素数6から25のアリールであり、このアリールにおいて、1つから3つの水素は $-OH$ 、 $-(CH_2)_q-OH$ 、フッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルで置き換えられてもよく、ここでqは、1、2、3、または4であり；nは、0、1、2、または3であり；mは、1、2、3、4、または5である。

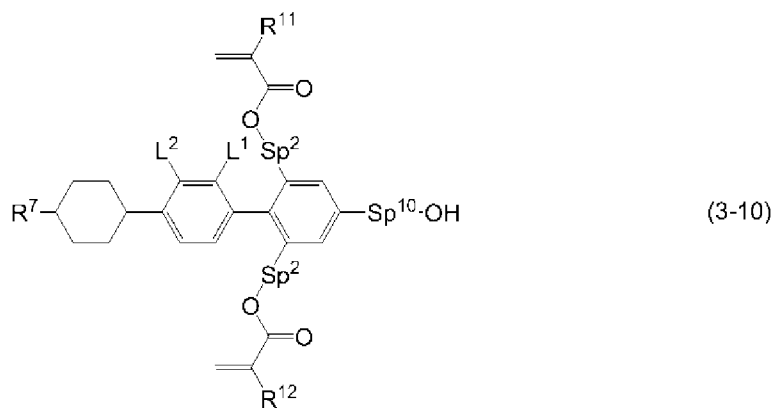
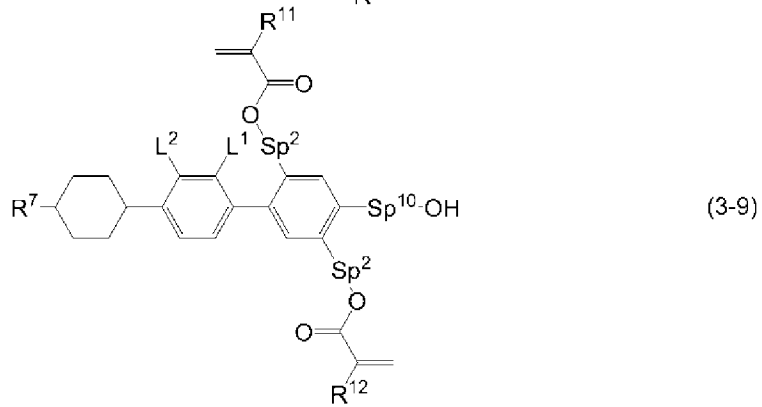
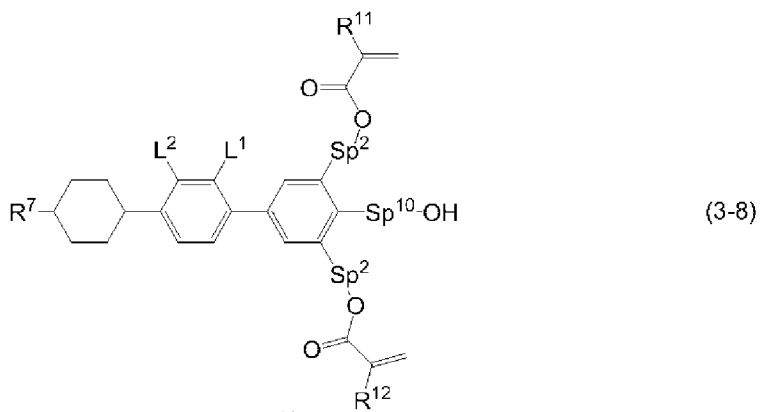
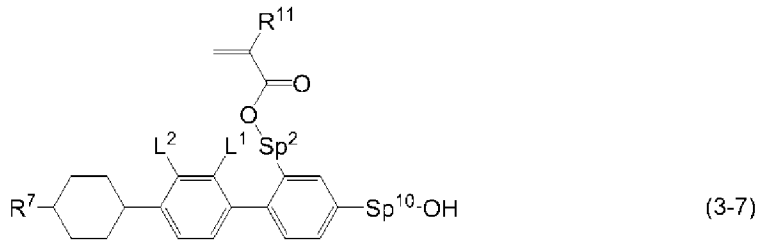
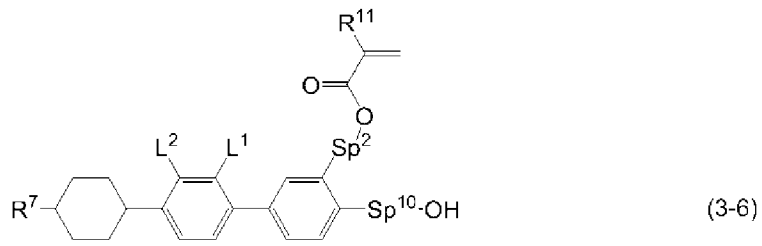
[0033] 項11. 項9に記載の式(3)において、 P^1 、 P^2 、および P^3 が独立して、式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基の群から選択された基である、項9に記載の液晶組成物。

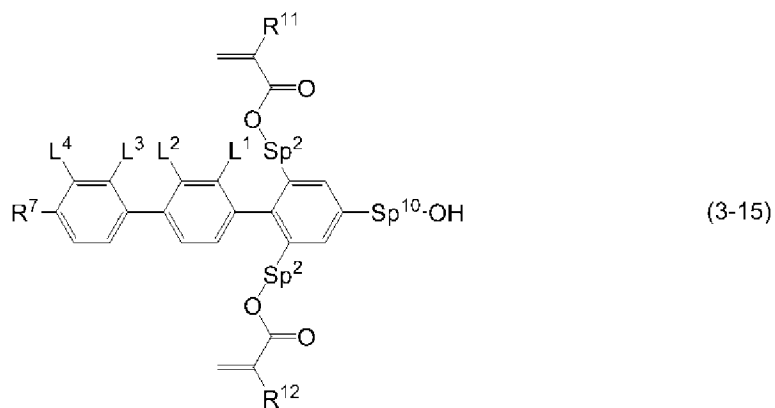
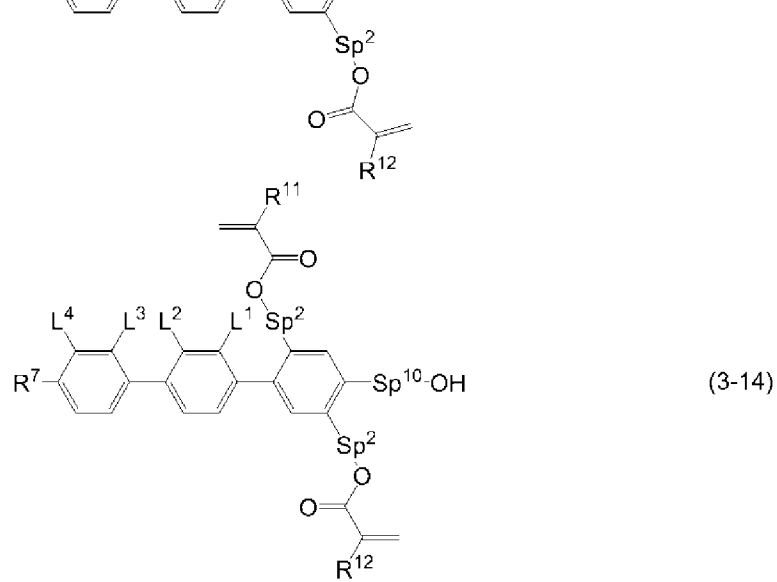
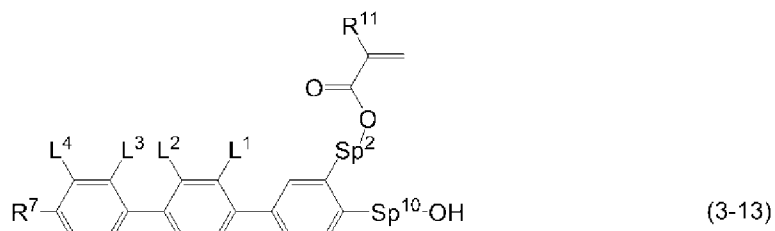
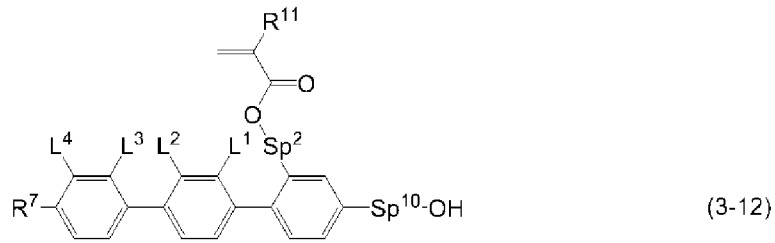
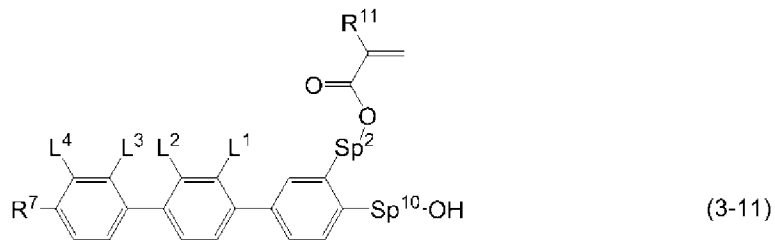


式(P-1)から式(P-5)において、 M^1 、 M^2 、および M^3 は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。

[0034] 項12. 第一添加物が式(3-1)から式(3-15)で表される極性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である、項1から11のいずれか1項に記載の液晶組成物。

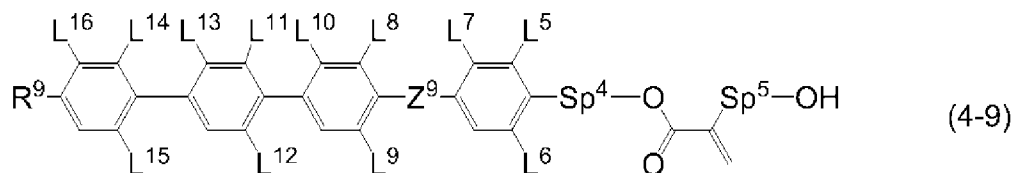
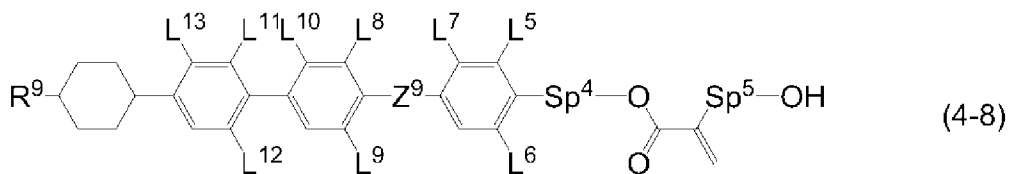
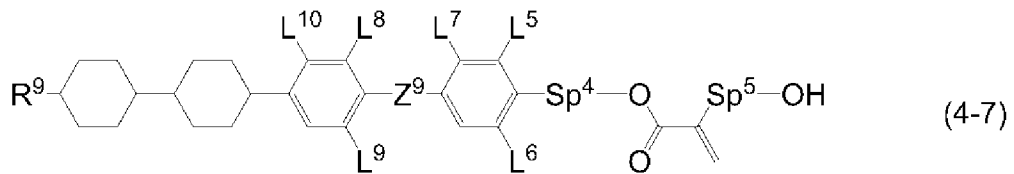
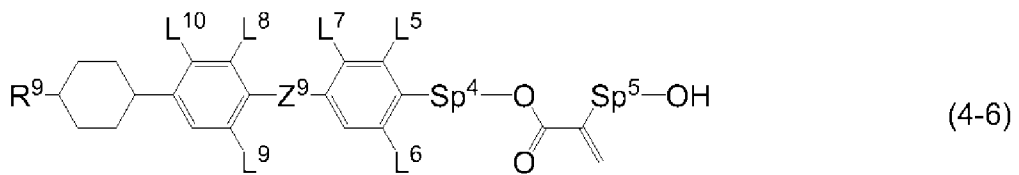
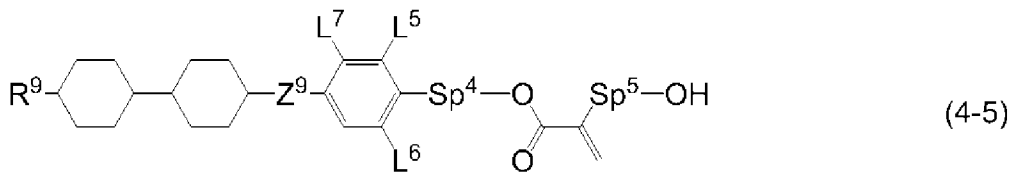
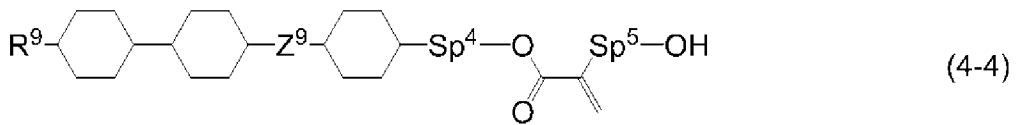
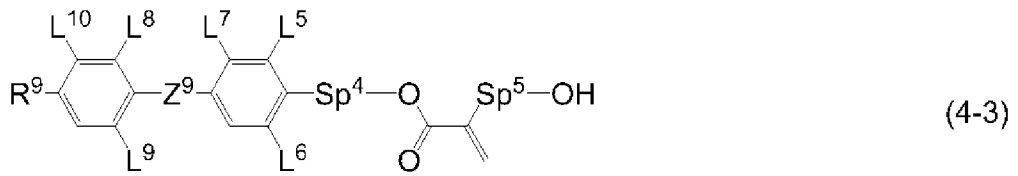
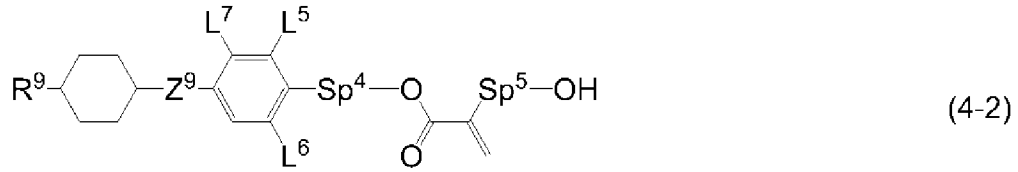
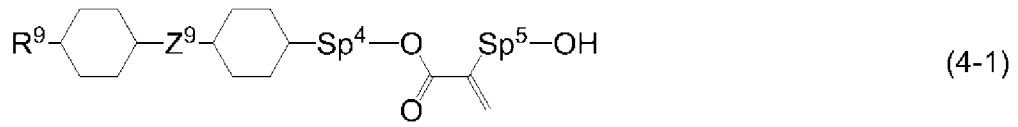






式(3-1)から式(3-15)において、 R^7 は、水素、フッ素、塩素、または炭素数1から25のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-NR^0-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、または炭素数3から8のシクロアルキレンで置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの第三級炭素($>CH-$)は、窒素($>N-$)で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、ここで R^0 は、水素または炭素数1から12のアルキルであり； Sp^2 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； Sp^{10} は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； L^1 、 L^2 、 L^3 、および L^4 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり； R^{11} および R^{12} は独立して、水素またはメチルである。

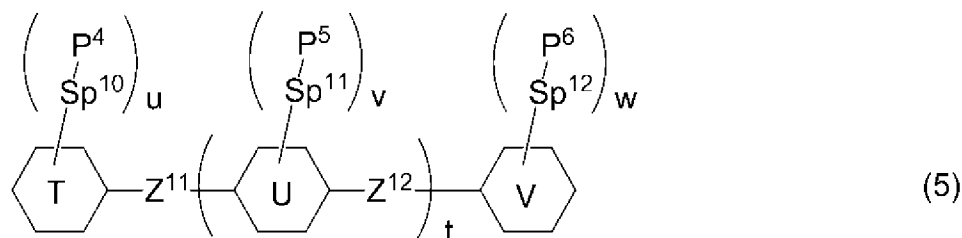
[0035] 項13. 第一添加物が式(4-1)から式(4-9)で表される極性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である、項1から12のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(4-1)から式(4-9)において、 R^9 は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり； Z^9 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ であり； Sp^4 および Sp^5 は独立して、単結合または炭素数1から7のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく； L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、 L^{10} 、 L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、 L^{14} 、 L^{15} 、および L^{16} は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルである。

[0036] 項14. 液晶組成物の重量に基づいて、第一添加物の割合が0.05重量%から10重量%の範囲である、項1から13のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0037] 項15. 第二添加物として式(5)で表される重合性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。

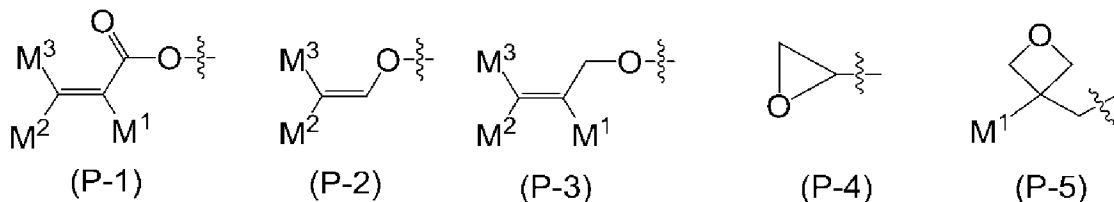


式(5)において、環Tおよび環Vは独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1,3-ジオキサン-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は

、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；環Uは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；Z¹¹およびZ¹²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-CO-、-COO-、または-OCO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-、-C(CH₃)=CH-、-CH=C(CH₃)-、または-C(CH₃)=C(CH₃)-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；P⁴、P⁵、およびP⁶は、重合性基であり；Sp¹⁰、Sp¹¹、およびSp¹²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；tは0、1、または2であり；u、v、およびwは独立して、0、1、2、3、または4であり、そしてu、v、およびwの和は、3以上で

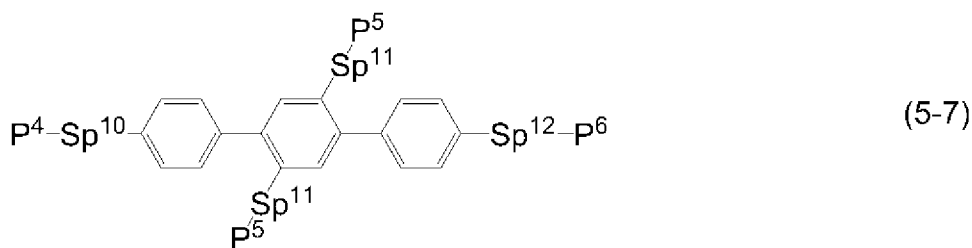
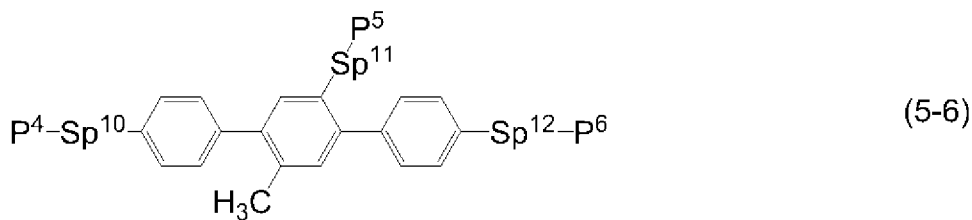
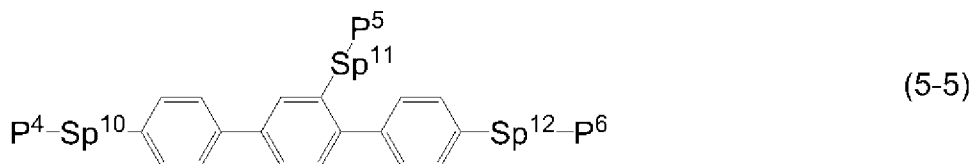
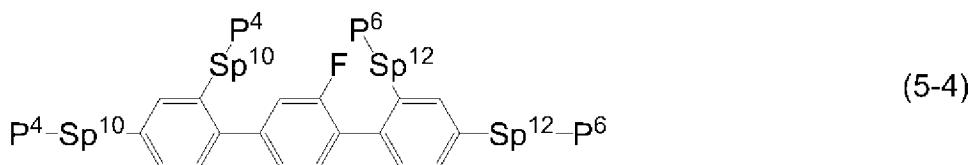
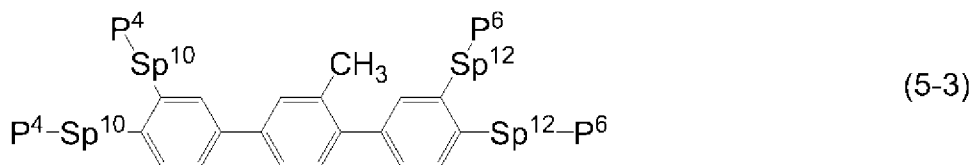
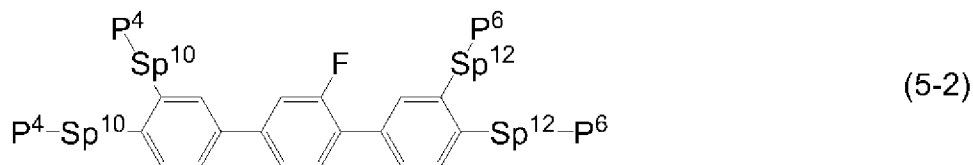
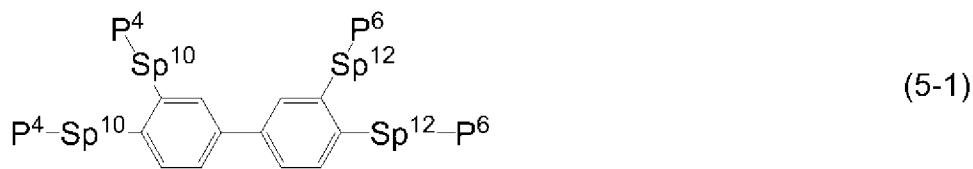
ある。

[0038] 項 1 6. 項 1 5 に記載の式 (5) において、 P^4 、 P^5 、および P^6 が独立して、式 (P-1) から式 (P-5) で表される重合性基の群から選択された基である、項 1 5 に記載の液晶組成物。

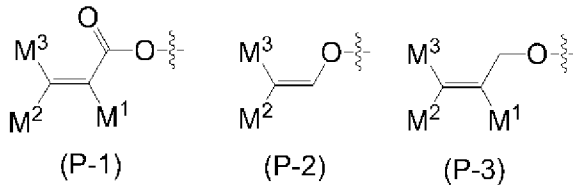


式 (P-1) から式 (P-5) において、 M^1 、 M^2 、および M^3 は独立して、水素、フッ素、炭素数 1 から 5 のアルキル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 1 から 5 のアルキルである。

