(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
2014 年 8 月 21 日(21.08.2014)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2014/125911 A1

(51) 国際特許分類:
C07C 43/225 (2006.01) *C09K 19/12* (2006.01)
C07C 43/29 (2006.01) *C09K 19/18* (2006.01)
C07C 69/773 (2006.01) *C09K 19/30* (2006.01)
C07D 213/34 (2006.01) *C09K 19/32* (2006.01)
C07D 239/26 (2006.01) *C09K 19/34* (2006.01)
C07D 309/06 (2006.01) *C09K 19/42* (2006.01)
C07D 319/06 (2006.01) *G02F 1/13* (2006.01)
C07D 493/08 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2014/051691

(22) 国際出願日: 2014 年 1 月 27 日(27.01.2014)

(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 2013-025414 2013 年 2 月 13 日(13.02.2013) JP

(71) 出願人: ＪＮＣ株式会社(JNC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1008105 東京都千代田区大手町二丁目２番１号 Tokyo (JP). ＪＮＣ石油化学株式会社(JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) [JP/JP]; 〒1000004 東京都千代田区大手町二丁目２番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 田中 裕之(TANAKA Hiroyuki); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 遠藤 浩史(ENDOU Hiroshi); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP).

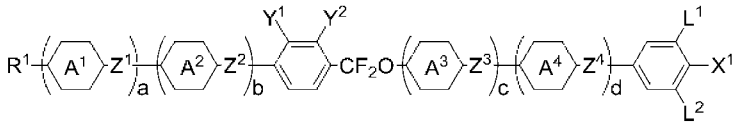
(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, 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, 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-CRYSTALLINE COMPOUND HAVING DIFLUOROMETHYLENEOXY GROUP, LIQUID CRYSTAL COMPOSITION, AND LIQUID CRYSTAL DISPLAY ELEMENT

(54) 発明の名称 : ジフルオロメチレンオキシを有する液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子



(1)

(57) **Abstract**: Provided are: a liquid-crystalline compound which satisfies at least one property selected from high stability to light, a high clear point, a low lower-limit temperature of a liquid crystal phase, a low viscosity, proper optical anisotropy, high dielectric anisotropy, a high dielectric constant in a short axis direction, a proper elastic constant, excellent compatibility and the like; a liquid crystal composition which contains the compound; and a liquid crystal display element comprising the composition. A compound represented by formula (1). For example, R^1 represents an alkyl group having 1 to 15 carbon atoms, rings A^1 to A^4 independently represent 1,4-cyclohexylene or 1,4-phenylene, Z^1 to Z^4 independently represent a single bond, $-(CH_2)_2-$, -COO- or $-CH_2O-$, X^1 represents a halogen atom, -C≡N, $-CF_3$ or $-OCF_3$, L^1 and L^2 independently represent a hydrogen atom or a fluorine atom, Y^1 and Y^2 independently represent a fluorine atom, and a, b, c and d independently represent 0 or 1 wherein the sum total of a, b, c and d is 1 or 2.

(57) 要約: 光に対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、短軸方向の大きな誘電率、適切な弾性定数、優れた相溶性などの物性の少なくとも１つを充足する液晶性化合物、この化合物を含有する液晶組成物、この組成物を含む液晶表示素子を提供する。 式（１）で表される化合物。 例えば、Ｒ[1]は炭素数１～１５のアルキルであり、環Ａ[1]～環Ａ[4]は１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであり、Ｚ[1]～Ｚ[4]は、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－ＣＯＯ－、または－ＣＨ$_2$Ｏ－であり、Ｘ[1]は、ハロゲン、－Ｃ≡Ｎ、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり、Ｌ[1]、Ｌ[2]は、水素またはフッ素であり、Ｙ[1]、Ｙ[2]はフッ素であり；ａ、ｂ、ｃ、ｄは、０または１であり、和は１または２である。

WO 2014/125911 A1

明　細　書

発明の名称 ：

ジフルオロメチレンオキシを有する液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子

技術分野

[0001] 本発明は、液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子に関する。さらに詳しくは、ジフルオロメチレンオキシを有する化合物、この化合物を含有し、ネマチック相を有する液晶組成物、およびこの組成物を含む液晶表示素子に関する。