[0039] 項 1 7. 第二添加物として式 (5-1) から式 (5-7) で表される重合性化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する、項 1 から 1 6 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



式 (5-1) から式 (5-7) において、 P^4 、 P^5 、および P^6 は独立して、式 (P-1) から式 (P-3) で表される重合性基の群から選択された基であり、



ここでM¹、M²、およびM³は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；S p¹⁰、S p¹¹、およびS p¹²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

- [0040] 項18. 液晶組成物の重量に基づいて、第二添加物の割合が0.03重量%から10重量%の範囲である、項15から17のいずれか1項に記載の液晶組成物。
- [0041] 項19. 項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。
- [0042] 項20. 液晶表示素子の動作モードが、IPSモード、VAモード、FFSモード、またはFPAモードであり、液晶表示素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である、項19に記載の液晶表示素子。
- [0043] 項21. 項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物中の第一添加物および第二添加物が重合された、高分子支持配向型の液晶表示素子。
- [0044] 項22. 項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物中の第一添加物および第二添加物が重合された、配向膜を有しない液晶表示素子。
- [0045] 項23. 項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、液晶表示素子における使用。

- [0046] 項 24. 項 1 から 18 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物の、高分子支持配向型の液晶表示素子における使用。
- [0047] 項 25. 項 1 から 18 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物の、配向膜を有しない液晶表示素子における使用。
- [0048] 本発明は、次の項も含む。(a) 上記の液晶組成物を 2 つの基板のあいだに配置し、この組成物に電圧を印加した状態で光を照射し、この組成物に含有された重合性基を有する化合物を重合させることによって、上記の液晶表示素子を製造する方法。(b) ネマチック相の上限温度が 70℃以上であり、波長 589 nm における光学異方性 (25℃で測定) が 0.08 以上であり、そして周波数 1 kHz における誘電率異方性 (25℃で測定) が -2 以下である、上記の液晶組成物。
- [0049] 本発明は、次の項も含む。(c) 特開 2006-199941 号公報に記載された化合物 (5) から化合物 (7) は、誘電率異方性が正の液晶性化合物であるが、これらの化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する上記の組成物。(d) 上記の極性化合物を少なくとも 2 つ含有する上記の組成物。(e) 上記の極性化合物とは異なる極性化合物をさらに含有する上記の組成物。(f) 光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物のような添加物の 1 つ、2 つ、または少なくとも 3 つを含有する上記の組成物。この添加物は、第一添加物や第二添加物と同一であってもよく、または異なってもよい。(g) 上記の組成物を含有する AM 素子。(h) 上記の組成物を含有し、そして TN、ECB、OCB、IPS、FFS、VA、または FPA のモードを有する素子。(i) 上記の組成物を含有する透過型の素子。(j) 上記の組成物を、ネマチック相を有する組成物として使用すること。(k) 上記の組成物に光学活性化合物を添加することによって光学活性な組成物としての使用。
- [0050] 本発明の組成物を次の順で説明する。第一に、組成物の構成を説明する。第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物に及ぼす主要

な効果を説明する。第三に、組成物における成分の組み合わせ、成分の好ましい割合およびその根拠を説明する。第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。第五に、好ましい成分化合物を示す。第六に、組成物に添加してもよい添加物を説明する。第七に、成分化合物の合成法を説明する。最後に、組成物の用途を説明する。

[0051] 第一に、組成物の構成を説明する。本発明の組成物は組成物Aと組成物Bに分類される。組成物Aは、化合物(1)および化合物(2)から選択された液晶性化合物の他に、その他の液晶性化合物、添加物などをさらに含有してもよい。「その他の液晶性化合物」は、化合物(1)および化合物(2)とは異なる液晶性化合物である。このような化合物は、特性をさらに調整する目的で組成物に混合される。添加物は、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物などである。

[0052] 組成物Bは、実質的に化合物(1)および化合物(2)から選択された液晶性化合物のみからなる。「実質的に」は、組成物が添加物を含有してもよいが、その他の液晶性化合物を含有しないことを意味する。組成物Bは組成物Aに比較して成分の数が少ない。コストを下げるという観点から、組成物Bは組成物Aよりも好ましい。その他の液晶性化合物を混合することによって特性をさらに調整できるという観点から、組成物Aは組成物Bよりも好ましい。

[0053] 第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物の特性に及ぼす主要な効果を説明する。成分化合物の主要な特性を本発明の効果に基づいて表2にまとめる。表2の記号において、Lは大きいまたは高い、Mは中程度の、Sは小さいまたは低い、を意味する。記号L、M、Sは、成分化合物のあいだの定性的な比較に基づいた分類であり、記号0は、値がゼロであるか、またはゼロに近いことを意味する。

[0054]

表2. 液晶性化合物の特性

特性	化合物(1)	化合物(2)
上限温度	S~L	S~L
粘度	M~L	S~M
光学異方性	M~L	S~L
誘電率異方性	M~L ¹⁾	0
比抵抗	L	L

1) 負の誘電率異方性

[0055] 成分化合物を組成物に混合したとき、成分化合物が組成物の特性に及ぼす主要な効果は次のとおりである。化合物（１）は、誘電率異方性を上げる。化合物（２）は、上限温度を上げる、または粘度を下げる。化合物（３）および化合物（４）は、極性基の作用で基板表面に吸着し、液晶分子の配向を制御する。所期の効果を得るには、これらの化合物は、液晶性化合物との高い相溶性を有することが必須である。これらの化合物は、１，４－シクロヘキシレンや１，４－フェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状であるからこの目的に最適である。化合物（５）は、高分子支持配向型の素子に、さらに適合させる目的で組成物に添加される。化合物（３）、化合物（４）、および化合物（５）は、重合によって重合体を与える。この重合体は、液晶分子の配向を安定化するので、素子の応答時間を短縮し、そして画像の焼き付きを改善する。

[0056] 第三に、組成物における成分の組み合わせ、成分の好ましい割合およびその根拠を説明する。組成物における成分の好ましい組み合わせは、化合物（１）＋化合物（２）である。このような組成物に、極性化合物（またはこの重合体）および重合性化合物（またはこの重合体）を組み合わせることによって、液晶分子の垂直配向が達成される。「その他の液晶性化合物」は、少量であれば、このような組成物に添加しても、同様な効果が達成される。

[0057] 化合物（１）の好ましい割合は、誘電率異方性を上げるために約１０重量％以上であり、粘度を下げるために約９０重量％以下である。さらに好まし

い割合は、約 15 重量%から約 80 重量%の範囲である。特に好ましい割合は、約 20 重量%から約 70 重量%の範囲である。

[0058] 化合物 (2) の好ましい割合は、上限温度を上げるためにまたは粘度を下げるために約 10 重量%以上であり、誘電率異方性を上げるために約 70 重量%以下である。さらに好ましい割合は、約 10 重量%から約 65 重量%の範囲である。特に好ましい割合は、約 15 重量%から約 60 重量%の範囲である。

[0059] 化合物 (3) および化合物 (4) は、液晶分子の配向を制御する目的で、組成物に添加される。化合物 (3) または化合物 (4) の好ましい割合は、液晶分子を配向させるために約 0.05 重量%以上であり、素子の表示不良を防ぐために約 10 重量%以下である。さらに好ましい割合は、約 0.1 重量%から約 7 重量%の範囲である。特に好ましい割合は、約 0.5 重量%から約 5 重量%の範囲である。

[0060] 化合物 (5) は、高分子支持配向型の素子に適合させる目的で、組成物に添加される。化合物 (5) の好ましい割合は、素子の長期信頼性を向上させるために約 0.03 重量%以上であり、素子の表示不良を防ぐために約 10 重量%以下である。さらに好ましい割合は、約 0.1 重量%から約 2 重量%の範囲である。特に好ましい割合は、約 0.2 重量%から約 1.0 重量%の範囲である。

[0061] 第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。式 (1) および式 (2) において、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数 1 から 12 のアルキル、炭素数 1 から 12 のアルコキシ、炭素数 2 から 12 のアルケニル、少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 2 から 12 のアルケニル、または炭素数 2 から 12 のアルケニルオキシである。好ましい R^1 または R^2 は、紫外線や熱に対する安定性を上げるために炭素数 1 から 12 のアルキルであり、誘電率異方性を上げるために炭素数 1 から 12 のアルコキシである。

[0062] R^3 および R^4 は独立して、炭素数 1 から 12 のアルキル、炭素数 1 から 1

2のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルである。好ましいR³またはR⁴は、紫外線や熱に対する安定性を上げるために炭素数1から12のアルキルであり、下限温度を下げるために、または粘度を下げるために炭素数2から12のアルケニルである。

[0063] 好ましいアルキルは、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、またはオクチルである。さらに好ましいアルキルは、粘度を下げるためにエチル、プロピル、ブチル、ペンチル、またはヘプチルである。

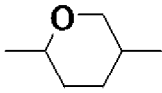
[0064] 好ましいアルコキシは、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、またはヘプチルオキシである。粘度を下げるために、さらに好ましいアルコキシは、メトキシまたはエトキシである。

[0065] 好ましいアルケニルは、ビニル、1-プロペニル、2-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、1-ヘキセニル、2-ヘキセニル、3-ヘキセニル、4-ヘキセニル、または5-ヘキセニルである。さらに好ましいアルケニルは、粘度を下げるためにビニル、1-プロペニル、3-ブテニル、または3-ペンテニルである。これらのアルケニルにおける-CH=CH-の好ましい立体配置は、二重結合の位置に依存する。粘度を下げるためなどから1-プロペニル、1-ブテニル、1-ペンテニル、1-ヘキセニル、3-ペンテニル、3-ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはトランスが好ましい。2-ブテニル、2-ペンテニル、2-ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはシスが好ましい。

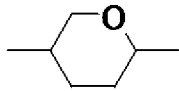
[0066] 好ましいアルケニルオキシは、ビニルオキシ、アリルオキシ、3-ブテニルオキシ、3-ペンテニルオキシ、または4-ペンテニルオキシである。粘度を下げるために、さらに好ましいアルケニルオキシは、アリルオキシまたは3-ブテニルオキシである。

- [0067] 少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたアルキルの好ましい例は、フルオロメチル、2-フルオロエチル、3-フルオロプロピル、4-フルオロブチル、5-フルオロペンチル、6-フルオロヘキシル、7-フルオロヘプチル、または8-フルオロオクチルである。さらに好ましい例は、誘電率異方性を上げるために2-フルオロエチル、3-フルオロプロピル、4-フルオロブチル、または5-フルオロペンチルである。
- [0068] 少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたアルケニルの好ましい例は、2, 2-ジフルオロビニル、3, 3-ジフルオロ-2-プロペニル、4, 4-ジフルオロ-3-ブテニル、5, 5-ジフルオロ-4-ペンテニル、または6, 6-ジフルオロ-5-ヘキセニルである。さらに好ましい例は、粘度を下げるために2, 2-ジフルオロビニルまたは4, 4-ジフルオロ-3-ブテニルである。
- [0069] 環Aおよび環Cは独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたナフタレン-2, 6-ジイル、クロマン-2, 6-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたクロマン-2, 6-ジイルである。好ましい環Aまたは環Cは、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、3, 4, 5-トリフルオロナフタレン-2, 6-ジイル、または7, 8-ジフルオロクロマン-2, 6-ジイルである。さらに好ましい環Aまたは環Cは、1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンである。これらの環において、好ましい環Aまたは環Cは、粘度を下げるために1, 4-シクロヘキシレンであり、誘電率異方性を上げるためにテトラヒドロピラン-2, 5-ジイルであり、光学異方性を上げるために1, 4-フェニレンである。テトラヒドロピラン-2, 5-

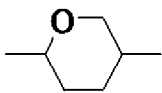
ジイルは、



または



であり、好ましくは



である。

[0070] 環Bは、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2-クロロ-3-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-5-メチル-1,4-フェニレン、3,4,5-トリフルオロナフタレン-2,6-ジイル、または7,8-ジフルオロクロマン-2,6-ジイルである。好ましい環Bは、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2-クロロ-3-フルオロ-1,4-フェニレン、または7,8-ジフルオロクロマン-2,6-ジイルである。さらに好ましい環Bは、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレンまたは2-クロロ-3-フルオロ-1,4-フェニレンである。特に好ましい環Bは、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレンである。これらの環において、好ましい環Bは、粘度を下げるために2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり、光学異方性を下げるために2-クロロ-3-フルオロ-1,4-フェニレンであり、誘電率異方性を上げるために7,8-ジフルオロクロマン-2,6-ジイルである。

[0071] 環Dおよび環Eは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンである。好ましい環Dまたは環Eは粘度を下げるために、または上限温度を上げるために、1,4-シクロヘキシレンであり、下限温

度を下げるために1, 4-フェニレンである。

[0072] Z^1 および Z^2 は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ である。好ましい Z^1 または Z^2 は、粘度を下げるために単結合であり、下限温度を下げるために $-CH_2CH_2-$ であり、誘電率異方性を上げるために $-CH_2O-$ または $-OCH_2-$ である。 Z^3 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ である。好ましい Z^3 は、粘度を下げるために単結合であり、下限温度を下げるために $-CH_2CH_2-$ であり、上限温度を上げるために $-COO-$ または $-OCO-$ である。

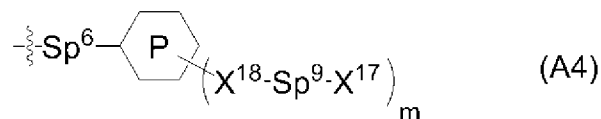
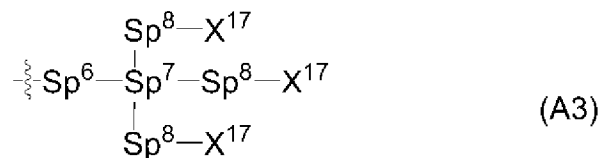
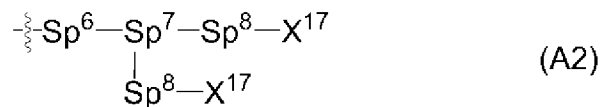
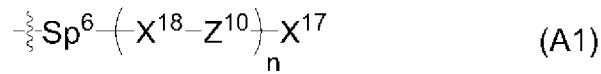
[0073] aは、1、2、または3であり、bは、0または1であり、そして、aとbとの和は3以下である。好ましいaは粘度を下げるために1であり、上限温度を上げるために2または3である。好ましいbは粘度を下げるために0であり、下限温度を下げるために1である。cは、1、2、または3である。好ましいcは粘度を下げるために1であり、上限温度を上げるために2または3である。

[0074] 式(3)において、 R^8 は、極性基である。式(4)において、 R^{10} は、極性基である。化合物(3)または化合物(4)は、紫外線や熱に対して安定であることが好ましい。化合物(3)または化合物(4)を組成物に添加したとき、この化合物が素子の電圧保持率を下げないことが好ましい。化合物(3)または化合物(4)は、低い揮発性を有することが好ましい。好ましいモル質量は130 g/mol以上である。さらに好ましいモル質量は150 g/molから500 g/molの範囲である。好ましい化合物(3)または化合物(4)は、アクリロイルオキシ($-OCO-CH=CH_2$)、メタクリロイルオキシ($-OCO-(CH_3)C=CH_2$)のような重合性基を有する。

[0075] 極性基は、ガラス基板または金属酸化物膜の表面との非共有結合的な相互作用を有する。好ましい極性基は、窒素、酸素、硫黄、およびリンの群から選択されたヘテロ原子を有する。好ましい極性基は、これらのヘテロ原子を

少なくとも1つ、または少なくとも2つを有する。さらに好ましい極性基は、アルコール、第一級、第二級、および第三級のアミン、ケトン、カルボン酸、チオール、エステル、エーテル、チオエーテル、およびそれらの組み合わせの群から選択された化合物から水素を除くことによって誘導された一価基である。これらの基の構造は、直鎖状、分岐状、環状、またはそれらの組み合わせでもよい。特に好ましい極性基は、OH構造の酸素原子の少なくとも1つ、または第一級、第二級、または第三級のアミン構造の窒素原子の少なくとも1つを有する。最も好ましい極性基はヒドロキシ基（炭素-OH）である。

[0076] 極性基R⁸の例は、式(A1)から式(A4)で表される基である。

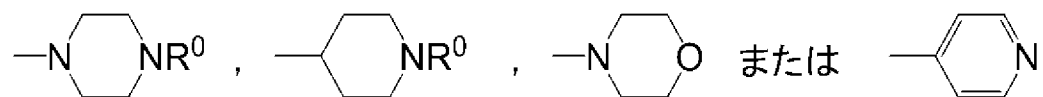


[0077] 式(A1)から式(A4)において、Sp⁶、Sp⁸、およびSp⁹は独立して、単結合または炭素数1から12のアルキレンであり、このアルキレンにおいて少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-S-、-NH-、-N(R⁰)-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-O-CO-O-、-S-CO-、-CO-S-、-N(R⁰)-CO-O-、-O-CO-N(R⁰)-、-N(R⁰)-CO-N(R⁰)-、-CH=CH-、または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フ

ッ素または塩素で置き換えられてもよく、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルである。S p⁷は、>CH-、>CR⁰-、>N-、または>C<であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルである。すなわち、式(A2)におけるS p⁷は、>CH-、>CR⁰-、または>N-であり、式(A3)におけるS p⁷は>C<であることを意味する。

[0078] 好ましいS p⁶、S p⁸、またはS p⁹は、単結合、-(CH₂)_{p1}-、-(CH₂)_{p1}-O-、-(CH₂CH₂O)_{q1}-CH₂CH₂-、-(CH₂)_{p1}-O-CO-、-(CH₂)_{p1}-O-CO-O-、-CH₂CH₂-S-CH₂CH₂-、または-CH₂CH₂-NHCH₂CH₂-であり、ここでp1は1から12の整数であり、q1は1から3の整数である。さらに好ましいS p⁶、S p⁸、またはS p⁹は、エチレン、プロピレン、ブチレン、ペンチレン、ヘキシレン、ヘプチレン、オクチレン、ノニレン、デシレン、ウンデシレン、ドデシレン、オクタデシレン、エチレンオキシエチレン、メチレンオキシブチレン、エチレンチオエチレン、エチレン-N-メチルイミノエチレン、1-メチルアルキレン、エテニレン、プロペニレン、およびブテニレンである。

[0079] 式(A1)から式(A4)において、X¹⁷は、-OH、-OR⁰、-COOH、-NH₂、-NHR⁰、-N(R⁰)₂、-SH、-SR⁰、



であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルである。

[0080] 式(A1)において、X¹⁸は、-O-、-CO-、-NH-、-NR⁰-、-S-、または単結合であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルである。Z¹⁰は、単結合または炭素数1から15のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-C≡C-、-CH=CH-、-COO-、-OCO-、-CO-、または-O-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。環Pは、炭素数6から25のアリール

であり、この基において、1つから3つの水素は $-OH$ 、 $-(CH_2)_q-OH$ 、フッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルで置き換えられてもよく、ここで q は、1、2、3、または4である。 n は、0、1、2、または3であり、 m は、1、2、3、4、または5である。

[0081] アリールは、芳香族炭化水素から1つの水素を除くことによって誘導される一価基であり、ヘテロ原子を含まない。アリールは単環または多環のいずれでもよい。すなわち、アリールは少なくとも1つの環を有し、この環は縮合（例えば、ナフチル）されてもよく、2つの環は共有結合で連結（例えば、ビフェニル）されてもよい。アリールは縮合環および連結環の組み合わせを有してもよい。アリールは置換されていてもよい。置換基の例は、 $-OH$ 、 $-(CH_2)_q-OH$ 、フッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり、ここで q は、1、2、3、または4である。

[0082] 好ましいアリールは、ベンゼン、ビフェニル、ターフェニル、[1, 1' : 3', 1"]ターフェニル、ナフタレン、アントラセン、ビナフチル、フェナントレン、ピレン、ジヒドロピレン、クリセン、ペリレン、テトラセン、ペンタセン、ベンゾピレン、フルオレン、インデン、インデノフルオレン、スピロビフルオレンから1つの水素を除くことによって誘導される一価基である。

[0083] 式(3)において、 R^8 は、 OH 構造の酸素原子、 SH 構造の硫黄原子、および第一級、第二級、または第三級のアミン構造の窒素原子の少なくとも1つを有する極性基である。好ましい R^8 は、 $-OH$ 、 $-(CH_2)_n-OH$ 、 $-O-(CH_2)_n-OH$ 、 $-[O-(CH_2)_{n_1}]_{n_2}-OH$ 、 $-COOH$ 、 $-(CH_2)_n-COOH$ 、 $-O-(CH_2)_n-COOH$ 、または $-[O-(CH_2)_{n_1}]_{n_2}-COOH$ である。ここで n 、 n_1 、および n_2 は独立して、1から12の整数であり、好ましくは1、2、3、または4である。

[0084] 好ましい R^8 は、 $-NH_2$ 、 $-NH-(CH_2)_{n_3}H$ 、 $-(CH_2)_n-NH_2$

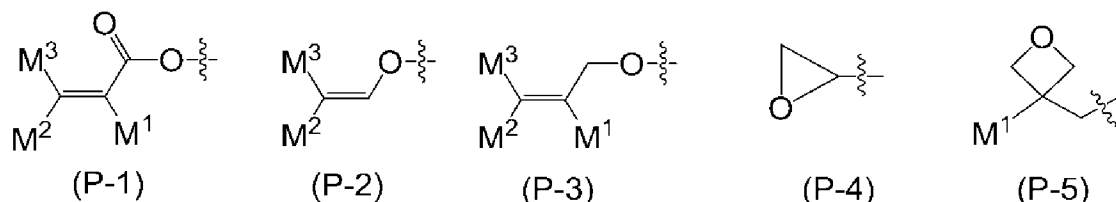
、 $-(\text{CH}_2)_n-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_3}\text{H}$ 、 $-\text{NH}-(\text{CH}_2)_n-\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}-(\text{CH}_2)_n-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_3}\text{H}$ 、 $-(\text{CH}_2)_{n_1}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_2}-\text{NH}_2$ 、 $-(\text{CH}_2)_{n_1}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_2}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_3}\text{H}$ 、 $-\text{O}-(\text{CH}_2)_n-\text{NH}_2$ 、 $-(\text{CH}_2)_{n_1}-\text{O}-(\text{CH}_2)_n-\text{NH}_2$ 、 $-(\text{CH}_2)_{n_1}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_2}-\text{OH}$ 、 $-\text{O}-(\text{CH}_2)_{n_1}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_2}-\text{NH}_2$ 、 $-\text{O}-(\text{CH}_2)_{n_1}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_2}-\text{OH}$ 、または $-(\text{CH}_2)_{n_1}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_2}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{n_3}\text{H}$ でもある。ここで n 、 n_1 、 n_2 、および n_3 は独立して、1から12の整数であり、好ましくは1、2、3、または4である。

[0085] 液晶組成物への高い溶解度の観点から、 R^8 は $-\text{OH}$ または $-\text{NH}_2$ であることが特に好ましい。 $-\text{OH}$ は、高いアンカー力を有するので $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{COO}-$ よりも好ましい。複数のヘテロ原子（窒素、酸素）を有する基は、特に好ましい。そのような極性基を有する化合物は、低い濃度であっても有効である。

[0086] 式(3)において、 R^7 は、水素、フッ素、塩素、または炭素数1から25のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{NR}^0-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{CO}-\text{O}-$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$ 、または炭素数3から8のシクロアルキレンで置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの第三級炭素($>\text{CH}-$)は、窒素($>\text{N}-$)で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、ここで R^0 は、水素または炭素数1から12のアルキルである。好ましい R^7 は、炭素数1から25のアルキルである。

[0087] 式(3)において、 P^1 、 P^2 、および P^3 は独立して、重合性基である。好ましい P^1 、 P^2 、または P^3 は、式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基の群から選択された基である。さらに好ましい P^1 、 P^2 、または P^3 は、式(P-1)、式(P-2)、または式(P-3)で表される基である。特に好ましい P^1 、 P^2 、または P^3 は、式(P-1)または式(P-2)で表

される基である。最も好ましいP¹、P²、またはP³は、式(P-1)で表される基である。式(P-1)で表される好ましい基は、 $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{C}\text{H}_2$ または $-\text{OCO}-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}_2$ である。式(P-1)から式(P-5)の波線は、結合する部位を示す。



[0088] 式(P-1)から式(P-5)において、M¹、M²、およびM³は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。好ましいM¹、M²、またはM³は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましいM¹は水素またはメチルであり、さらに好ましいM²またはM³は水素である。

[0089] 式(3)において、S p¹、S p²、およびS p³は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましいS p¹、S p²、またはS p³は、単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CO}-\text{CH}=\text{CH}-$ 、または $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CO}-$ である。さらに好ましいS p¹、S p²、またはS p³は、単結合である。ただし、環Jおよび環Lがフェニルであるとき、S p¹およびS p³は単結合である。

[0090] 式(3)において、環J、環K、および環Lは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-

ジイル、ナフタレン-1, 5-ジイル、ナフタレン-1, 6-ジイル、ナフタレン-1, 7-ジイル、ナフタレン-1, 8-ジイル、ナフタレン-2, 3-ジイル、ナフタレン-2, 6-ジイル、ナフタレン-2, 7-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、またはピリジン-2, 5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよい。好ましい環J、環K、または環Lは、1, 4-フェニレンまたは2-フルオロ-1, 4-フェニレンである。

[0091] 式(3)において、 Z^7 および Z^8 は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ 、 $-C(CH_3)=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)-$ 、または $-C(CH_3)=C(CH_3)-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい Z^7 または Z^8 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ である。さらに好ましい Z^7 または Z^8 は、単結合である。

[0092] 式(3)において、 g および h は独立して、0、1、2、3、または4であり、そして g および h の和は、0、1、2、3、または4である。好ましい g または h は、0、1、または2である。 k および p は独立して、0、1、2、3、または4である。好ましい k または p は、1または2である。 o は、1、2、3、または4である。好ましい o は、1または2である。

[0093] 式(3-1)から式(3-15)において、 Sp^{10} は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH$

=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。L¹、L²、L³、およびL⁴は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルである。R¹¹およびR¹²は独立して、水素またはメチルである。

[0094] 式(4)において、R¹⁰は、-OH、-OR⁰、-NH₂、-NHR⁰または-N(R⁰)₂で表される基であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルである。液晶組成物への高い溶解度の観点から、R²は-OHまたは-NH₂であることが特に好ましい。-OHは、高いアンカー力を有するので-O-、-CO-、または-COO-よりも好ましい。複数のヘテロ原子(窒素、酸素)を有する基は、特に好ましい。そのような極性基を有する化合物は、低い濃度であっても有効である。

[0095] 式(4)において、R⁹は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルである。好ましいR⁹は、炭素数1から12のアルキルである。

[0096] 式(4)において、環Mおよび環Nは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、またはアントラセン-2,6-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、また

は少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよい。好ましい環Mまたは環Nは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、または2-フルオロ-1,4-フェニレンである。

[0097] 式(4)において、 Z^9 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ である。好ましい Z^9 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ である。さらに好ましい Z^9 は、単結合である。

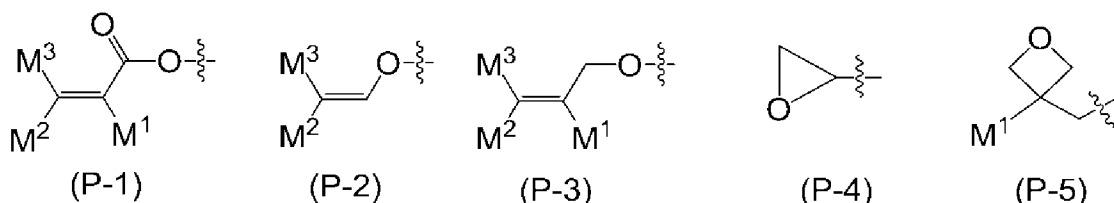
[0098] 式(4)において、 Sp^4 および Sp^5 は独立して、単結合または炭素数1から7のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。好ましい Sp^4 または Sp^5 は、単結合である。

[0099] 式(4)において、 j は、0、1、2、3、または4である。好ましい j は、0、1、または2である。

[0100] 式(4-1)から式(4-9)において、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、 L^{10} 、 L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、 L^{14} 、 L^{15} 、および L^{16} は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルである。好ましい L^5 から L^{16} は、水素またはフッ素である。

[0101] 式(5)において、 P^4 、 P^5 、および P^6 は独立して、重合性基である。好ましい P^4 、 P^5 、または P^6 は、式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基の群から選択された基である。さらに好ましい P^4 、 P^5 、または P^6 は、式(P-1)、式(P-2)、または式(P-3)で表される基である。特に好ましい P^4 、 P^5 、または P^6 は、式(P-1)または式(P-2)で表される基である。最も好ましい P^4 、 P^5 、または P^6 は、式(P-1)で表される基である。式(P-1)で表される好ましい基は、 $-OCO-CH=C$

H₂または-OCO-C(CH₃)=CH₂である。式(P-1)から式(P-5)の波線は、結合する部位を示す。



[0102] 式(P-1)から式(P-5)において、M¹、M²、およびM³は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。好ましいM¹、M²、またはM³は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましいM¹は水素またはメチルであり、さらに好ましいM²またはM³は水素である。

[0103] 式(5)において、S p¹⁰、S p¹¹、およびS p¹²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンである。このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-COO-、-OCO-、または-OCO O-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましいS p¹⁰、S p¹¹、またはS p¹²は、単結合、-CH₂CH₂-、-CH₂O-、-OCH₂-、-COO-、-OCO-、-CO-CH=CH-、または-CH=CH-CO-である。さらに好ましいS p¹⁰、S p¹¹、またはS p¹²は、単結合である。

[0104] 式(5)において、環Tおよび環Vは独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1,3-ジオキサソ-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた

炭素数 1 から 12 のアルキルで置き換えられてもよい。好ましい環 T または環 V は、フェニルである。環 U は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-1, 2-ジイル、ナフタレン-1, 3-ジイル、ナフタレン-1, 4-ジイル、ナフタレン-1, 5-ジイル、ナフタレン-1, 6-ジイル、ナフタレン-1, 7-ジイル、ナフタレン-1, 8-ジイル、ナフタレン-2, 3-ジイル、ナフタレン-2, 6-ジイル、ナフタレン-2, 7-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、またはピリジン-2, 5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素、塩素、炭素数 1 から 12 のアルキル、炭素数 1 から 12 のアルコキシ、または少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 1 から 12 のアルキルで置き換えられてもよい。好ましい環 U は、1, 4-フェニレンまたは 2-フルオロ-1, 4-フェニレンである。

[0105] 式 (5) において、 Z^{11} および Z^{12} は独立して、単結合または炭素数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも 1 つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ 、 $-C(CH_3)=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)-$ 、または $-C(CH_3)=C(CH_3)-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい Z^{11} または Z^{12} は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ である。さらに好ましい Z^{11} または Z^{12} は、単結合である。

[0106] 式 (5) において、 t は、0、1、または 2 である。好ましい t は、0 または 1 である。 u 、 v 、および w は独立して、0、1、2、3、または 4 であり、そして u 、 v 、および w の和は、3 以上である。

[0107] 第五に、好ましい成分化合物を示す。好ましい化合物 (1) は、項 3 に記

載の化合物（１－１）から化合物（１－２２）である。これらの化合物において、第一成分の少なくとも１つが、化合物（１－１）、化合物（１－３）、化合物（１－４）、化合物（１－６）、化合物（１－８）、または化合物（１－１０）であることが好ましい。第一成分の少なくとも２つが、化合物（１－１）および化合物（１－６）、化合物（１－１）および化合物（１－１０）、化合物（１－３）および化合物（１－６）、化合物（１－３）および化合物（１－１０）、化合物（１－４）および化合物（１－６）、または化合物（１－４）および化合物（１－８）の組み合わせであることが好ましい。

[0108] 好ましい化合物（２）は、項６に記載の化合物（２－１）から化合物（２－１３）である。これらの化合物において、第二成分の少なくとも１つが、化合物（２－１）、化合物（２－３）、化合物（２－５）、化合物（２－６）、化合物（２－８）、または化合物（２－９）であることが好ましい。第二成分の少なくとも２つが化合物（２－１）および化合物（２－３）、化合物（２－１）および化合物（２－５）、または化合物（２－１）および化合物（２－６）の組み合わせであることが好ましい。

[0109] 好ましい化合物（３）は、項１２に記載の化合物（３－１）から化合物（３－１５）である。これらの化合物において、第一添加物の少なくとも１つが、化合物（３－６）、化合物（３－８）、化合物（３－１０）、化合物（３－１１）、化合物（３－１３）、または化合物（３－１５）であることが好ましい。第一添加物の少なくとも２つが、化合物（３－１）および化合物（３－１１）、または化合物（３－３）および化合物（３－８）の組み合わせであることが好ましい。

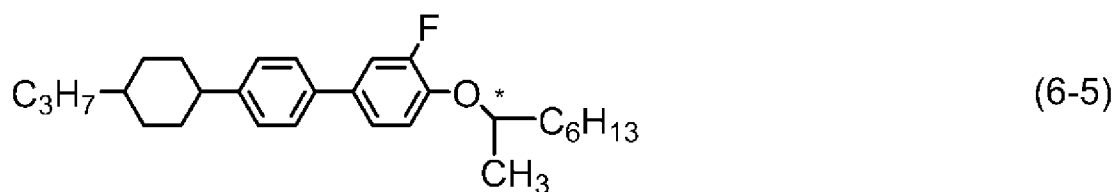
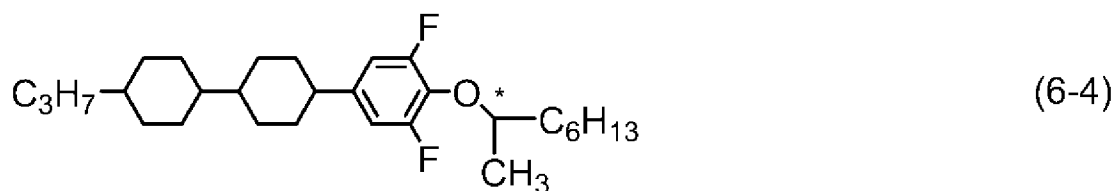
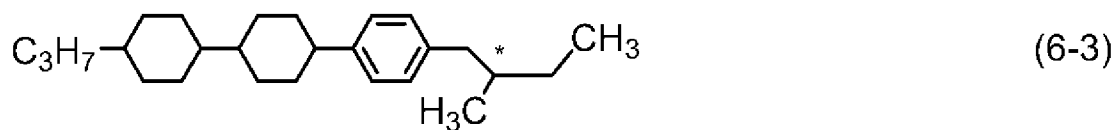
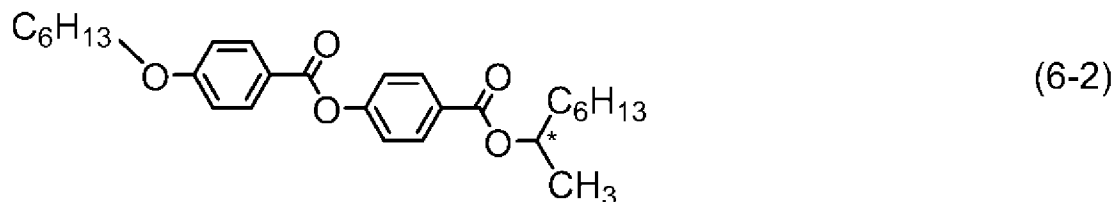
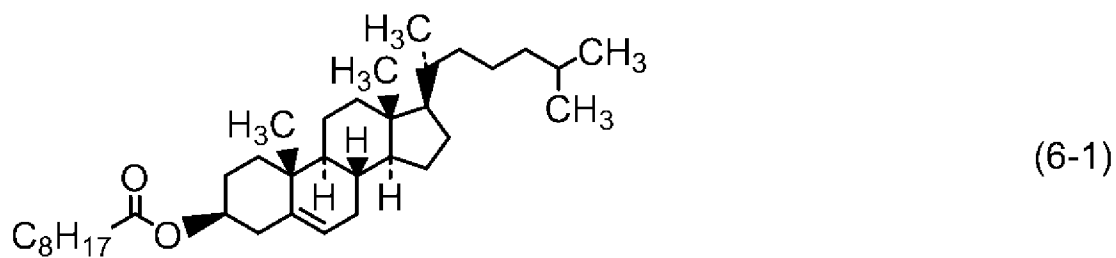
[0110] 好ましい化合物（４）は、項１３に記載の化合物（４－１）から化合物（４－９）である。これらの化合物において、第一添加物の少なくとも１つが、化合物（４－１）、化合物（４－２）、化合物（４－３）、化合物（４－５）、または化合物（４－６）であることが好ましい。第一添加物の少なくとも２つが、化合物（４－１）および化合物（４－２）、または化合物（４

－ 1) および化合物 (4-4) の組み合わせであることが好ましい。

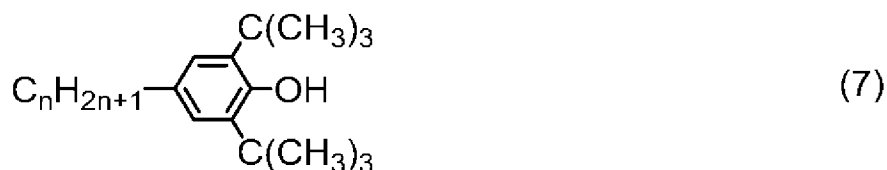
[0111] 好ましい化合物 (5) は、項 17 に記載の化合物 (5-1) から化合物 (5-7) である。これらの化合物において、第二添加物の少なくとも 1 つが、化合物 (5-2)、化合物 (5-5)、または化合物 (5-7) であることが好ましい。第二添加物の少なくとも 2 つが、化合物 (5-1) および化合物 (5-2)、化合物 (5-2) および化合物 (5-5)、または化合物 (5-2) および化合物 (5-7) の組み合わせであることが好ましい。

[0112] 第六に、組成物に添加してもよい添加物を説明する。このような添加物は、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物などである。液晶分子のらせん構造を誘起してねじれ角を与える目的で光学活性化合物が組成物に添加される。このような化合物の例は、化合物 (6-1) から化合物 (6-5) である。光学活性化合物の好ましい割合は約 5 重量%以下である。さらに好ましい割合は約 0.01 重量%から約 2 重量%の範囲である。

[0113]



[0114] 大気中での加熱による比抵抗の低下を防止するために、または素子を長時間使用したあと、室温だけではなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を維持するために、酸化防止剤が組成物に添加される。酸化防止剤の好ましい例は、 n が1から9の整数である化合物(7)などである。



[0115] 化合物(7)において、好ましい n は、1、3、5、7、または9である

。さらに好ましい n は7である。 n が7である化合物(7)は、揮発性が小さいので、素子を長時間使用したあと、室温だけではなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を維持するのに有効である。酸化防止剤の好ましい割合は、その効果を得るために約50 ppm以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないように約600 ppm以下である。さらに好ましい割合は、約100 ppmから約300 ppmの範囲である。

[0116] 紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。立体障害のあるアミンのような光安定剤もまた好ましい。これらの吸収剤や安定剤における好ましい割合は、その効果を得るために約50 ppm以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないために約10000 ppm以下である。さらに好ましい割合は約100 ppmから約10000 ppmの範囲である。

[0117] GH (guest host) モードの素子に適合させるために、アゾ系色素、アントラキノン系色素などのような二色性色素 (dichroic dye) が組成物に添加される。色素の好ましい割合は、約0.01重量%から約10重量%の範囲である。泡立ちを防ぐために、ジメチルシリコンオイル、メチルフェニルシリコンオイルなどの消泡剤が組成物に添加される。消泡剤の好ましい割合は、その効果を得るために約1 ppm以上であり、表示不良を防ぐために約1000 ppm以下である。さらに好ましい割合は、約1 ppmから約500 ppmの範囲である。

[0118] 高分子支持配向 (PSA) 型の素子に適合させるために重合性化合物が用いられる。化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)はこの目的に適している。化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)と共に、化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)とは異なる重合性化合物を組成物に添加してもよい。そのような重合性化合物の好ましい例は、アクリレート、メタクリレート、ビニル化合物、ビニルオキシ化合物、プロペニルエーテル、エポキシ化合物 (オキシラン、オキセタン)、ビニルケトンなど化合物である。さらに好ましい例は、アクリレートまたはメタクリレートで

ある。化合物（３）、化合物（４）、および化合物（５）の好ましい割合は、重合性化合物の全重量に基づいて約１０重量%以上である。さらに好ましい割合は、約５０重量%以上である。特に好ましい割合は、約８０重量%以上である。特に好ましい割合は、１００重量%でもある。化合物（３）、化合物（４）、および化合物（５）の種類を変えることによって、または化合物（３）、化合物（４）、および化合物（５）にその他の重合性化合物を適切な比で組み合わせることによって、重合性化合物の反応性や液晶分子のプレチルト角を調整することができる。プレチルト角を最適化することによって、素子の短い応答時間を達成することができる。液晶分子の配向が安定化されるので、大きなコントラスト比や長い寿命を達成することができる。

[0119] 重合性化合物は紫外線照射によって重合する。光重合開始剤などの適切な開始剤存在下で重合させてもよい。重合のための適切な条件、開始剤の適切なタイプ、および適切な量は、当業者には既知であり、文献に記載されている。例えば光開始剤である I r g a c u r e 6 5 1（登録商標；BASF）、I r g a c u r e 1 8 4（登録商標；BASF）、またはD a r o c u r 1 1 7 3（登録商標；BASF）がラジカル重合に対して適切である。光重合開始剤の好ましい割合は、重合性化合物の全重量に基づいて約0.1重量%から約5重量%の範囲である。さらに好ましい割合は約1重量%から約3重量%の範囲である。

[0120] 重合性化合物を保管するとき、重合を防止するために重合禁止剤を添加してもよい。重合性化合物は、通常は重合禁止剤を除去しないまま組成物に添加される。重合禁止剤の例は、ヒドロキノン、メチルヒドロキノンのようなヒドロキノン誘導体、4-tert-ブチルカテコール、4-メトキシフェノール、フェノチアジンなどである。

[0121] 極性化合物は、極性をもつ有機化合物である。ここでは、イオン結合を有する化合物は含まれない。酸素、硫黄、および窒素のような原子は、より電気的に陰性であり、部分的な負電荷をもつ傾向にある。炭素および水素は中性であるか、または部分的な正電荷をもつ傾向がある。極性は、化合物中の

別種の原子間で部分電荷が均等に分布しないことから生じる。例えば、極性化合物は、 $-OH$ 、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-NH_2$ 、 $>NH$ 、 $>N-$ のような部分構造の少なくとも1つを有する。

[0122] 第七に、成分化合物の合成法を説明する。これらの化合物は既知の方法によって合成できる。合成法を例示する。化合物(1-1)は、特表平2-503441号公報に記載された方法で合成する。化合物(2-1)は、特開昭59-176221号公報に記載された方法で合成する。化合物(3-1)および化合物(4-1)の合成法は、実施例の項に記載する。化合物(5-1)は国際公開2013-161576号公報に記載された方法で合成する。化合物(7)の一部は市販されている。式(7)の n が1である化合物は、アルドリッチ (Sigma-Aldrich Corporation) から入手できる。 n が7である化合物(7)などは、米国特許3660505号明細書に記載された方法によって合成する。

[0123] 合成法を記載しなかった化合物は、オーガニック・シンセシス (Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc.)、オーガニック・リアクションズ (Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc.)、コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス (Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press)、新実験化学講座 (丸善) などの成書に記載された方法によって合成できる。組成物は、このようにして得た化合物から公知の方法によって調製される。例えば、成分化合物を混合し、そして加熱によって互いに溶解させる。

[0124] 最後に、組成物の用途を説明する。大部分の組成物は、約 $-10^{\circ}C$ 以下の下限温度、約 $70^{\circ}C$ 以上の上限温度、そして約0.07から約0.20の範囲の光学異方性を有する。成分化合物の割合を制御することによって、またはその他の液晶性化合物を混合することによって、約0.08から約0.25の範囲の光学異方性を有する組成物を調製してもよい。さらには、試行錯誤によって約0.10から約0.30の範囲の光学異方性を有する組成物を調製してもよい。この組成物を含有する素子は大きな電圧保持率を有する。この組成物はAM素子に適する。この組成物は透過型のAM素子に特に適す

る。この組成物は、ネマチック相を有する組成物としての使用、光学活性化化合物を添加することによって光学活性な組成物としての使用が可能である。

[0125] この組成物はAM素子への使用が可能である。さらにPM素子への使用も可能である。この組成物は、PC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、FFS、VA、FPAなどのモードを有するAM素子およびPM素子への使用が可能である。TN、OCB、IPS、FFSなどのモードを有するAM素子への使用は特に好ましい。IPSモードまたはFFSモードを有するAM素子において、電圧が無印加のとき、液晶分子の配向がガラス基板に対して並行であってもよく、または垂直であってもよい。これらの素子が反射型、透過型、または半透過型であってもよい。透過型の素子への使用は好ましい。非結晶シリコン-TFT素子または多結晶シリコン-TFT素子への使用も可能である。この組成物をマイクロカプセル化して作製したNCA P (nematic curvilinear aligned phase) 型の素子や、組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたPD (polymer dispersed) 型の素子にも使用できる。