[0002] 液晶表示素子は、パソコン、テレビなどのディスプレイに広く利用されている。この素子は、液晶性化合物の光学的異方性、誘電率異方性などを利用したものである。液晶表示素子の動作モードとしては、ＰＣ（phase change）モード、ＴＮ（twisted nematic）モード、ＳＴＮ（super twisted nematic）モード、ＢＴＮ（bistable twisted nematic）モード、ＥＣＢ（electrically controlled birefringence）モード、ＯＣＢ（optically compensated bend）モード、ＩＰＳ（in-plane switching）モード、ＶＡ（vertical alignment）モード、ＦＦＳ（fringe field switching）モード、ＰＳＡ（polymer sustained alignment）モードなどが知られている。

[0003] このような液晶表示素子では、適切な物性を有する液晶組成物が使われている。液晶表示素子の特性をさらに向上させるには、この組成物に含まれる液晶性化合物が、下記の（１）～（８）で示す物性を有するのが好ましい。

（１）熱、光などに対する高い安定性

（２）高い透明点

（３）液晶相の低い下限温度

（４）小さな粘度（η）

（５）適切な光学的異方性（Δｎ）

（６）大きな誘電率異方性（Δε）

（７）適切な弾性定数（Ｋ）

（８）他の液晶性化合物との優れた相溶性

（９）短軸方向の大きな誘電率（ε⊥）

[0004] 液晶性化合物の物性が素子の特性に及ぼす効果は、次のとおりである。（１）のように、熱、光などに対する高い安定性を有する化合物は、素子の電圧保持率を大きくする。これによって、素子の寿命が長くなる。（２）のように、高い透明点を有する化合物は、素子の使用可能な温度範囲を広げる。（３）のように、ネマチック相、スメクチック相などのような液晶相の低い下限温度、特にネマチック相の低い下限温度を有する化合物も、素子の使用可能な温度範囲を広げる。（４）のように、粘度の小さな化合物は、素子の応答時間を短くする。

[0005] （５）のように、適切な光学的異方性を有する化合物は、素子のコントラストを向上させる。素子の設計に応じて、大きな光学的異方性または小さな光学的異方性、すなわち適切な光学的異方性を有する化合物が必要である。素子のセルギャップを小さくすることにより応答時間を短くする場合には、大きな光学的異方性を有する化合物が適している。（６）のように大きな誘電率異方性を有する化合物は、素子のしきい値電圧を下げる。これによって、素子の消費電力が小さくなる。一方、小さな誘電率異方性を有する化合物は、組成物の粘度を小さくすることによって、素子の応答時間を短くする。

[0006] （７）に関しては、大きな弾性定数を有する化合物は、素子の応答時間を短くする。小さな弾性定数を有する化合物は、素子のしきい値電圧を下げる。したがって、向上させたい特性に応じて適切な弾性定数が必要になる。（８）のように他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する化合物が好ましい。これは、異なった物性を有する液晶性化合物を混合して、組成物の物性を調節するからである。

[0007] さらに近年、液晶表示素子の低消費電力化、高精細化の要求に伴い、液晶組成物の透過率改善が強く求められている。中でもＦＦＳモードの液晶表示素子に用いられる液晶組成物の透過率は、液晶組成物の短軸方向の誘電率（

ε⊥）と相関している事が知られており、（９）のように短軸方向の大きな誘電率を有する液晶性化合物が好ましい。

[0008] これまでに、大きな誘電率異方性を有する液晶性化合物として、CF_2O結合基を有する液晶性化合物が種々合成されており、そのうちのいくつかは実用的に用いられている。しかし、これらの化合物は短軸方向の誘電率が十分に大きくない。このような状況から、上記の物性（１）～（９）に関して優れた物性と適切なバランスを有する化合物、とりわけ大きな誘電率異方性（Δε）と、短軸方向の大きな誘電率を併せ持つ化合物の開発が望まれている。