[0126] 従来高分子支持配向型の素子を製造する方法の一例は、次のとおりである。アレイ基板とカラーフィルター基板と呼ばれる2つの基板を有する素子を組み立てる。この基板は配向膜を有する。この基板の少なくとも1つは、電極層を有する。液晶性化合物を混合して液晶組成物を調製する。この組成物に重合性化合物を添加する。必要に応じて添加物をさらに添加してもよい。この組成物を素子に注入する。この素子に電圧を印加した状態で光照射する。紫外線が好ましい。光照射によって重合性化合物を重合させる。この重合によって、重合体を含有する組成物が生成する。高分子支持配向型の素子は、このような手順で製造する。

[0127] この手順において、電圧を印加したとき、液晶分子が配向膜および電場の作用によって配向する。この配向に従って重合性化合物の分子も配向する。この状態で重合性化合物が紫外線によって重合するので、この配向を維持した重合体が生成する。この重合体の効果によって、素子の応答時間が短縮さ

れる。画像の焼き付きは、液晶分子の動作不良であるから、この重合体の効果によって焼き付きも同時に改善されることになる。なお、組成物中の重合性化合物を予め重合させ、この組成物を液晶表示素子の基板のあいだに配置することも可能であろう。

[0128] 化合物（3）および化合物（4）のような重合性基を有する極性化合物を重合性化合物として用いる場合は、素子の基板に配向膜は不要である。配向膜を有しない素子は、2つ前の段落に記載した手順に従って、配向膜を有しない基板から製造する。

[0129] この手順において、化合物（3）または化合物（4）は、極性基が基板表面と相互作用するので、基板上に配列する。この配列に従って液晶分子が配向される。電圧を印加したとき、液晶分子の配向がさらに促進される。この状態で重合性基が紫外線によって重合するので、この配向を維持した重合体が生成する。この重合体の効果によって、液晶分子の配向が追加的に安定化し、素子の応答時間が短縮される。画像の焼き付きは、液晶分子の動作不良であるから、この重合体の効果によって焼き付きも同時に改善されることになる。

実施例

[0130] 実施例によって本発明をさらに詳しく説明する。本発明はこれらの実施例によっては制限されない。本発明は、組成物M1と組成物M2との混合物を含む。本発明は、実施例の組成物の少なくとも2つを混合した混合物をも含む。合成した化合物は、NMR分析などの方法によって同定した。化合物、組成物および素子の特性は、下記の方法によって測定した。

[0131] NMR分析：測定には、ブルカーバイオスピン社製のDRX-500を用いた。¹H-NMRの測定では、試料をCDCl₃などの重水素化溶媒に溶解させ、測定は、室温で、500MHz、積算回数16回の条件で行った。テトラメチルシランを内部標準として用いた。¹⁹F-NMRの測定では、CFCl₃を内部標準として用い、積算回数24回で行った。核磁気共鳴スペクトルの説明において、sはシングレット、dはダブルット、tはトリプレット

、*q*はカルテット、*quin*はクインテット、*sex*はセクステット、*m*はマルチプレット、*br*はブロードであることを意味する。

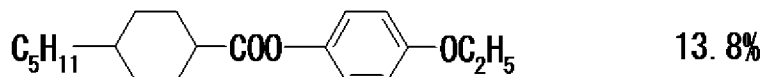
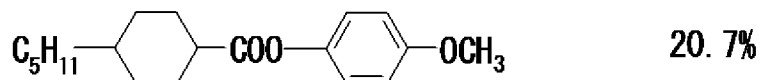
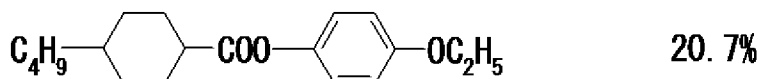
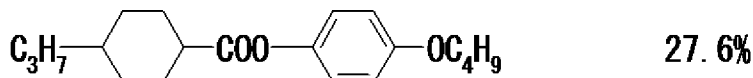
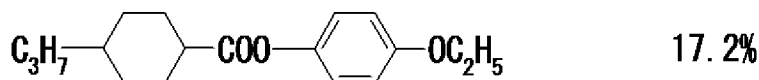
[0132] ガスクロマト分析：測定には島津製作所製のGC-14B型ガスクロマトグラフを用いた。キャリアーガスはヘリウム（2 mL/分）である。試料気化室を280℃に、検出器（FID）を300℃に設定した。成分化合物の分離には、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムDB-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm；固定液相はジメチルポリシロキサン；無極性）を用いた。このカラムは、200℃で2分間保持したあと、5℃/分の割合で280℃まで昇温した。試料はアセトン溶液（0.1重量%）に調製したあと、その1 μLを試料気化室に注入した。記録計は島津製作所製のC-R5A型Chromatopac、またはその同等品である。得られたガスクロマトグラムは、成分化合物に対応するピークの保持時間およびピークの面積を示した。

[0133] 試料を希釈するための溶媒は、クロロホルム、ヘキサンなどを用いてもよい。成分化合物を分離するために、次のキャピラリカラムを用いてもよい。Agilent Technologies Inc.製のHP-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm）、Restek Corporation製のRtx-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm）、SGE International Pty. Ltd製のBP-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm）。化合物ピークの重なりを防ぐ目的で島津製作所製のキャピラリカラムCBP1-M50-025（長さ50 m、内径0.25 mm、膜厚0.25 μm）を用いてもよい。

[0134] 組成物に含有される液晶性化合物の割合は、次のような方法で算出してよい。液晶性化合物の混合物をガスクロマトグラフィ（FID）で分析する。ガスクロマトグラムにおけるピークの面積比は液晶性化合物の割合に相当する。上に記載したキャピラリカラムを用いたときは、各々の液晶性化合物の補正係数を1とみなしてよい。したがって、液晶性化合物の割合（重量%）は、ピークの面積比から算出することができる。

[0135] 測定試料：組成物および素子の特性を測定するときは、組成物をそのまま試料として用いた。化合物の特性を測定するときは、この化合物（15重量%）を母液晶（85重量%）に混合することによって測定用の試料を調製した。測定によって得られた値から外挿法によって化合物の特性値を算出した。（外挿値）＝{（試料の測定値）－0.85×（母液晶の測定値）}／0.15。この割合でスメクチック相（または結晶）が25℃で析出するときは、化合物と母液晶の割合を10重量%：90重量%、5重量%：95重量%、1重量%：99重量%の順に変更した。この外挿法によって化合物に関する上限温度、光学異方性、粘度、および誘電率異方性の値を求めた。

[0136] 下記の母液晶を用いた。成分化合物の割合は重量%で示した。



[0137] 測定方法：特性の測定は下記の方法で行った。これらの多くは、社団法人電子情報技術産業協会（Japan Electronics and Information Technology Industries Association；JEITAという）で審議制定されるJEITA規格（JEITA・ED-2521B）に記載された方法、またはこれを修飾した方法であった。測定に用いたTN素子には、薄膜トランジスター（TFT）を取り付けなかった。

[0138] （1）ネマチック相の上限温度（N1；℃）：偏光顕微鏡を備えた融点測定

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

[0139] (2) ネマチック相の下限温度 (T_c ; $^{\circ}\text{C}$) : ネマチック相を有する試料をガラス瓶に入れ、 0°C 、 -10°C 、 -20°C 、 -30°C 、および -40°C のフリーザー中に10日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が -20°C ではネマチック相のままであり、 -30°C では結晶またはスメクチック相に変化したとき、 T_c を $<-20^{\circ}\text{C}$ と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

[0140] (3) 粘度 (バルク粘度; η ; 20°C で測定; $\text{mPa}\cdot\text{s}$) : 測定には東京計器株式会社製のE型回転粘度計を用いた。

[0141] (4) 粘度 (回転粘度; γ_1 ; 25°C で測定; $\text{mPa}\cdot\text{s}$) : 測定は、M. Imai et al., *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が $20\mu\text{m}$ のVA素子に試料を注入した。この素子に39ボルトから50ボルトの範囲で1ボルト毎に段階的に印加した。0.2秒の無印加のあと、ただ1つの矩形波 (矩形パルス; 0.2秒) と無印加 (2秒) の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流 (transient current) のピーク電流 (peak current) とピーク時間 (peak time) を測定した。これらの測定値とM. Imaiらの論文、40頁の計算式 (8) とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性は、測定 (6) に記載された方法で測定した。

[0142] (5) 光学異方性 (屈折率異方性; Δn ; 25°C で測定) : 測定は、波長 589nm の光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッペ屈折計によって行なった。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率 n_{\parallel} は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率 n_{\perp} は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学異方性の値は、 $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$ 、の式から計算した。

[0143] (6) 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$; 25°Cで測定) : 誘電率異方性の値は、 $\Delta \epsilon = \epsilon // - \epsilon \perp$ 、の式から計算した。誘電率 ($\epsilon //$ および $\epsilon \perp$) は次のように測定した。

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

2) 誘電率 ($\epsilon \perp$) の測定 : よく洗浄したガラス基板にポリイミド溶液を塗布した。このガラス基板を焼成した後、得られた配向膜にラビング処理をした。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が9 μm であり、ツイスト角が80度であるTN素子に試料を注入した。この素子にサイン波 (0.5 V、1 kHz) を印加し、2秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率 ($\epsilon \perp$) を測定した。

[0144] (7) しきい値電圧 (V_{th} ; 25°Cで測定; V) : 測定には大塚電子株式会社製のLCD5100型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が4 μm であり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード (normally black mode) のVA素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子に印加する電圧 (60 Hz、矩形波) は0 Vから20 Vまで0.02 Vずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときに透過率100%であり、この光量が最小であったときに透過率0%である電圧-透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が10%になったときの電圧で表した。

[0145] (8) 電圧保持率 ($VHR - 1$; 25°Cで測定; %) : 測定に用いたTN素

子はポリイミド配向膜を有し、そして2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）は $5\ \mu\text{m}$ であった。この素子は試料を注入したあと紫外線で硬化する接着剤で密閉した。このTN素子にパルス電圧（ $5\ \text{V}$ で 60 マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で 16.7 ミリ秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積 A を求めた。面積 B は減衰しなかったときの面積であった。電圧保持率は面積 B に対する面積 A の百分率で表した。

[0146] (9) 電圧保持率（VHR-2； 80°C で測定；%）： 25°C の代わりに、 80°C で測定した以外は、上記と同じ手順で電圧保持率を測定した。得られた値をVHR-2で表した。

[0147] (10) 電圧保持率（VHR-3； 25°C で測定；%）：紫外線を照射したあと、電圧保持率を測定し、紫外線に対する安定性を評価した。測定に用いたTN素子はポリイミド配向膜を有し、そしてセルギャップは $5\ \mu\text{m}$ であった。この素子に試料を注入し、光を 20 分間照射した。光源は超高压水銀ランプUSH-500D（ウシオ電機製）であり、素子と光源の間隔は $20\ \text{cm}$ であった。VHR-3の測定では、 16.7 ミリ秒のあいだ減衰する電圧を測定した。大きなVHR-3を有する組成物は紫外線に対して大きな安定性を有する。VHR-3は 90% 以上が好ましく、 95% 以上がさらに好ましい。

[0148] (11) 電圧保持率（VHR-4； 25°C で測定；%）：試料を注入したTN素子を 80°C の恒温槽内で 500 時間加熱したあと、電圧保持率を測定し、熱に対する安定性を評価した。VHR-4の測定では、 16.7 ミリ秒のあいだ減衰する電圧を測定した。大きなVHR-4を有する組成物は熱に対して大きな安定性を有する。

[0149] (12) 応答時間（ τ ； 25°C で測定； ms ）：測定には大塚電子株式会社製のLCD5100型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。ローパス・フィルター（Low-pass filter）は $5\ \text{kHz}$ に設定した。2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $3.5\ \mu\text{m}$ であり、配向膜を有しないVA

素子に試料を入れた。この素子を紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子に、30Vの電圧を印加しながら78mW/cm² (405nm)の紫外線を449秒間(35J)照射した。紫外線の照射には、アイグラフィック株式会社製、紫外硬化用マルチメタルランプM04-L41を用いた。この素子に矩形波(120Hz)を印加した。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率100%であり、この光量が最小であったときが透過率0%であるとみなした。矩形波の最大電圧は透過率が90%になるように設定した。矩形波の最低電圧は透過率が0%になる2.5Vに設定した。応答時間は透過率10%から90%に変化するのに要した時間(立ち上がり時間; rise time; ミリ秒)で表した。

- [0150] (13) 弾性定数 (K11: 広がり (spray) 弾性定数、K33: 曲げ (bend) 弾性定数; 25°Cで測定; pN) : 測定には株式会社東陽テクニカ製のEC-1型弾性定数測定器を用いた。2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)が20μmである垂直配向素子に試料を注入した。この素子に20ボルトから0ボルト電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。測定した静電容量(C)と印加電圧(V)の値を『液晶デバイスハンドブック』(日刊工業新聞社)、75頁にある式(2.98)、式(2.101)を用いてフィッティングし、式(2.100)から弾性定数の値を得た。
- [0151] (14) 比抵抗(ρ ; 25°Cで測定; Ωcm) : 電極を備えた容器に試料1.0mLを入れた。この容器に直流電圧(10V)を印加し、10秒後の直流電流を測定した。比抵抗は次の式から算出した。(比抵抗) = { (電圧) × (容器の電気容量) } / { (直流電流) × (真空の誘電率) }。
- [0152] (15) プレチルト角(度) : プレチルト角の測定には、分光エリプソメータM-2000U (J. A. Woollam Co., Inc. 製)を使用した。
- [0153] (16) 配向安定性(液晶配向軸安定性) : 液晶表示素子の電極側の液晶配向軸の変化を評価した。ストレス印加前の電極側の液晶配向角度 ϕ (before)を測定し、その後、素子に矩形波4.5V、60Hzを20分間印加した

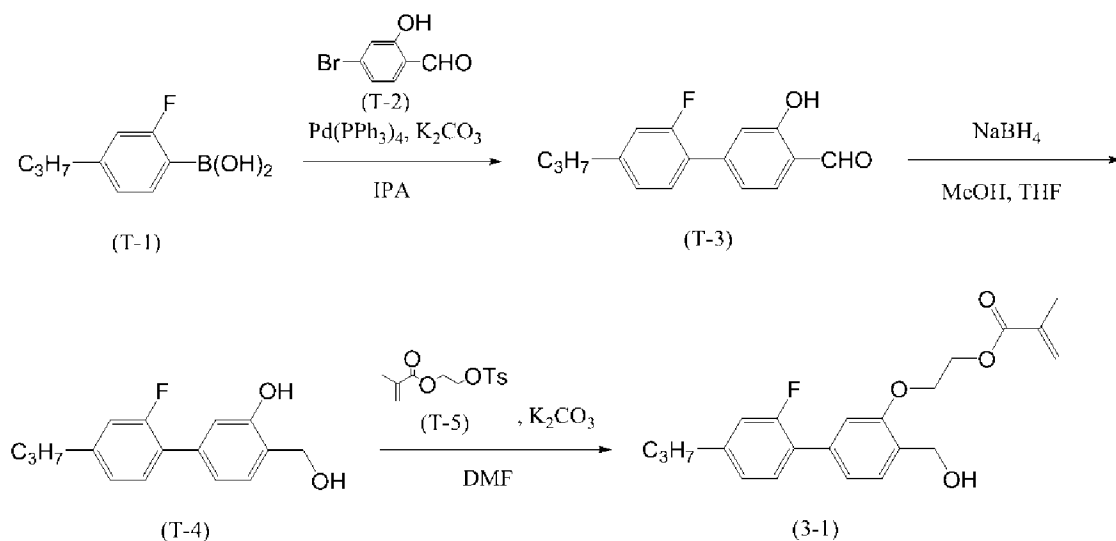
後、1秒間ショートし、1秒後および5分後に再び電極側の液晶配向角度 ϕ (after) を測定した。これらの値から、1秒後および5分後の液晶配向角度の変化 $\Delta\phi$ (deg.) を次の式を用いて算出した。

$$\Delta\phi \text{ (deg.)} = \phi \text{ (after)} - \phi \text{ (before)} \quad (\text{式 2})$$

これらの測定はJ. Hilfiker, B. Johs, C. Herzinger, J. F. Elman, E. Montbach, D. Bryant, and P. J. Bos, Thin Solid Films, 455-456, (2004) 596-600を参考に行った。 $\Delta\phi$ が小さいほうが液晶配向軸の変化率が小さく、液晶配向軸の安定性が良いといえる。

[0154] 合成例 1

下記の方法により化合物(3-1)を合成した。



[0155] 第1工程

化合物(T-1) (4.98g)、化合物(T-2) (5.00g)、炭酸カリウム (6.88g)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.289g)、およびイソプロピルアルコール (IPA; 100ml) を反応器に入れ、80℃で2時間、加熱還流を行った。反応混合物を水に注ぎ込み、1N塩酸を用いて中和した後、酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(トルエン)で精製して、化合物(T-3) (6.38g; 99%)を得た。

[0156] 第2工程

水素化ホウ素ナトリウム (1.88 g) およびメタノール (90 ml) を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへ化合物 (T-3) (6.38 g) の THF (40 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ8時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (体積比、トルエン：酢酸エチル=3：1) で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒 (体積比、1：1) からの再結晶により精製して、化合物 (T-4) (5.50 g ; 85%) を得た。

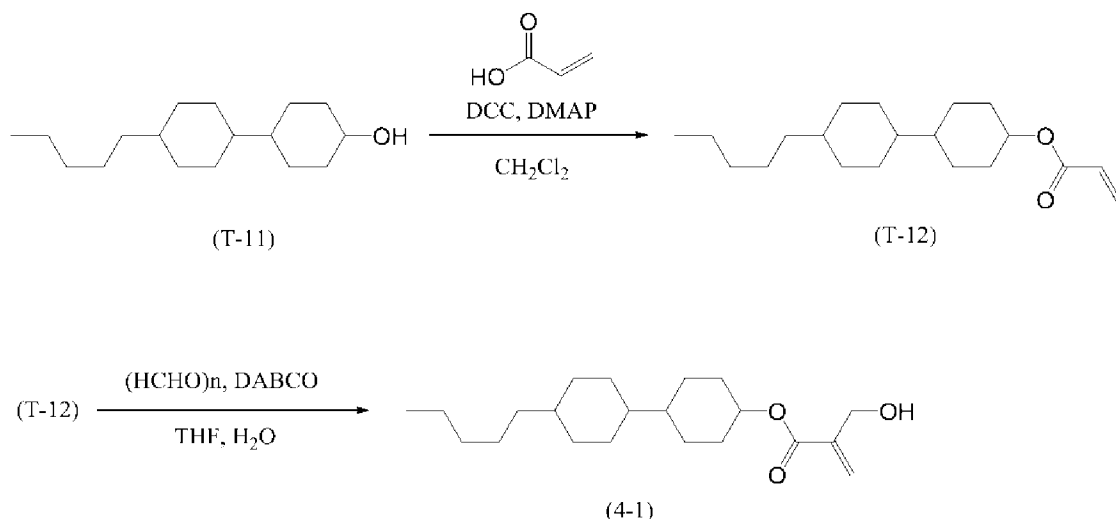
[0157] 第3工程

化合物 (T-4) (0.600 g)、炭酸カリウム (0.637 g)、およびDMF (6 ml) を反応器に入れ、80℃で1時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却した後、特開2013-177561に記載された手法に従って合成した化合物 (T-5) (0.983 g) のDMF (6 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、80℃で8時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (体積比、トルエン：酢酸エチル=7：1) で精製して、化合物 (3-1) (0.350 g ; 40%) を得た。

[0158] $^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm ; CDCl_3) : 7.35-7.29 (m, 2H)、7.15-7.10 (m, 1H)、7.07-6.94 (m, 3H)、6.14 (s, 1H)、5.60 (s, 1H)、4.71 (d, 6.6 Hz, 2H)、4.58 (t, $J=4.5$ Hz, 2H)、4.32 (t, $J=4.5$ Hz, 2H)、2.65-2.58 (m, 3H)、1.95 (s, 3H)、1.72-1.63 (m, 2H)、0.98 (t, $J=7.5$ Hz, 3H) .