先行技術文献

特許文献

[0009] 特許文献1：国際公開第９６／０１１８９７号

特許文献2：特開平１０－２０４０１６号公報

特許文献3：独国特許出願公開第４００６９２１号明細書

特許文献4：特開２００１－１３９５１１号公報

特許文献5：特開２００２－８０４５２号公報

特許文献6：特開２００２－３２７１７５号公報

発明の概要

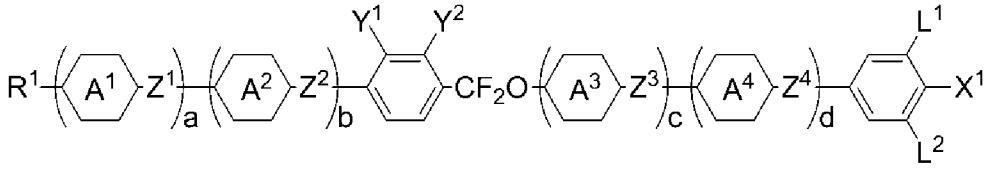
発明が解決しようとする課題

[0010] 本発明の第一の課題は、光に対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、短軸方向の大きな誘電率、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性などの物性の少なくとも１つを充足する液晶性化合物を提供することである。特に大きな誘電率異方性と短軸方向の大きな誘電率を併せ持つ化合物を提供することである。第二の課題は、この化合物を含有し、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、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、短軸方向の大きな誘電率、適切な弾性定数などの

物性の少なくとも１つを充足する液晶組成物を提供することである。この課題は、少なくとも２つの物性に関して適切なバランスを有する液晶組成物を提供することである。第三の課題は、この組成物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、および長い寿命を有する液晶表示素子を提供することである。

課題を解決するための手段

[0011] 本発明は、式（１）で表される化合物、この化合物を含有する液晶組成物、およびこの組成物を含む液晶表示素子に関する。



(1)

式（１）において、

R^1は、炭素数１～１５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－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環A^1、環A^2、環A^3、および環A^4は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、２，６，７－トリオキサビシクロ[２．２．２]オクタン－１，４－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；

Z^1、Z^2、Z^3、およびZ^4は独立して、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；

X^1は、ハロゲン、－Ｃ≡Ｎ、－Ｎ＝Ｃ＝Ｓ、または少なくとも１つの水素

がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシであり；

L^1およびL^2は独立して、水素またはフッ素であり；

Y^1およびY^2は独立して、フッ素または塩素であり；

ａ、ｂ、ｃ、およびｄは独立して、０または１であり、ａ、ｂ、ｃ、およびｄの和は、０、１、２、または３であり、

X^1が、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシであるときは、L^1はフッ素である。

発明の効果

[0012] 本発明の第一の長所は、光に対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性、短軸方向の大きな誘電率などの物性の少なくとも１つを充足する液晶性化合物を提供することである。特に大きな誘電率異方性と短軸方向の大きな誘電率とを併せ持つ化合物を提供することである。第二の長所は、この化合物を含有し、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、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、短軸方向の大きな誘電率、適切な弾性定数などの物性の少なくとも１つを充足する液晶組成物を提供することである。第三の長所は、この組成物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、および長い寿命を有する液晶表示素子を提供することである。

発明を実施するための形態

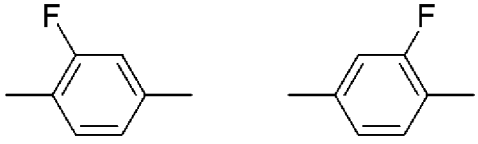
[0013] この明細書における用語の使い方は次のとおりである。液晶性化合物は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物、および液晶相を有しないが、上限温度、下限温度、粘度、誘電率異方性のような組成物の物性を調節する目的で添加する化合物の総称である。これらの化合物は、例えば、１，４－シクロヘキシレンや１，４－フェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状（rod like）である。このような液晶性化合物を混合することによって液晶組成物が調製される。液晶性化合物の割合（含有量）は、この液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。この組成物に、重合可能な化合物、重合開始剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤、色素のような添加物が必要に応じて添加される。添加物の割合（添加量）は、液晶性化合物の割合と同様に、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。重量百万分率（ｐｐｍ）が用いられることもある。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、液晶組成物、液晶表示素子をそれぞれ化合物、組成物、素子と略すことがある。透明点は、液晶性化合物における液晶相－等方相の転移温度である。液晶相の下限温度は、液晶性化合物における固体－液晶相（スメクチック相、ネマチック相など）の転移温度である。ネマチック相の上限温度は、液晶組成物におけるネマチック相－等方相の転移温度であり、上限温度と略すことがある。ネマチック相の下限温度を下限温度と略すことがある。