[0159] 合成例2

下記の方法により化合物（４－１）を合成した。



[0160] 第 1 工程

化合物（T-11）（25.0 g）、アクリル酸（7.14 g）、4-ジメチルアミノピリジン（DMAP；1.21 g）、およびジクロロメタン（300 ml）を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへ1,3-ジシクロヘキシルカルボジイミド（DCC；24.5 g）のジクロロメタン（125 ml）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：トルエン＝2：1）で精製した。さらにソルミックス（登録商標）A-11からの再結晶により精製して、化合物（T-12）（11.6 g；38%）を得た。なお、ソルミックス（登録商標）A-11は、エタノール（85.5%）、メタノール（13.4%）とイソプロピルアルコール（1.1%）の混合物であり、日本アルコール販売（株）から入手した。

[0161] 第 2 工程

パラホルムアルデヒド（2.75 g）、1,4-ジアザビシクロ[2.2.2]オクタン（DABCO；4.62 g）、および水（40 ml）を反応器に入れ、室温で15分間攪拌した。そこへ化合物（T-12）（6.31

g) の THF (90 ml) 溶液を滴下し、室温で 72 時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、トルエン : 酢酸エチル = 5 : 1) で精製した。さらに再結晶 (容積比、ヘプタン : トルエン = 1 : 1) により精製して、化合物 (4-1) (1.97 g ; 29%) を得た。

[0162] 化合物 (6-1) の $^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm ; CDCl_3) : 6.23 (s, 1H)、5.79 (d, $J=1.2\text{ Hz}$, 1H)、4.79–4.70 (m, 1H)、4.32 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、2.29 (t, $J=6.7\text{ Hz}$, 1H)、2.07–2.00 (m, 2H)、1.83–1.67 (m, 6H)、1.42–1.18 (m, 8H)、1.18–0.91 (m, 9H)、0.91–0.79 (m, 5H)。

[0163] 組成物の実施例を以下に示す。成分化合物は、下記の表 3 の定義に基づいて記号によって表した。表 3 において、1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。記号化された化合物の後にあるかっこ内の番号は化合物が属する化学式を表す。(–) の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合 (百分率) は、添加物を含まない液晶組成物の重量に基づいた重量百分率 (重量%) である。最後に、組成物の特性値をまとめた。

[0164]

表3 記号を用いた化合物の表記法



1) 左末端基 R-	記号	4) 環構造 -A _n -	記号
$FC_nH_{2n}-$	F _n -		H
$C_nH_{2n+1}-$	n-		B
$C_nH_{2n+1}O-$	nO-		B(F)
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}-$	mOn-		B(2F)
$CH_2=CH-$	V-		B(2F,5F)
$C_nH_{2n+1}-CH=CH-$	nV-		B(2F,3F)
$CH_2=CH-C_nH_{2n}-$	Vn-		B(2F,3Cl)
$C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-$	mVn-		dh
$CF_2=CH-$	VFF-		Dh
$CF_2=CH-C_nH_{2n}-$	VFFn-		Cro(7F,8F)
$C_mH_{2m+1}CF_2C_nH_{2n}-$	m(CF2)n-		ch
$CH_2=CHCOO-$	AC-		
$CH_2=C(CH_3)COO-$	MAC-		
2) 右末端基 -R'	記号		
$-C_nH_{2n+1}$	-n		
$-OC_nH_{2n+1}$	-On		
$-CH=CH_2$	-V		
$-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	-Vn		
$-C_nH_{2n}-CH=CH_2$	-nV		
$-C_mH_{2m}-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	-mVn		
$-CH=CF_2$	-VFF		
$-OCOCH=CH_2$	-AC		
$-OCOC(CH_3)=CH_2$	-MAC		
3) 結合基 -Z _n -	記号		
$-C_nH_{2n}-$	n		
$-COO-$	E		
$-CH=CH-$	V		
$-CH=CHO-$	VO		
$-OCH=CH-$	OV		
$-CH_2O-$	1O		
$-OCH_2-$	O1		
5) 表記例			
例1 V-HHB(2F,3F)-O2		例2 5-DhB(2F,3F)-O2	
例3 3-HBB-1		例4 AC-BB-AC	
		$CH_2=CHCOO-$ $OCOCH=CH_2$	

[0165] 素子の実施例

1. 原料

配向膜を有しない素子に、極性化合物を添加した組成物を注入した。紫外線を照射したあと、この素子における液晶分子の垂直配向を検討した。最初に原料を説明する。原料は、組成物M1から組成物M18、極性化合物（PC-1）から（PC-22）、重合性化合物（RM-1）から（RM-7）の中から適宜選択した。組成物は以下のとおりである。

[0166] [組成物M1]

3-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	10%
5-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	7%
2-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	7%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	7%
3-B (2F, 3F) B (2F, 3F) -O2	(1-5)	3%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	5%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	10%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	8%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	10%
2-HH-3	(2-1)	14%
3-HB-O1	(2-2)	5%
3-HHB-1	(2-5)	3%
3-HHB-O1	(2-5)	3%
3-HHB-3	(2-5)	4%
2-BB (F) B-3	(2-8)	4%

$N I = 73.2^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.113$; $\Delta \varepsilon = -4.0$
; $V_{th} = 2.18\text{V}$; $\eta = 22.6\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0167] [組成物M2]

3-HB (2F, 3F) -O4	(1-1)	6%
3-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	8%
3-H1OB (2F, 3F) -O2	(1-3)	4%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	7%

2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
3-HH2B (2F, 3F) -O2	(1-7)	7%
5-HH2B (2F, 3F) -O2	(1-7)	4%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	6%
2-HH-3	(2-1)	12%
1-BB-5	(2-3)	12%
3-HHB-1	(2-5)	4%
3-HHB-O1	(2-5)	3%
3-HBB-2	(2-6)	3%

$Nl = 82.8^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.118$; $\Delta \varepsilon = -4.4$
; $V_{th} = 2.13\text{V}$; $\eta = 22.5\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0168] [組成物M3]

3-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	7%
5-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	7%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	8%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	5%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	4%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(1-8)	4%
2-BB (2F, 3F) B-3	(1-9)	5%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	8%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	8%
3-HH-V	(2-1)	27%
3-HH-V1	(2-1)	6%

V-HHB-1 (2-5) 3%

$Nl = 78.1^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.107$; $\Delta \epsilon = -3.2$
; $V_{th} = 2.02\text{V}$; $\eta = 15.9\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0169] [組成物M4]

3-HB (2F, 3F) -O2 (1-1) 10%

5-HB (2F, 3F) -O2 (1-1) 10%

3-H2B (2F, 3F) -O2 (1-2) 8%

5-H2B (2F, 3F) -O2 (1-2) 8%

2-HBB (2F, 3F) -O2 (1-10) 6%

3-HBB (2F, 3F) -O2 (1-10) 8%

4-HBB (2F, 3F) -O2 (1-10) 7%

5-HBB (2F, 3F) -O2 (1-10) 7%

3-HDhB (2F, 3F) -O2 (1-16) 5%

3-HH-4 (2-1) 14%

V-HHB-1 (2-5) 10%

3-HBB-2 (2-6) 7%

$Nl = 88.5^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.108$; $\Delta \epsilon = -3.8$
; $V_{th} = 2.25\text{V}$; $\eta = 24.6\text{mPa}\cdot\text{s}$; $VHR-1 = 99.1\%$
; $VHR-2 = 98.2\%$; $VHR-3 = 97.8\%$.

[0170] [組成物M5]

3-HB (2F, 3F) -O2 (1-1) 7%

3-HB (2F, 3F) -O4 (1-1) 8%

3-H2B (2F, 3F) -O2 (1-2) 8%

3-BB (2F, 3F) -O2 (1-4) 10%

2-HHB (2F, 3F) -O2 (1-6) 4%

3-HHB (2F, 3F) -O2 (1-6) 7%

3-HHB (2F, 3F) -1 (1-6) 6%

2-HBB (2F, 3F) -O2 (1-10) 6%

3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	6%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	4%
3-HEB (2F, 3F) B (2F, 3F) -O2		
	(1-11)	3%
3-H1OCro (7F, 8F) -5	(1-14)	3%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(1-16)	5%
3-HH-O1	(2-1)	5%
1-BB-5	(2-3)	4%
V-HHB-1	(2-5)	4%
5-HB (F) BH-3	(2-12)	5%
NI = 81.1°C; T _c < -30°C; Δn = 0.119; Δε = -4.5		
; V _{th} = 1.69V; η = 31.4 mPa·s.		

[0171] [組成物M6]

3-HB (2F, 3F) -O4	(1-1)	15%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	8%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	7%
3-dhBB (2F, 3F) -O2	(1-17)	5%
3-chB (2F, 3F) -O2	(1-18)	7%
2-HchB (2F, 3F) -O2	(1-19)	8%
5-HH-V	(2-1)	18%
7-HB-1	(2-2)	5%
V-HHB-1	(2-5)	7%
V2-HHB-1	(2-5)	7%
3-HBB (F) B-3	(2-13)	8%
NI = 98.8°C; T _c < -30°C; Δn = 0.111; Δε = -3.2		
; V _{th} = 2.47V; η = 23.9 mPa·s.		

[0172] [組成物M7]

3-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	18%
5-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	17%
3-HHB (2F, 3Cl) -O2	(1-12)	5%
3-HBB (2F, 3Cl) -O2	(1-13)	8%
5-HBB (2F, 3Cl) -O2	(1-13)	7%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(1-16)	5%
3-HH-V	(2-1)	11%
3-HH-VFF	(2-1)	7%
F3-HH-V	(2-1)	10%
3-HHEH-3	(2-4)	4%
3-HB (F) HH-2	(2-10)	4%
3-HHEBH-3	(2-11)	4%

$N I = 77.5^{\circ}C$; $T_c < -30^{\circ}C$; $\Delta n = 0.084$; $\Delta \epsilon = -2.6$
; $V_{th} = 2.43V$; $\eta = 22.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0173] [組成物M8]

3-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	8%
3-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	10%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	10%
2O-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	3%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	4%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
2-HHB (2F, 3F) -1	(1-6)	5%
2-BB (2F, 3F) B-3	(1-9)	6%
2-BB (2F, 3F) B-4	(1-9)	6%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	4%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	7%
3-HH1OCro (7F, 8F) -5	(1-15)	4%

3-HDhB (2F, 3F) -O2	(1-16)	6%
3-dhBB (2F, 3F) -O2	(1-17)	4%
3-HH-V	(2-1)	11%
1-BB-5	(2-3)	5%
NI = 70.6°C; T _c < -20°C; Δn = 0.129; Δε = -4.3		
; V _{th} = 1.69V; η = 27.0 mPa·s.		

[0174] [組成物M9]

3-HB (2F, 3F) -O4	(1-1)	14%
3-H1OB (2F, 3F) -O2	(1-3)	3%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	10%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(1-8)	6%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	4%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	6%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	4%
3-HH-V	(2-1)	14%
1-BB-3	(2-3)	3%
3-HHB-1	(2-5)	4%
3-HHB-O1	(2-5)	4%
V-HBB-2	(2-6)	4%
1-BB(F)B-2V	(2-8)	6%
5-HBBH-1O1	(-)	4%
NI = 93.0°C; T _c < -30°C; Δn = 0.123; Δε = -4.0		
; V _{th} = 2.27V; η = 29.6 mPa·s.		

[0175] [組成物M10]

3-HB (2F, 3F) -O4	(1-1)	6%
3-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	8%

3-H1OB (2F, 3F) -O2	(1-3)	5%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	10%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	4%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	7%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	6%
3-HH-V	(2-1)	11%
1-BB-3	(2-3)	6%
3-HHB-1	(2-5)	4%
3-HHB-O1	(2-5)	4%
3-HBB-2	(2-6)	4%
3-B (F) BB-2	(2-7)	4%

$N I = 87.6^{\circ}C$; $T_c < -30^{\circ}C$; $\Delta n = 0.126$; $\Delta \epsilon = -4.5$
; $V_{th} = 2.21V$; $\eta = 25.3 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0176] [組成物M11]

3-HB (2F, 3F) -O4	(1-1)	6%
3-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	8%
3-H1OB (2F, 3F) -O2	(1-3)	4%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	7%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	6%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	10%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	8%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	7%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%
2-HH-3	(2-1)	12%

1-BB-3	(2-3)	6%
3-HHB-1	(2-5)	3%
3-HHB-O1	(2-5)	4%
3-HBB-2	(2-6)	6%
3-B(F)BB-2	(2-7)	3%

$Nl = 93.0^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.124$; $\Delta \varepsilon = -4.5$
; $V_{th} = 2.22\text{V}$; $\eta = 25.0\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0177] [組成物M12]

3-HB(2F, 3F)-O2	(1-1)	7%
5-HB(2F, 3F)-O2	(1-1)	7%
3-BB(2F, 3F)-O2	(1-4)	8%
3-HHB(2F, 3F)-O2	(1-6)	4%
5-HHB(2F, 3F)-O2	(1-6)	5%
3-HH1OB(2F, 3F)-O2	(1-8)	5%
2-BB(2F, 3F)B-3	(1-9)	4%
2-HBB(2F, 3F)-O2	(1-10)	3%
3-HBB(2F, 3F)-O2	(1-10)	8%
4-HBB(2F, 3F)-O2	(1-10)	5%
5-HBB(2F, 3F)-O2	(1-10)	8%
3-HH-V	(2-1)	33%
V-HHB-1	(2-5)	3%

$Nl = 76.4^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.104$; $\Delta \varepsilon = -3.2$
; $V_{th} = 2.06\text{V}$; $\eta = 15.6\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0178] [組成物M13]

2-H1OB(2F, 3F)-O2	(1-3)	6%
3-H1OB(2F, 3F)-O2	(1-3)	4%
3-BB(2F, 3F)-O2	(1-4)	3%
2-HH1OB(2F, 3F)-O2	(1-8)	14%

2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	7%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	11%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	9%
2-HH-3	(2-1)	5%
3-HH-VFF	(2-1)	30%
1-BB-3	(2-3)	5%
3-HHB-1	(2-5)	3%
3-HBB-2	(2-6)	3%
NI = 78.3°C; T _c < -20°C; Δn = 0.103; Δε = -3.2		
; V _{t h} = 2.17V; η = 17.7 mPa·s.		

[0179] [組成物M14]

3-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	5%
5-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	7%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	8%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	5%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	4%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(1-8)	5%
2-BB (2F, 3F) B-3	(1-9)	4%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	9%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	4%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	8%
3-HH-V	(2-1)	27%
3-HH-V1	(2-1)	6%
V-HHB-1	(2-5)	5%
NI = 81.2°C; T _c < -20°C; Δn = 0.107; Δε = -3.2		
; V _{t h} = 2.11V; η = 15.5 mPa·s.		

[0180] [組成物M15]

3-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	7%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	8%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(1-8)	5%
2-BB (2F, 3F) B-3	(1-9)	7%
2-BB (2F, 3F) B-4	(1-9)	7%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(1-16)	3%
5-HDhB (2F, 3F) -O2	(1-16)	4%
2-HchB (2F, 3F) -O2	(1-19)	8%
4-HH-V	(2-1)	15%
3-HH-V1	(2-1)	6%
1-HH-2V1	(2-1)	6%
3-HH-2V1	(2-1)	4%
V2-BB-1	(2-3)	5%
1V2-BB-1	(2-3)	5%
3-HHB-1	(2-5)	6%
3-HB (F) BH-3	(2-12)	4%

$Nl = 88.7^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.115$; $\Delta \varepsilon = -1.9$
; $V_{th} = 2.82\text{V}$; $\eta = 17.3\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0181] [組成物M16]

V2-H2B (2F, 3F) -O2	(1-2)	8%
V2-H1OB (2F, 3F) -O4	(1-3)	4%
3-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	7%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	7%
3-HH2B (2F, 3F) -O2	(1-7)	7%
5-HH2B (2F, 3F) -O2	(1-7)	4%
V-HH2B (2F, 3F) -O2	(1-7)	6%
V2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	5%

V-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1-10)	5%
V-HBB (2 F, 3 F) -O 4	(1-10)	6%
2-HH-3	(2-1)	12%
1-BB-5	(2-3)	12%
3-HHB-1	(2-5)	4%
3-HHB-O 1	(2-5)	3%
3-HBB-2	(2-6)	3%

$N I = 89.9^{\circ}C$; $T_c < -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.122$; $\Delta \epsilon = -4.2$
; $V_{th} = 2.16V$; $\eta = 23.4 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0182] [組成物M17]

3-HB (2 F, 3 F) -O 2	(1-1)	3%
V-HB (2 F, 3 F) -O 2	(1-1)	3%
V2-HB (2 F, 3 F) -O 2	(1-1)	5%
5-H2B (2 F, 3 F) -O 2	(1-2)	5%
V2-BB (2 F, 3 F) -O 2	(1-4)	3%
1V2-BB (2 F, 3 F) -O 2	(1-4)	3%
3-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(1-6)	6%
V-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(1-6)	6%
V-HHB (2 F, 3 F) -O 4	(1-6)	5%
V2-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(1-6)	4%
V2-BB (2 F, 3 F) B-1	(1-9)	4%
V2-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1-10)	5%
V-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1-10)	4%
V-HBB (2 F, 3 F) -O 4	(1-10)	5%
V-HHB (2 F, 3 C 1) -O 2	(1-12)	3%
3-HH-V	(2-1)	27%
3-HH-V 1	(2-1)	6%
V-HHB-1	(2-5)	3%

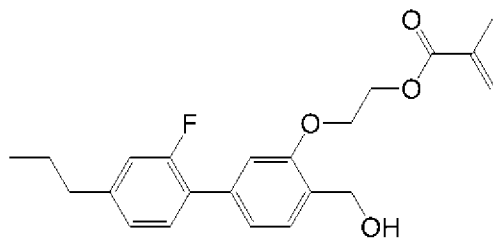
$N I = 77.1^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.101$; $\Delta \epsilon = -3.0$
 ; $V_{th} = 2.04\text{V}$; $\eta = 13.9\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0183] [組成物M18]

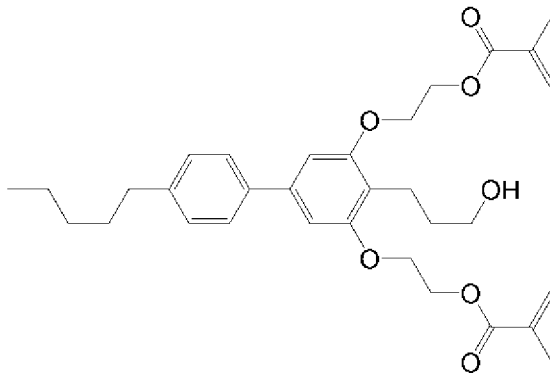
V-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	10%
V2-HB (2F, 3F) -O2	(1-1)	10%
2-H1OB (2F, 3F) -O2	(1-3)	3%
3-H1OB (2F, 3F) -O2	(1-3)	3%
2O-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	3%
V2-BB (2F, 3F) -O2	(1-4)	8%
V2-HHB (2F, 3F) -O2	(1-6)	5%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	3%
V-HBB (2F, 3F) -O2	(1-10)	6%
V-HBB (2F, 3F) -O4	(1-10)	8%
V-HHB (2F, 3Cl) -O2	(1-12)	7%
3-HH-4	(2-1)	14%
V-HHB-1	(2-5)	10%
3-HBB-2	(2-6)	7%

$N I = 75.9^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.114$; $\Delta \epsilon = -3.9$
 ; $V_{th} = 2.20\text{V}$; $\eta = 24.7\text{mPa}\cdot\text{s}$.

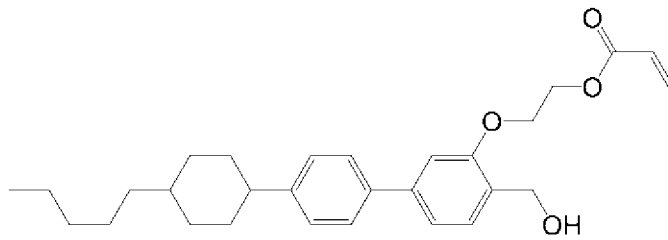
[0184] 第一添加物は、極性化合物 (PC-1) から (PC-22) である。



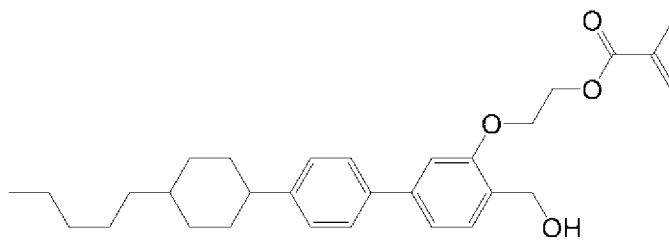
(PC-1)



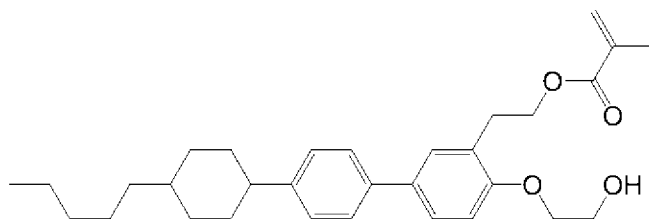
(PC-2)



(PC-3)

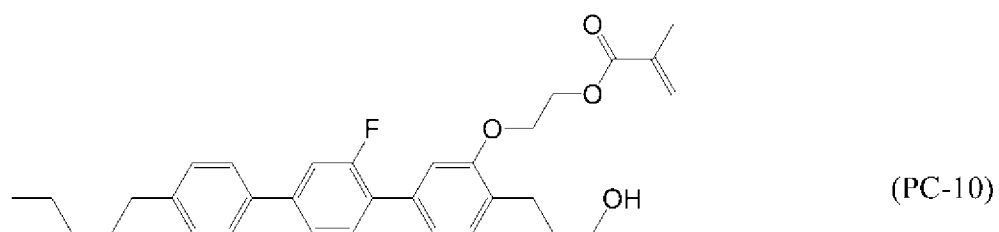
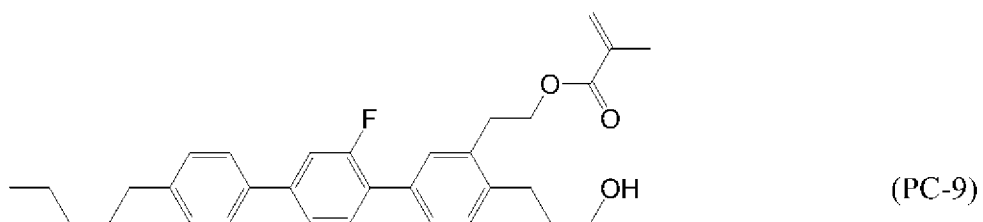
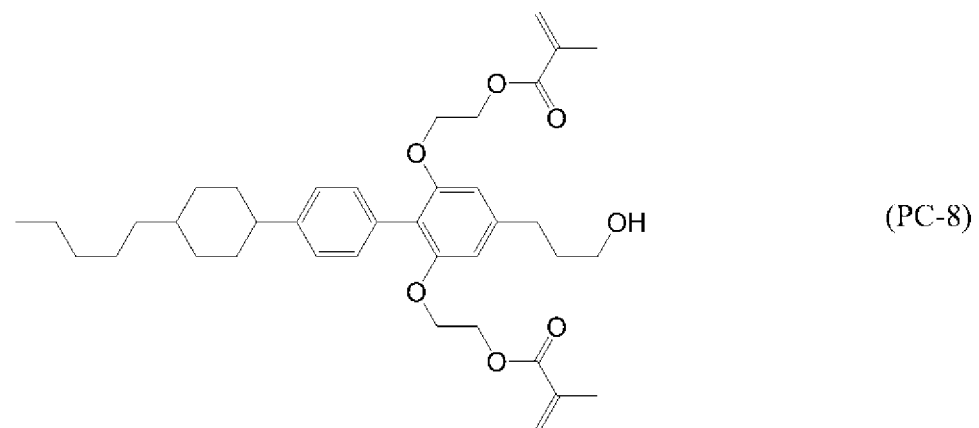
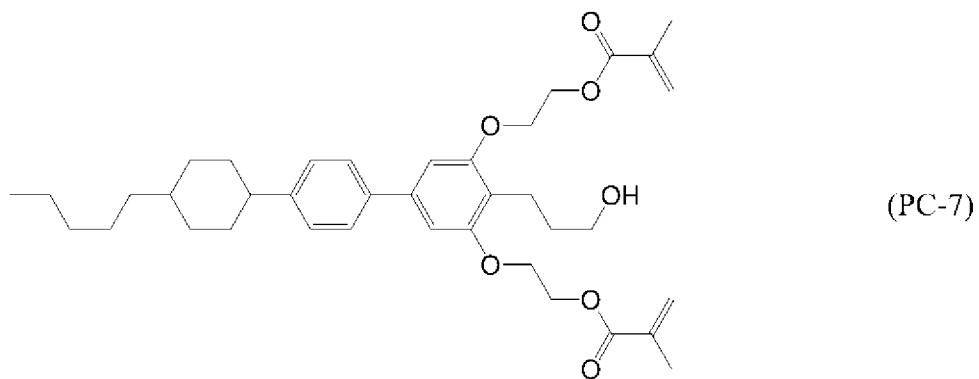
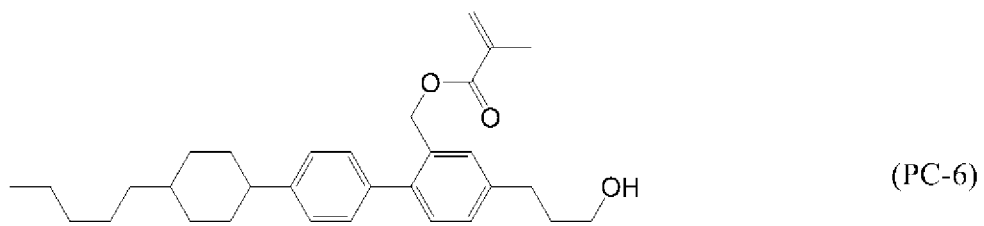