[0014] 式（１）で表される化合物を化合物（１）と略すことがある。この略記は式（２）などで表される化合物にも適用することがある。式（１）から式（１５）において、六角形で囲んだA^1、B^1、C^1などの記号はそれぞれ環A^1、環B^1、環C^1などに対応する。末端基R^{11}の記号を複数の化合物に用いた。これらの化合物において、任意の２つのR^{11}が表す２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。例えば、化合物（２）のR^{11}がエチルであり、化合物（３）のR^{11}がエチルであるケースがある。化合物（２）のR^{11}がエチルであり、化合物（３）のR^{11}がプロピルであるケースもある

。このルールは、他の末端基、環などの記号にも適用される。式（５）において、ｉが２のとき、２つの環Ｃ[1]が存在する。この化合物において、２つの環Ｃ[1]が表す２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。このルールは、ｉが２より大きいときの任意の２つにも適用される。このルールは、他の環、結合基などの記号にも適用される。

[0015] 「少なくとも１つの“Ａ”は、“Ｂ”で置き換えられてもよい」の表現は、“Ａ”の数が１つのとき、“Ａ”の位置は任意であり、“Ａ”の数が２つ以上のときも、それらの位置は制限なく選択できることを意味する。「少なくとも１つのＡが、Ｂ、ＣまたはＤで置き換えられてもよい」という表現は、任意のＡがＢで置き換えられる場合、任意のＡがＣで置き換えられる場合、および任意のＡがＤで置き換えられる場合、さらに複数のＡがＢ、Ｃ、Ｄの少なくとも２つで置き換えられる場合を含むことを意味する。例えば、少なくとも１つの－CH_2－が－Ｏ－または－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよいアルキルには、アルキル、アルケニル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシアルケニル、アルケニルオキシアルキルが含まれる。なお、連続する２つの－CH_2－が－Ｏ－で置き換えられて、－Ｏ－Ｏ－のようになることは好ましくない。アルキルなどにおいて、メチル部分（－CH_2－Ｈ）の－CH_2－が－Ｏ－で置き換えられて－Ｏ－Ｈになることも好ましくない。

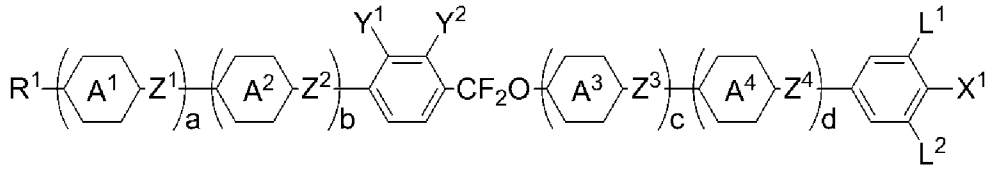
[0016] ２－フルオロ－１，４－フェニレンは、下記の２つの二価基を意味する。化学式において、フッ素は左向き（Ｌ）であってもよいし、右向き（Ｒ）であってもよい。このルールは、テトラヒドロピラン－２，５－ジイルのような、非対称の二価の環にも適用される。



（Ｌ） （Ｒ）

[0017] 本発明は、下記の項１～項１４に記載された内容を包含する。

[0018] 項１． 式（１）で表される化合物。



(1)

式（１）において、

Ｒ[1]は、炭素数１～１５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－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環Ａ[1]、環Ａ[2]、環Ａ[3]、および環Ａ[4]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、２，６，７－トリオキサビシクロ[２．２．２]オクタン－１，４－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；