(PC-4)

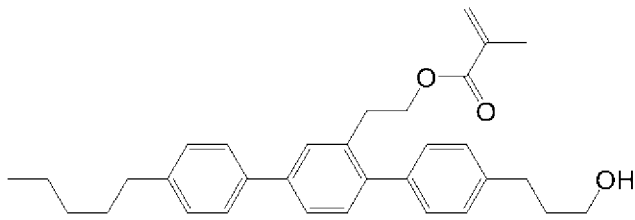


(PC-5)

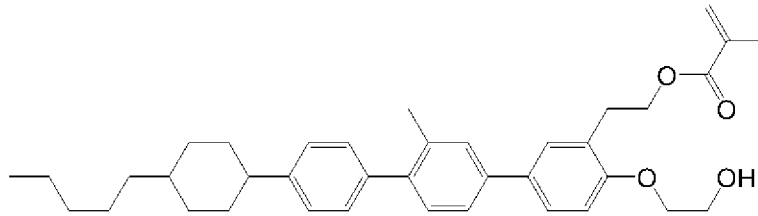
[0185]



[0186]

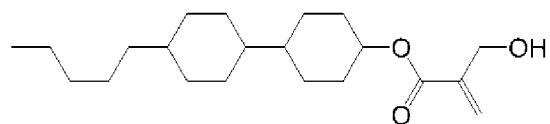


(PC-11)

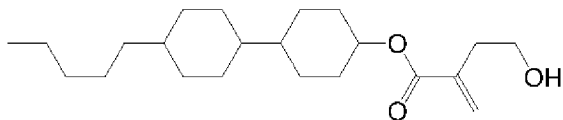


(PC-12)

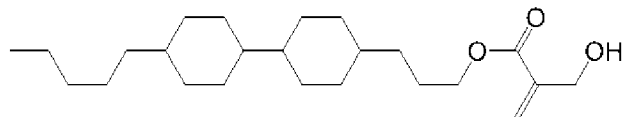
[0187]



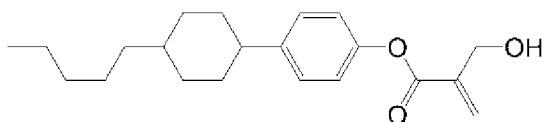
(PC-13)



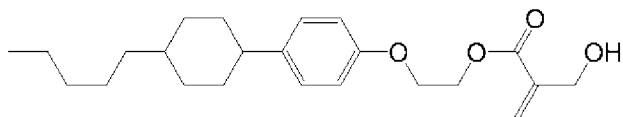
(PC-14)



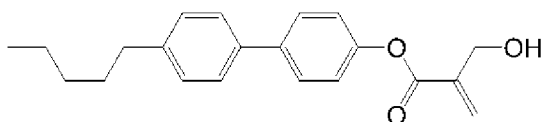
(PC-15)



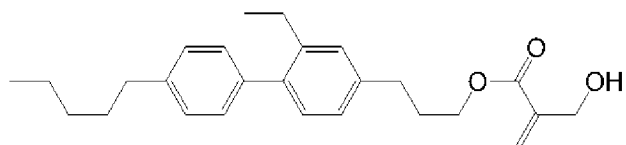
(PC-16)



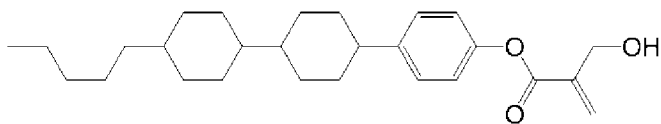
(PC-17)



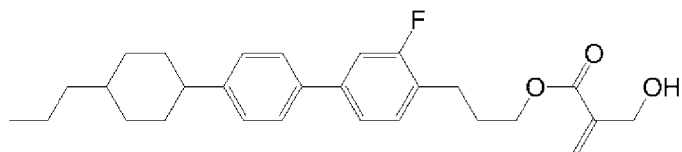
(PC-18)



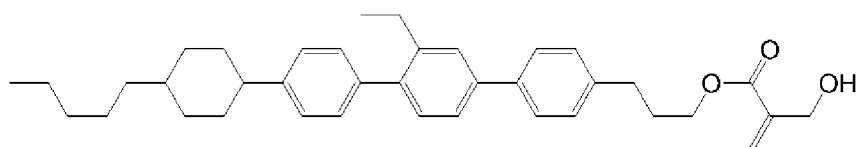
(PC-19)



(PC-20)

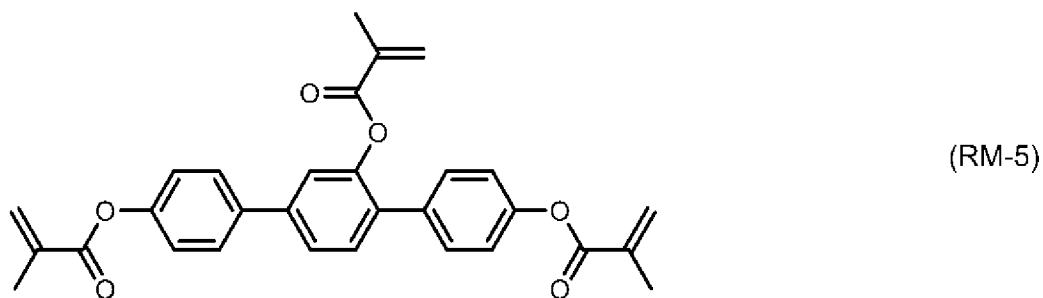
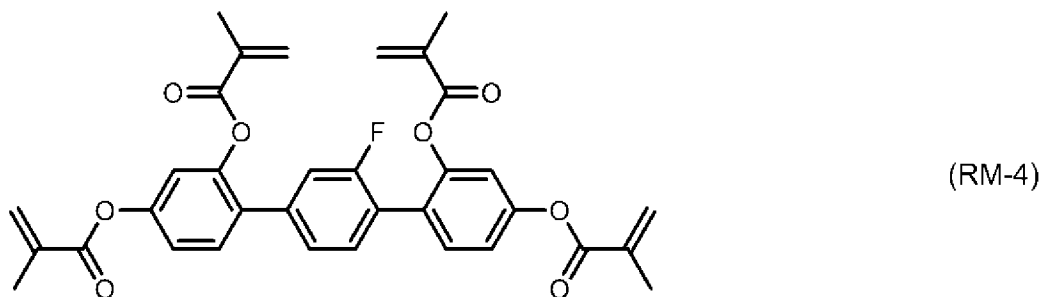
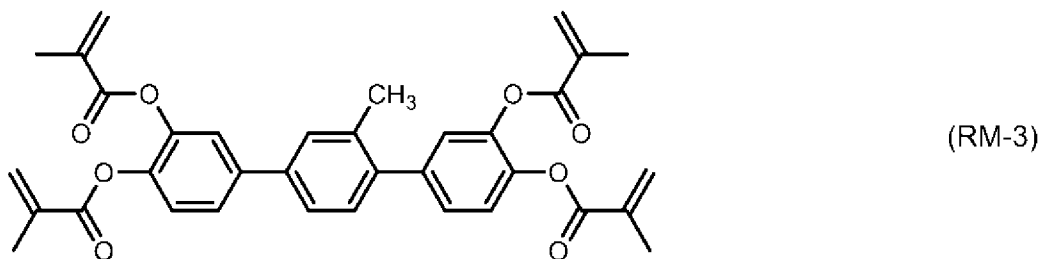
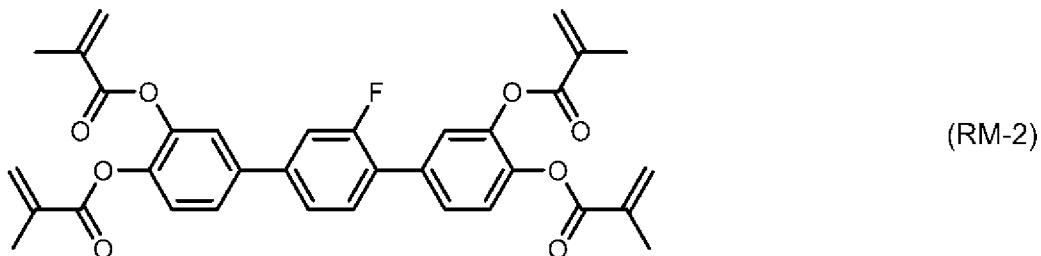
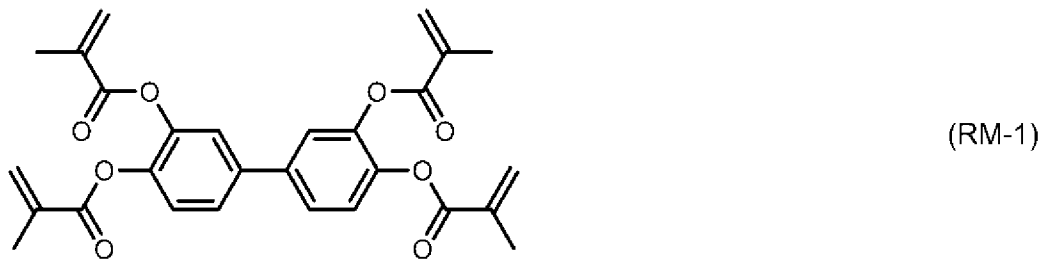


(PC-21)

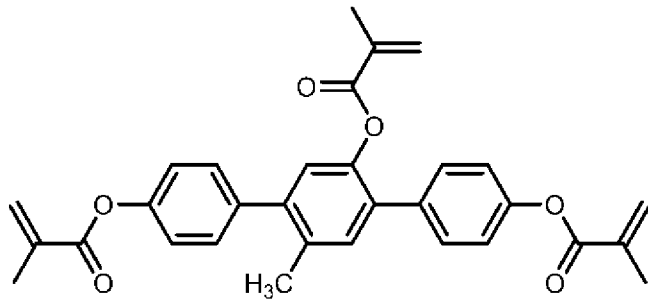


(PC-22)

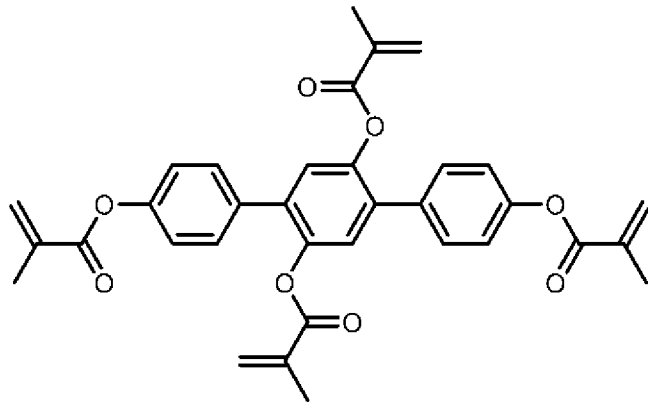
[0188] 第二添加物は、重合性化合物 (RM-1) から (RM-7) である。



[0189]



(RM-6)



(RM-7)

[0190] 2. 液晶分子の垂直配向

実施例 1

組成物M1に極性化合物(PC-1)を5重量%の割合で、さらに重合性化合物(RM-1)を0.5重量%の割合で添加した。この混合物を100℃のホットステージ上で2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)が4.0μmであり、配向膜を有しない素子に注入した。この素子に超高圧水銀ランプUSH-250-BY(ウシオ電機製)を用いて紫外線を照射(28J)することによって、極性化合物(PC-1)と重合性化合物(RM-1)とを重合させた。この素子を偏光子と検光子が直交して配置された偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。光が素子を通過しない場合は、垂直配向が「良好」と判断した。液晶分子が十分に配向したと推定されるからである。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

[0191] 実施例 2 から 22 および 比較例 1

組成物、極性化合物、および重合性化合物の混合物を用いて、配向膜を有しない素子を作製した。実施例 1 と同様な方法で光漏れの有無を観察した。

結果を表4にまとめた。比較例1では、比較するために、重合性基を有する極性化合物を添加しなかった。

[0192] 表4. 液晶分子の垂直配向

実施例	液晶組成物	極性化合物 (5重量%)	重合性化合物 (0.5重量%)	垂直配向
1	M1	PC-1	RM-1	良好
2	M2	PC-2	RM-2	良好
3	M3	PC-3	RM-3	良好
4	M4	PC-4	RM-4	良好
5	M5	PC-5	RM-5	良好
6	M6	PC-6	RM-6	良好
7	M7	PC-7	RM-7	良好
8	M8	PC-8	RM-1	良好
9	M9	PC-9	RM-2	良好
10	M10	PC-10	RM-3	良好
11	M11	PC-11	RM-4	良好
12	M12	PC-12	RM-5	良好
13	M13	PC-13	RM-6	良好
14	M14	PC-14	RM-7	良好
15	M15	PC-15	RM-1	良好
16	M16	PC-16	RM-2	良好
17	M17	PC-17	RM-3	良好
18	M18	PC-18	RM-4	良好
19	M1	PC-19	RM-5	良好
20	M2	PC-20	RM-6	良好
21	M3	PC-21	RM-7	良好
22	M4	PC-22	RM-1	良好
比較例1	M1	-	RM-1	不良

[0193] 表4から分かるように、実施例1から22では、組成物、極性化合物や重合性化合物の種類を変えたが、光漏れは観察されなかった。この結果は、素子に配向膜がなくても垂直配向は良好であり、液晶分子が安定に配向していることを示している。一方、比較例1では、光漏れが観察された。この結果は、垂直配向が良好ではなかったことを示している。したがって、重合性基を有する極性化合物および重合性化合物から生成した重合体が液晶分子の垂直配向に重要な役割を果たしていることが分かる。

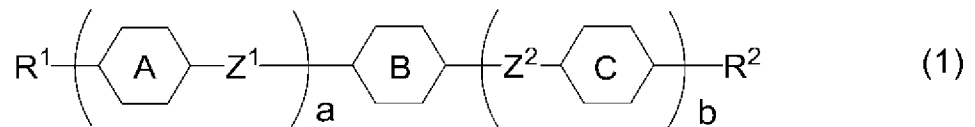
産業上の利用可能性

[0194] 本発明の液晶組成物は、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いることができる。

請求の範囲

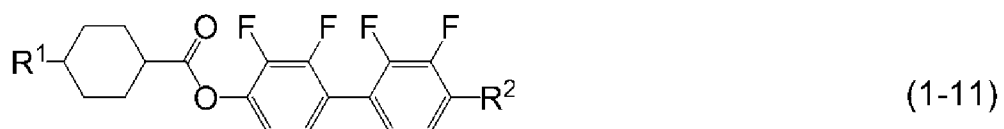
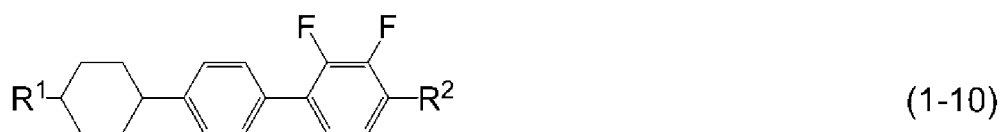
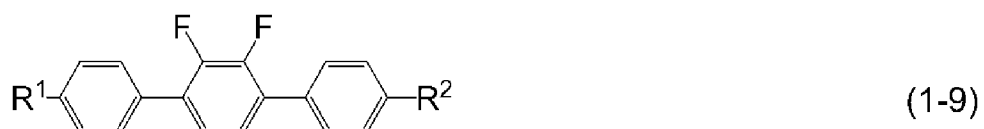
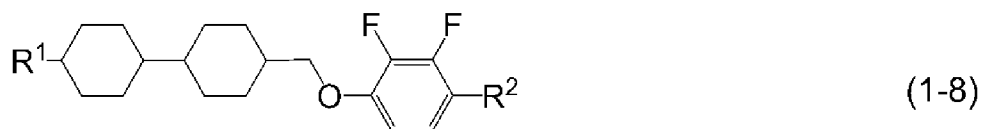
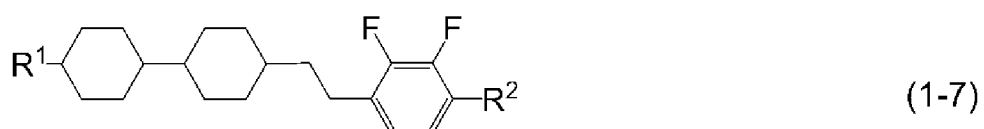
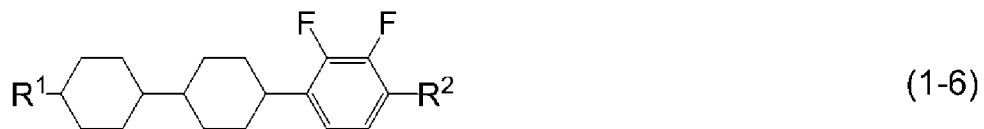
[請求項1] 第一添加物として少なくとも1つの重合性基を有する極性化合物、および第二添加物として少なくとも3つの重合性基を有する重合性化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

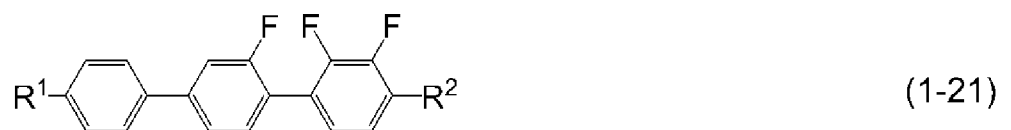
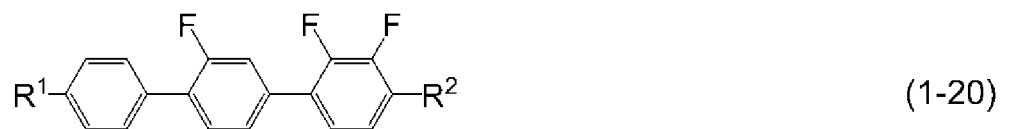
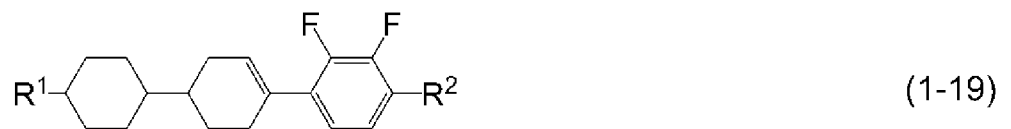
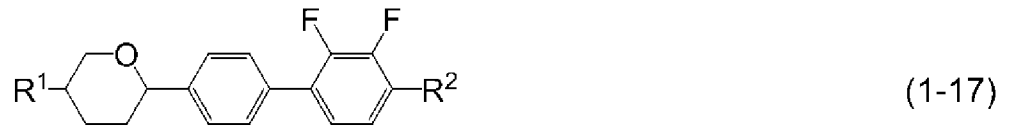
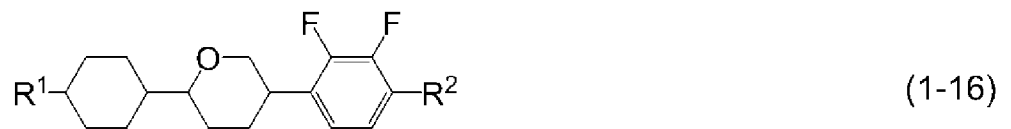
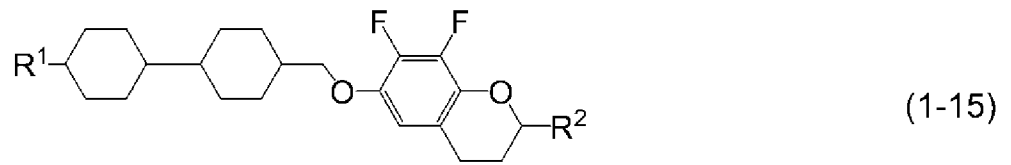
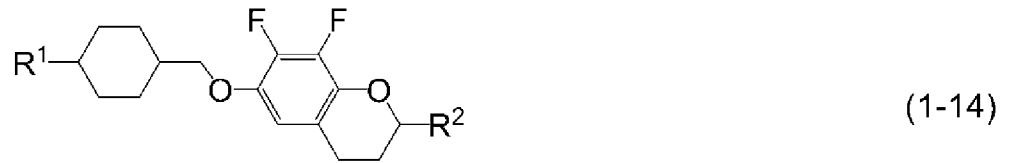
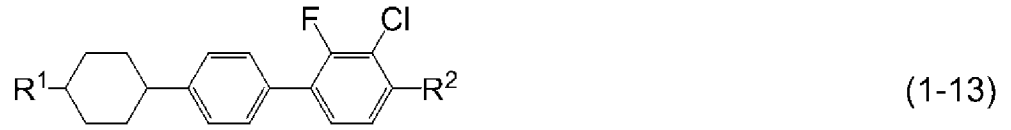
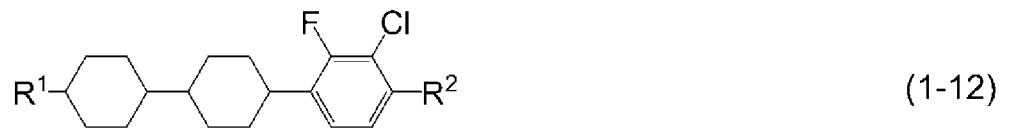
[請求項2] 第一成分として式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1に記載の液晶組成物。



式(1)において、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシであり；環Aおよび環Cは独立して、1,4-シクロヘキセン、1,4-シクロヘキセニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたナフタレン-2,6-ジイル、クロマン-2,6-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたクロマン-2,6-ジイルであり；環Bは、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2-クロロ-3-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-5-メチル-1,4-フェニレン、3,4,5-トリフルオロナフタレン-2,6-ジイル、または7,8-ジフルオロクロマン-2,6-ジイルであり； Z^1 および Z^2 は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ であり； a は、1、2、または3であり、 b は、0または1であり、そして、 a と b との和は3以下である。

[請求項3] 第一成分として式(1-1)から式(1-22)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1または2に記載の液晶組成物。

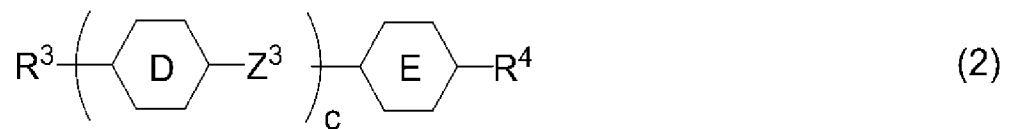




式(1-1)から式(1-22)において、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシである。

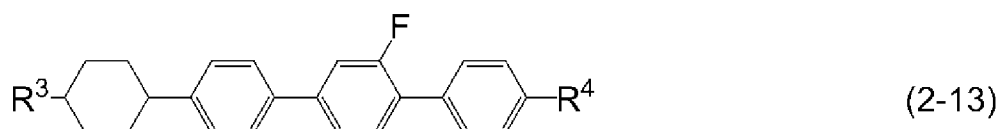
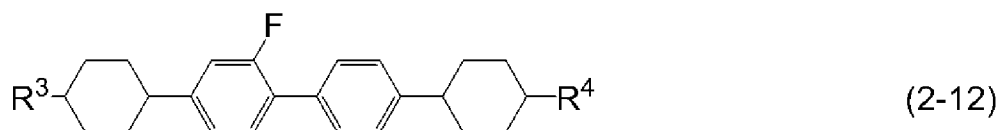
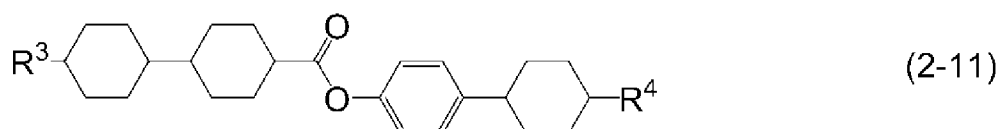
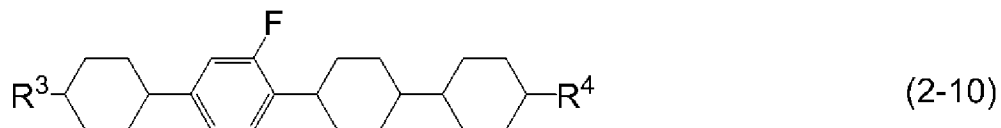
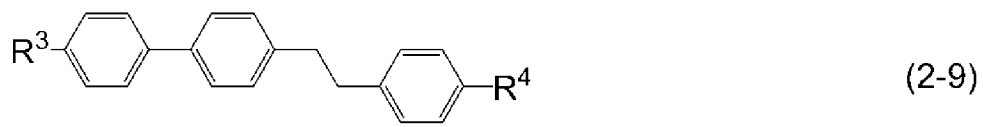
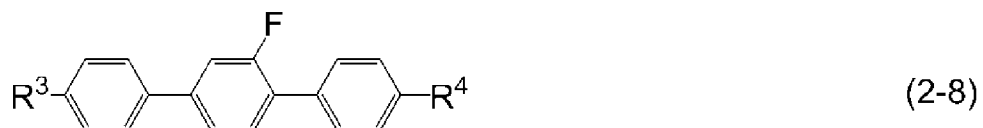
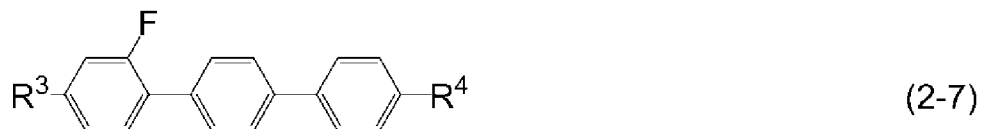
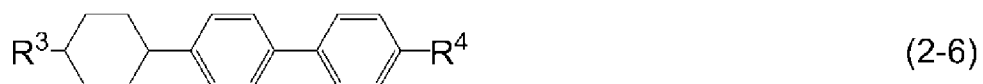
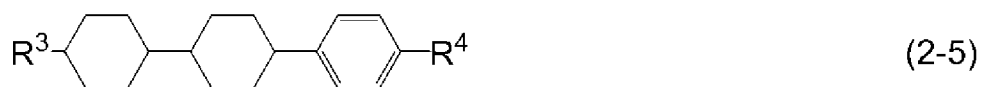
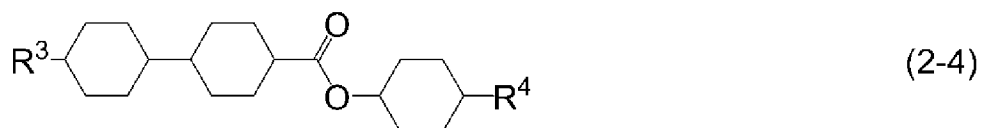
[請求項4] 液晶組成物の重量に基づいて、第一成分の割合が10重量%から90重量%の範囲である、請求項1から3のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項5] 第二成分として式(2)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から4のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(2)において、 R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり；環Dおよび環Eは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり； Z^3 は、単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、または $-\text{OCO}-$ であり； c は、1、2、または3である。

[請求項6] 第二成分として式(2-1)から式(2-13)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から5のいずれか1項に記載の液晶組成物。

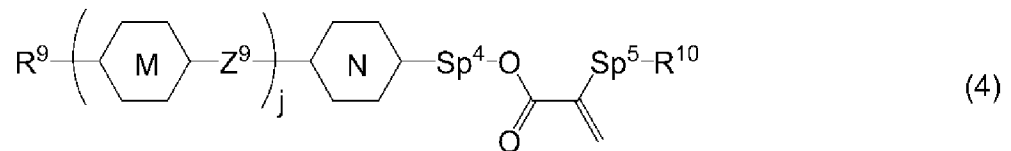
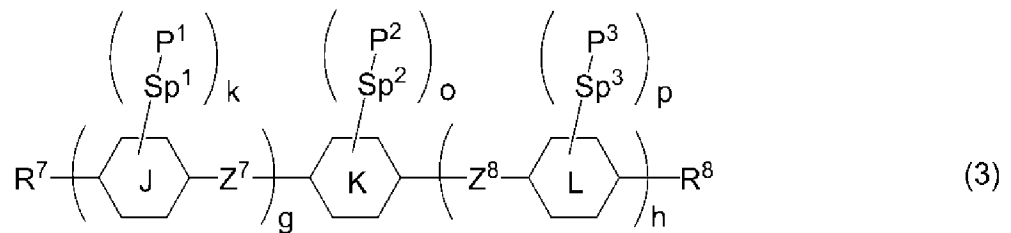


式(2-1)から式(2-13)において、R³およびR⁴は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルである。

[請求項7] 液晶組成物の重量に基づいて、第二成分の割合が10重量%から70重量%の範囲である、請求項5または6に記載の液晶組成物。

[請求項8] 第一添加物が、窒素、酸素、硫黄、およびリンから選択されたヘテロ原子を有する極性化合物である、請求項1から7のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項9] 第一添加物として式(3)および式(4)で表される極性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から8のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(3)において、R⁷は、水素、フッ素、塩素、または炭素数1から25のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-NR⁰-, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-, または炭素数3から8のシクロアルキレンで置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの第三級炭素(>CH-)は、窒素(>N-)で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置

き換えられてもよく、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；R⁸は、OH構造の酸素原子、SH構造の硫黄原子、および第一級、第二級、または第三級のアミン構造の窒素原子の少なくとも1つを有する極性基であり；環J、環K、および環Lは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；Z⁷およびZ⁸は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-CO-、-COO-、または-OCO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-、-C(CH₃)=CH-、-CH=C(CH₃)-、または-C(CH₃)=C(CH₃)-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；P¹、P²、およびP³は、重合性基であり；Sp¹、Sp²、およびSp³は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-

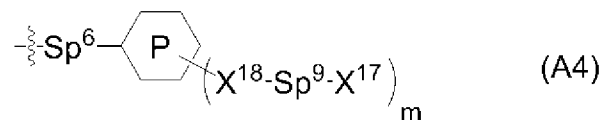
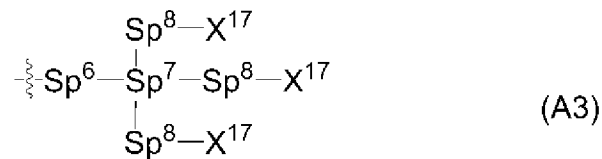
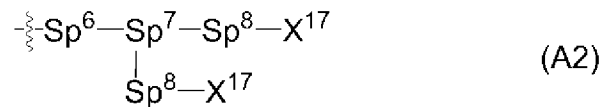
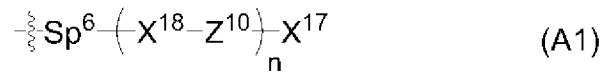
C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；gおよびhは独立して、0、1、2、3、または4であり、そしてgおよびhの和は、0、1、2、3、または4であり；kおよびpは独立して、0、1、2、3、または4であり、oは、1、2、3、または4であり；

式(4)において、R⁹は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり；R¹⁰は、-OH、-OR⁰、-NH₂、-NHR⁰、または-N(R⁰)₂で表される基であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；環Mおよび環Nは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、またはアントラセン-2,6-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；Z⁹は、単結合、-CH₂CH₂-, -CH=CH-, -C≡C-, -COO-, -O

CO-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH₂O-、-OCH₂-、
 または-CF=CF-であり；Sp⁴およびSp⁵は独立して、単結
 合または炭素数1から7のアルキレンであり、このアルキレンにおい
 て、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-COO-、または-
 OCO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-CH₂CH₂
 -は、-CH=CH-で置き換えられてもよく、これらの基において
 、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；jは、
 0、1、2、3、または4である。

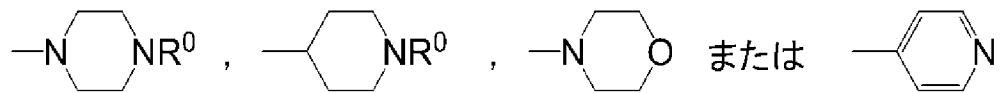
[請求項10]

請求項9に記載の式(3)において、R⁸が式(A1)から式(A
 4)で表される極性基の群から選択された基である、請求項9項に記
 載の液晶組成物。



式(A1)から式(A4)において、Sp⁶、Sp⁸、およびSp⁹は
 独立して、単結合または炭素数1から12のアルキレンであり、この
 アルキレンにおいて少なくとも1つの-CH₂-は、-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(

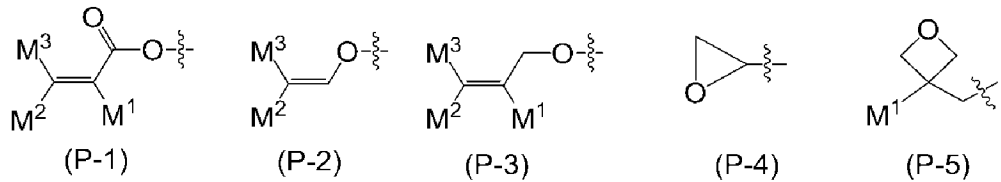
R⁰) -, -CH=CH-, または -C≡C- で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；S^{p7}は、>CH-, >CR⁰-, >N-, または>C<であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；X¹⁷は、-OH、-OR⁰、-COOH、-NH₂、-NHR⁰、-N(R⁰)₂、-SH、-SR⁰、



であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；X¹⁸は、-O-, -CO-, -NH-, -NR⁰-, -S-, または単結合であり、ここでR⁰は、水素または炭素数1から12のアルキルであり；Z¹⁰は、単結合または炭素数1から15のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-C≡C-, -CH=CH-, -COO-, -OCO-, -CO-, または-O-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；環Pは、炭素数6から25のアリールであり、このアリールにおいて、1つから3つの水素は-OH、-(CH₂)_q-OH、フッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルで置き換えられてもよく、ここでqは、1、2、3、または4であり；nは、0、1、2、または3であり；mは、1、2、3、4、または5である。

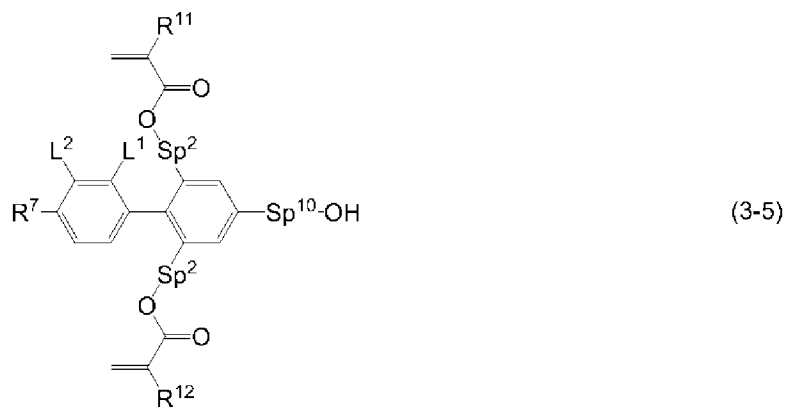
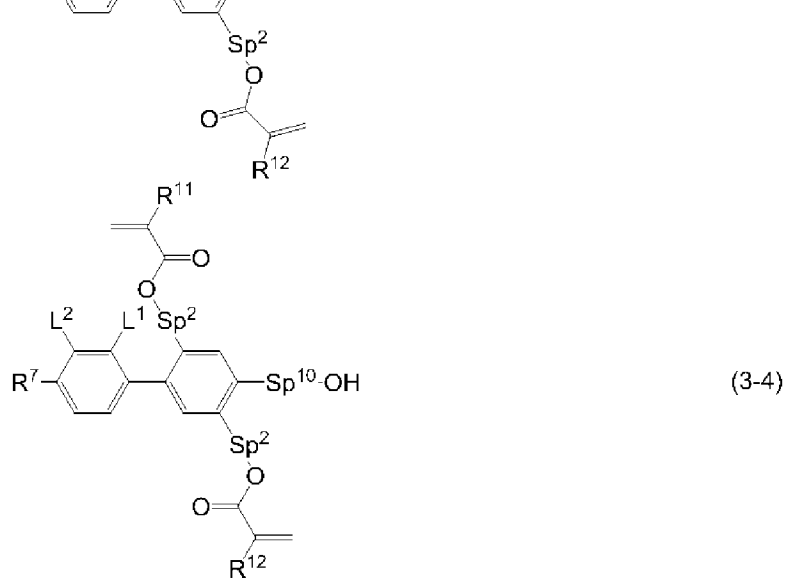
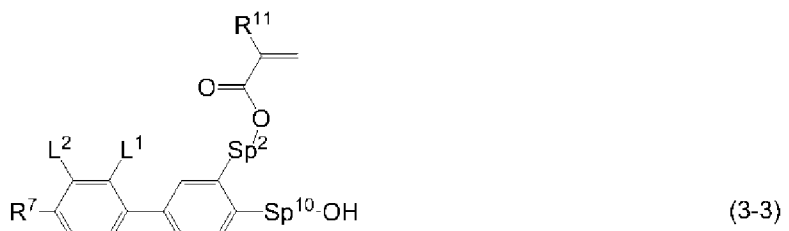
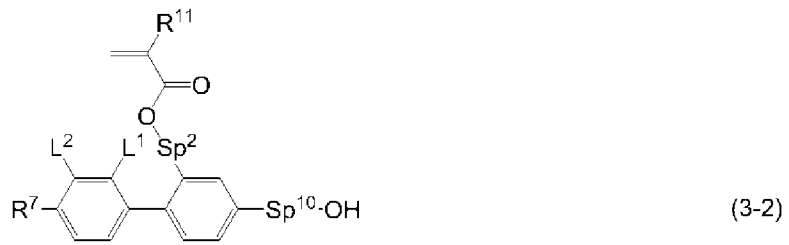
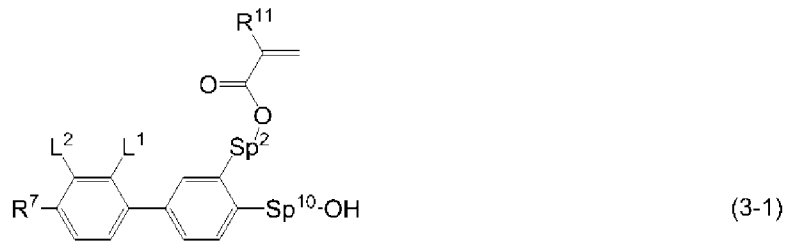
[請求項11]

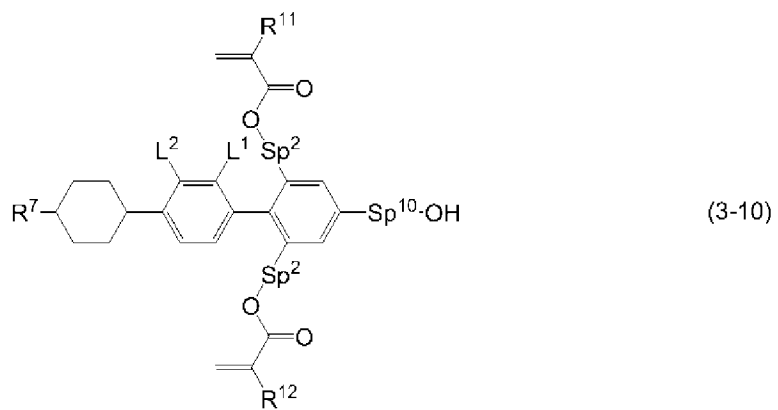
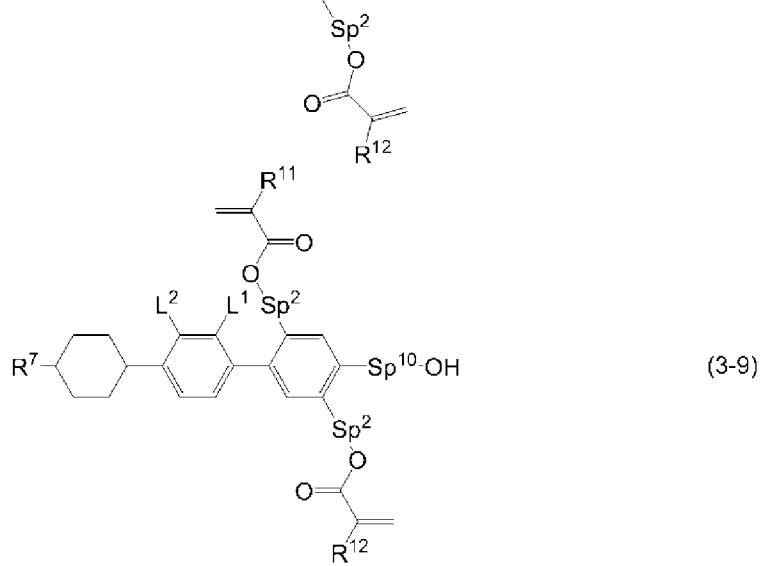
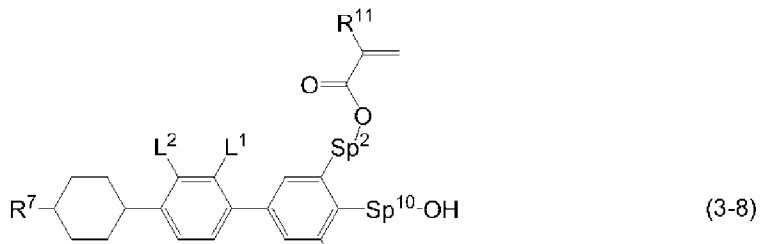
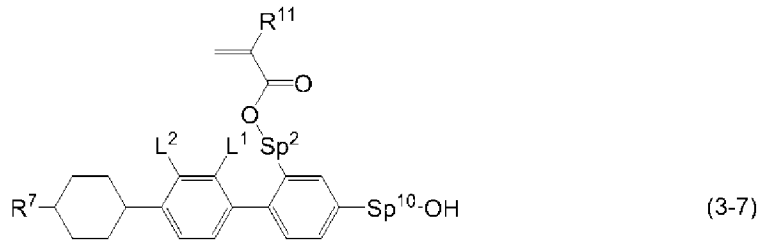
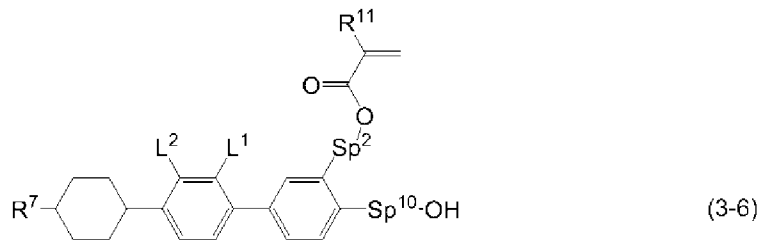
請求項9に記載の式(3)において、P¹、P²、およびP³が独立して、式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基の群から選択された基である、請求項9に記載の液晶組成物。

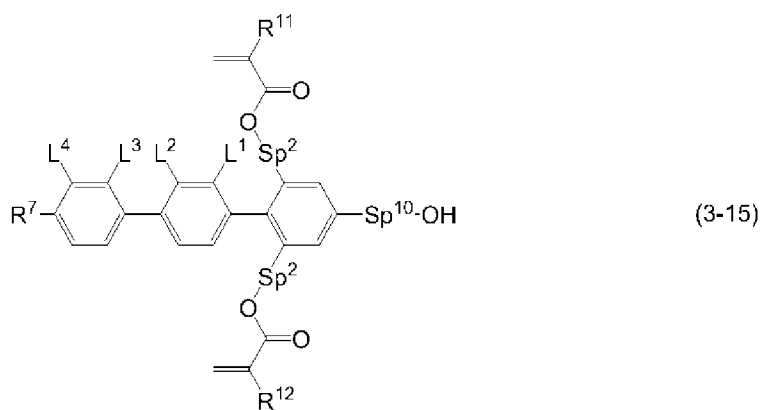
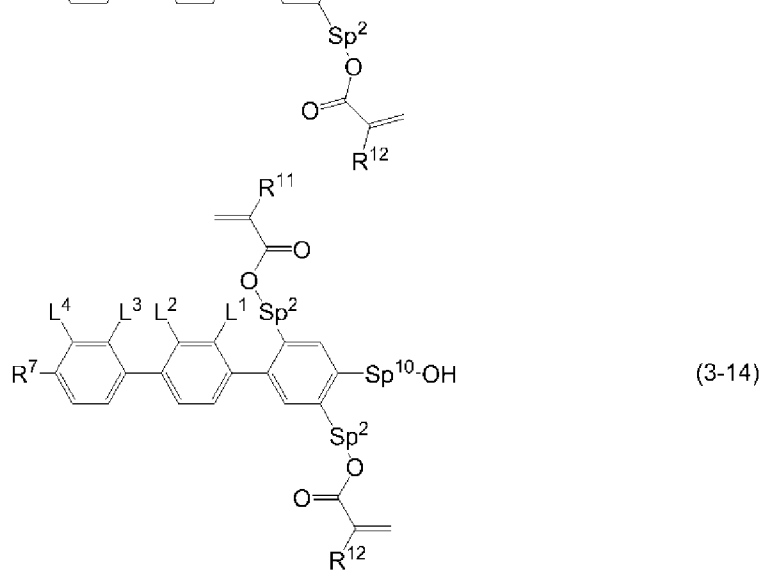
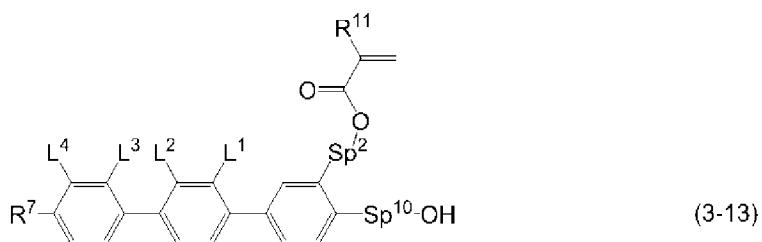
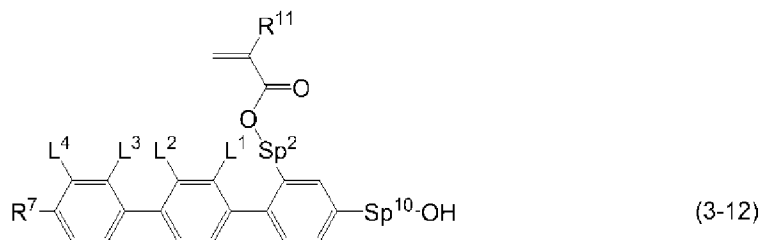
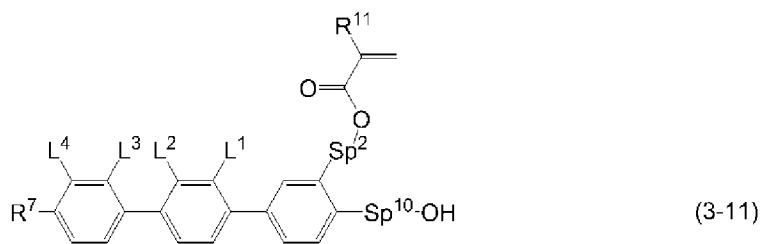


式 (P-1) から式 (P-5) において、 M^1 、 M^2 、および M^3 は独立して、水素、フッ素、炭素数 1 から 5 のアルキル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 1 から 5 のアルキルである。

[請求項12] 第一添加物が式 (3-1) から式 (3-15) で表される極性化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である、請求項 1 から 11 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



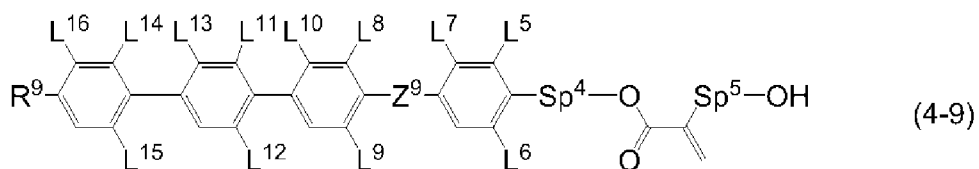
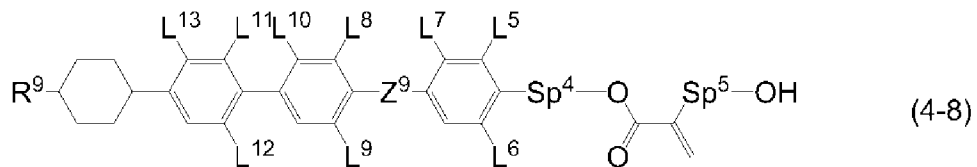
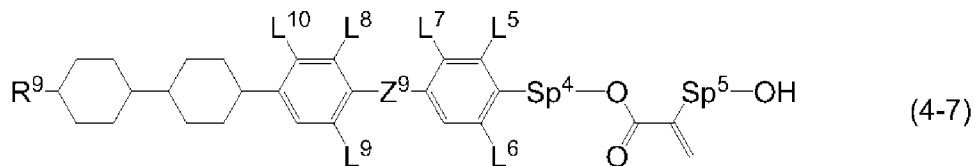
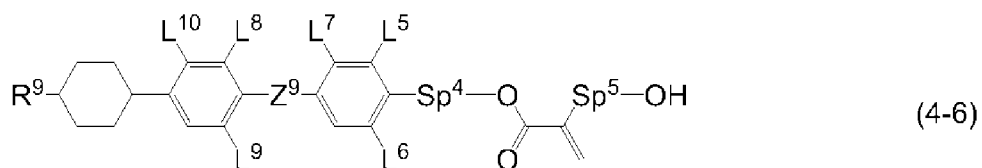
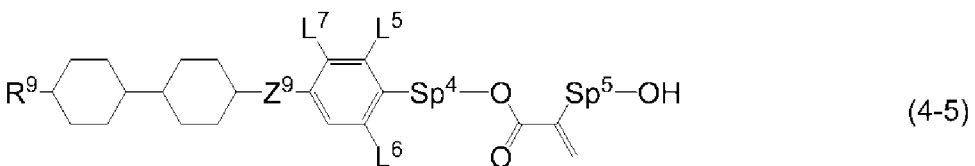
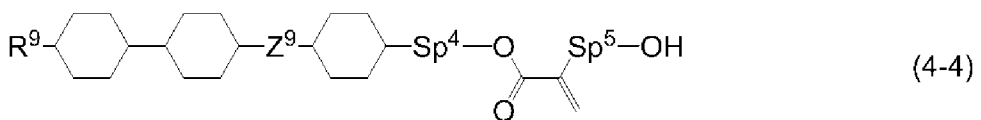
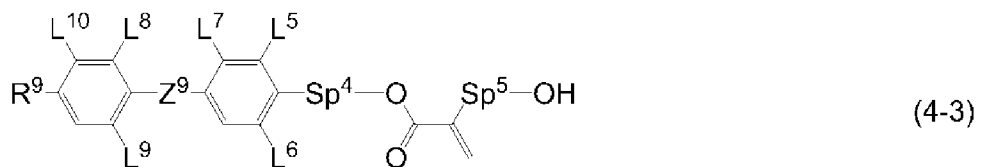
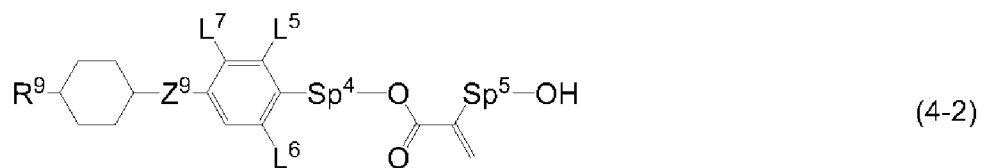
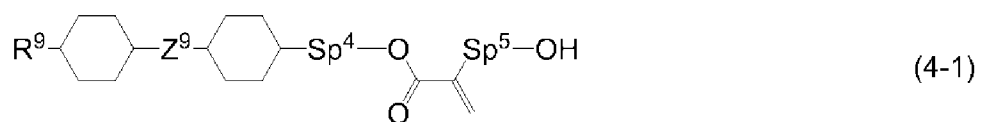




式(3-1)から式(3-15)において、 R^7 は、水素、フッ素、塩素、または炭素数1から25のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-NR^0-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、または炭素数3から8のシクロアルキレンで置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの第三級炭素($>CH-$)は、窒素($>N-$)で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、ここで R^0 は、水素または炭素数1から12のアルキルであり； Sp^2 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； Sp^{10} は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； L^1 、 L^2 、 L^3 、および L^4 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり； R^{11} および R^{12} は独立して、水素またはメチルである。

[請求項13]

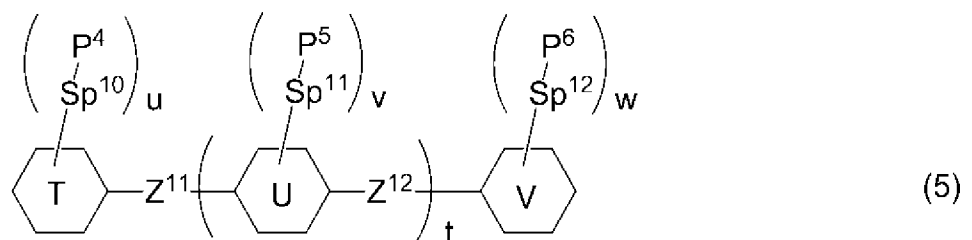
第一添加物が式(4-1)から式(4-9)で表される極性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である、請求項1から12のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(4-1)から式(4-9)において、 R^9 は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり； Z^9 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ であり； Sp^4 および Sp^5 は独立して、単結合または炭素数1から7のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく； L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、 L^{10} 、 L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、 L^{14} 、 L^{15} 、および L^{16} は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルである。

[請求項14] 液晶組成物の重量に基づいて、第一添加物の割合が0.05重量%から10重量%の範囲である、請求項1から13のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項15] 第二添加物として式(5)で表される重合性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。



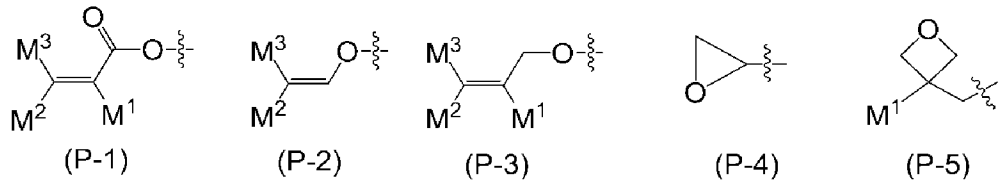
式(5)において、環Tおよび環Vは独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒ

ドロピラン-2-イル、1, 3-ジオキサン-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；環Uは、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-1, 2-ジイル、ナフタレン-1, 3-ジイル、ナフタレン-1, 4-ジイル、ナフタレン-1, 5-ジイル、ナフタレン-1, 6-ジイル、ナフタレン-1, 7-ジイル、ナフタレン-1, 8-ジイル、ナフタレン-2, 3-ジイル、ナフタレン-2, 6-ジイル、ナフタレン-2, 7-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、またはピリジン-2, 5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；Z¹¹およびZ¹²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-C H₂-は、-O-、-CO-、-COO-、または-OCO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-、-C(CH₃)=CH-、-CH=C(CH₃)-、または-C(CH₃)=C(CH₃)-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；P⁴、P⁵、およびP⁶は、重合性基であり；S p¹⁰、S p¹¹、およびS p¹²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-COO-、-OCO-、または-OC

OO-で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；tは0、1、または2であり；u、v、およびwは独立して、0、1、2、3、または4であり、そしてu、v、およびwの和は、3以上である。

[請求項16]

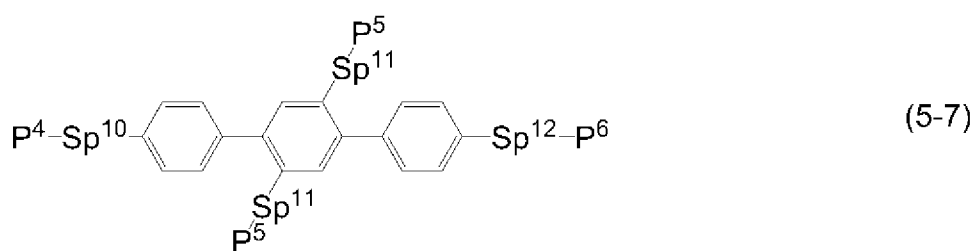
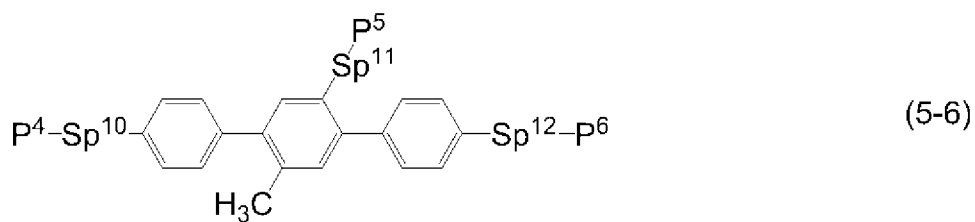
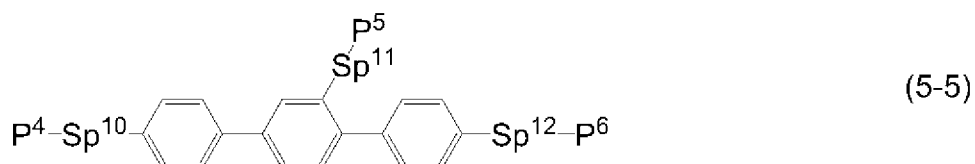
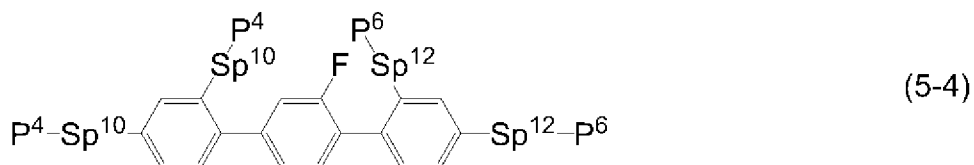
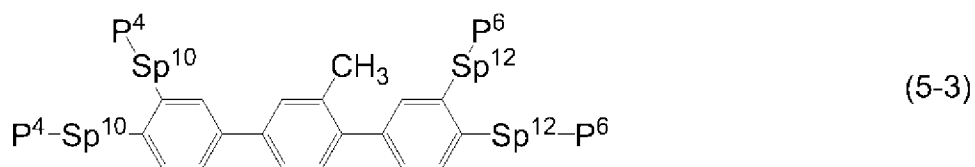
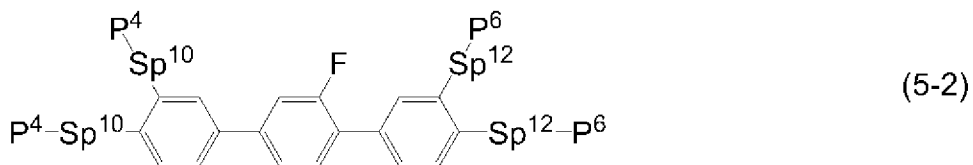
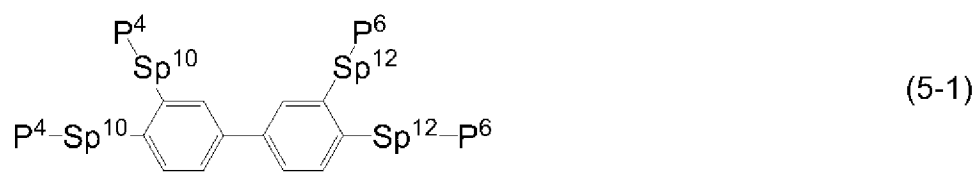
請求項15に記載の式(5)において、P⁴、P⁵、およびP⁶が独立して、式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基の群から選択された基である、請求項15に記載の液晶組成物。



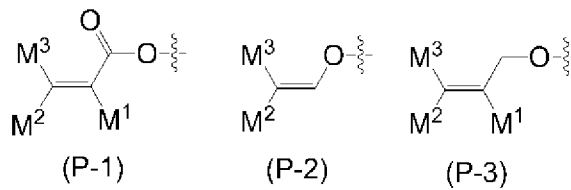
式(P-1)から式(P-5)において、M¹、M²、およびM³は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。

[請求項17]

第二添加物として式(5-1)から式(5-7)で表される重合性化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から16のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(5-1)から式(5-7)において、 P^4 、 P^5 、および P^6 は独立して、式(P-1)から式(P-3)で表される重合性基の群から選択された基であり、



ここでM¹、M²、およびM³は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；S p¹⁰、S p¹¹、およびS p¹²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの—CH₂—は、—O—、—COO—、—OCO—、または—OCOO—で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの—CH₂CH₂—は、—CH=CH—または—C≡C—で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[請求項18] 液晶組成物の重量に基づいて、第二添加物の割合が0.03重量%から10重量%の範囲である、請求項15から17のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項19] 請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

[請求項20] 液晶表示素子の動作モードが、IPSモード、VAモード、FFSモード、またはFPAモードであり、液晶表示素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である、請求項19に記載の液晶表示素子。

[請求項21] 請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物中の第一添加物および第二添加物が重合された、高分子支持配向型の液晶表示素子。

[請求項22] 請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物中の第一添加物および第二添加物が重合された、配向膜を有しない液晶表示素子。

[請求項23] 請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、液晶表示

素子における使用。

[請求項24] 請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、高分子支持配向型の液晶表示素子における使用。

[請求項25] 請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、配向膜を有しない液晶表示素子における使用。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2017/002357

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C09K19/56(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/32(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i, C09K19/42(2006.01)i, C09K19/54(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i,
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C09K19/56, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/42, C09K19/54, G02F1/13, G02F1/1337

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2017
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2017 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2017

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2014-524951 A (Merck Patent GmbH), 25 September 2014 (25.09.2014), claims; paragraph [0033]; examples & US 2014/0138581 A1 claims; examples; paragraph [0035] & WO 2013/004372 A1 & EP 2729550 A1 & TW 201311870 A & CN 103619993 A & KR 10-2014-0045535 A	1-8, 14-25

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

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

Date of the actual completion of the international search 27 February 2017 (27.02.17)	Date of mailing of the international search report 07 March 2017 (07.03.17)
--	--

Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan	Authorized officer Telephone No.
--	---

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/002357

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2015-168826 A (Merck Patent GmbH), 28 September 2015 (28.09.2015), claims; paragraphs [0046], [0126] to [0142], [0198] to [0210]; examples & US 2015/0252265 A1 claims; examples; paragraphs [0061], [0149], [0212] & EP 2918658 A2 & DE 102016000361 A & KR 10-2015-0105928 A & CN 105001879 A & TW 201536898 A & CN 105884730 A	1-25
E,X	WO 2017/013981 A1 (JNC Corp.), 26 January 2017 (26.01.2017), claims; examples (Family: none)	1-12,14-25
P,X	WO 2016/129490 A1 (JNC Corp.), 18 August 2016 (18.08.2016), claims; examples (Family: none)	1-9,13-25
E,X	JP 6070973 B1 (JNC Corp.), 01 February 2017 (01.02.2017), claims; examples (Family: none)	1-9,13-25

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/002357

Continuation of A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
(International Patent Classification (IPC))

G02F1/1337(2006.01) i

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

<p>A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))</p> <p>Int.Cl. C09K19/56(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/32(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i, C09K19/42(2006.01)i, C09K19/54(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i</p>												
<p>B. 調査を行った分野</p> <p>調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))</p> <p>Int.Cl. C09K19/56, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/42, C09K19/54, G02F1/13, G02F1/1337</p>												
<p>最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの</p> <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2017年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2017年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2017年</td> </tr> </table>			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2017年	日本国実用新案登録公報	1996-2017年	日本国登録実用新案公報	1994-2017年		
日本国実用新案公報	1922-1996年											
日本国公開実用新案公報	1971-2017年											
日本国実用新案登録公報	1996-2017年											
日本国登録実用新案公報	1994-2017年											
<p>国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)</p> <p>CAplus/REGISTRY (STN)</p>												
<p>C. 関連すると認められる文献</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X</td> <td>JP 2014-524951 A (メルク パテント ゲゼルシャフト ミット ベ シュレンクテル ハフツング) 2014. 09. 25, 【特許請求の範囲】、【0 033】、実施例 & US 2014/0138581 A1 Claims, Examples, [0035] & WO 2013/004372 A1 & EP 2729550 A1 & TW 201311870 A & CN 103619993 A & KR 10-2014-0045535 A</td> <td>1-8, 14-25</td> </tr> </tbody> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	X	JP 2014-524951 A (メルク パテント ゲゼルシャフト ミット ベ シュレンクテル ハフツング) 2014. 09. 25, 【特許請求の範囲】、【0 033】、実施例 & US 2014/0138581 A1 Claims, Examples, [0035] & WO 2013/004372 A1 & EP 2729550 A1 & TW 201311870 A & CN 103619993 A & KR 10-2014-0045535 A	1-8, 14-25				
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号										
X	JP 2014-524951 A (メルク パテント ゲゼルシャフト ミット ベ シュレンクテル ハフツング) 2014. 09. 25, 【特許請求の範囲】、【0 033】、実施例 & US 2014/0138581 A1 Claims, Examples, [0035] & WO 2013/004372 A1 & EP 2729550 A1 & TW 201311870 A & CN 103619993 A & KR 10-2014-0045535 A	1-8, 14-25										
<p><input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。</p>												
<p>* 引用文献のカテゴリー</p> <table border="0"> <tr> <td>「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの</td> <td>「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの</td> </tr> <tr> <td>「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの</td> <td>「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの</td> </tr> <tr> <td>「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)</td> <td>「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの</td> </tr> <tr> <td>「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td>「&」 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願</td> <td></td> </tr> </table>			「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの	「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの	「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの	「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの	「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)	「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの	「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献	「&」 同一パテントファミリー文献	「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願	
「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの	「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの											
「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの	「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの											
「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)	「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの											
「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献	「&」 同一パテントファミリー文献											
「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願												
<p>国際調査を完了した日</p> <p>27. 02. 2017</p>	<p>国際調査報告の発送日</p> <p>07. 03. 2017</p>											
<p>国際調査機関の名称及びあて先</p> <p>日本国特許庁 (ISA/J P)</p> <p>郵便番号 100-8915</p> <p>東京都千代田区霞が関三丁目4番3号</p>	<p>特許庁審査官 (権限のある職員)</p> <p>古妻 泰一</p> <p>電話番号 03-3581-1101 内線 3483</p>	<table border="1"> <tr> <td>4V</td> <td>3408</td> </tr> </table>	4V	3408								
4V	3408											

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	JP 2015-168826 A (メルク パテント ゲゼルシャフト ミット ベ シュレンクテル ハフツング) 2015.09.28, 【特許請求の範囲】、【0 046】、【0126】－【0142】、【0198】－【0210】、 実施例 & US 2015/0252265 A1 Claims, Examples, [0061], [0149], [0212] & EP 2918658 A2 & DE 102016000361 A & KR 10-2015-0105928 A & CN 105001879 A & TW 201536898 A & CN 105884730 A	1-25
E, X	WO 2017/013981 A1 (JNC株式会社) 2017.01.26, 【特許請求の範 囲】、実施例等 (ファミリーなし)	1-12, 14-25
P, X	WO 2016/129490 A1 (JNC株式会社) 2016.08.18, 【特許請求の範 囲】、実施例等 (ファミリーなし)	1-9, 13-25
E, X	JP 6070973 B1 (JNC株式会社) 2017.02.01, 【特許請求の範囲】、 実施例等 (ファミリーなし)	1-9, 13-25