Ｚ[1]、Ｚ[2]、Ｚ[3]、およびＺ[4]は独立して、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ$_2$Ｏ－、－ＯＣＦ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；

Ｘ[1]は、ハロゲン、－Ｃ≡Ｎ、－Ｎ＝Ｃ＝Ｓ、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシであり；

Ｌ[1]およびＬ[2]は独立して、水素またはフッ素であり；

Ｙ[1]およびＹ[2]は独立して、フッ素または塩素であり；

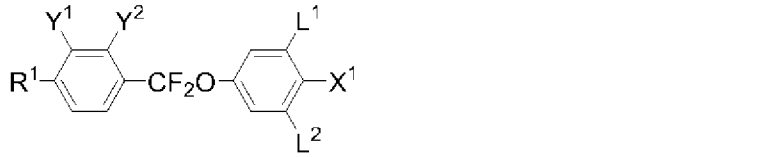
ａ、ｂ、ｃ、およびｄは独立して、０または１であり、ａ、ｂ、ｃ、およびｄの和は、０、１、２、または３であり、

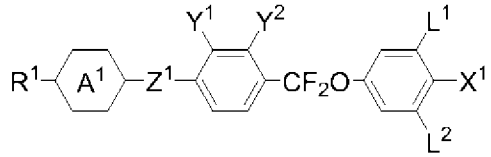
X^1が、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシであるときは、L^1はフッ素である。

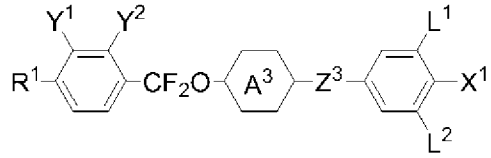
[0019] 項２．　項１に記載の式（１）において、R^1が、炭素数１～１５のアルキル、炭素数２～１５のアルケニル、炭素数１～１４のアルコキシ、または炭素数２～１４のアルケニルオキシであり；X^1が、フッ素、塩素、－Ｃ≡Ｎ、－Ｎ＝Ｃ＝Ｓ、$-CH_2F$、$-CHF_2$、$-CF_3$、$-(CH_2)_2-F$、$-CH_2CF_3$、$-CF_2CF_3$、$-(CH_2)_3-F$、$-(CH_2)_2-CF_3$、$-(CF_2)_3-F$、$-(CH_2)_4-F$、$-(CH_2)_3-CF_3$、$-(CF_2)_4-F$、$-(CF_2)_5-F$、$-(CF_2)_6-F$、$-(CF_2)_7-F$、$-OCH_2F$、$-OCHF_2$、$-OCF_3$、$-O-(CH_2)_2-F$、$-OCH_2CF_3$、$-OCF_2CF_3$、$-O-(CH_2)_3-F$、$-O-(CH_2)_2-CF_3$、$-O-(CF_2)_3-F$、$-O(CH_2)_4-F$、$-O-(CH_2)_3-CF_3$、$-O-(CF_2)_4-F$、$-O-(CF_2)_5-F$、$-O-(CF_2)_6-F$、$-CH=CHF$、$-CH=CF_2$、$-CF=CHF$、$-CF=CF_2$、$-CH=CHCH_2F$、$-CH=CHCF_3$、$-CF=CHCF_3$、$-CF=CFCF_3$、$-(CH_2)_2-CH=CF_2$、$-(CH_2)_2-CF=CF_2$、$-(CH_2)_2-CH=CHCF_3$、$-(CH_2)_2-CF=CHCF_3$、または$-(CH_2)_2-CF=CFCF_3$である項１に記載の化合物。

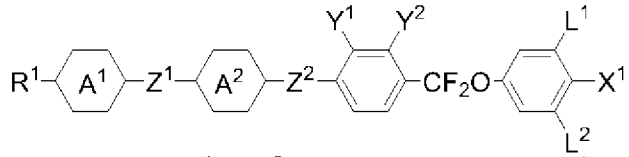
[0020] 項３．　項１に記載の式（１）において、R^1が、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、炭素数１～９のアルコキシ、または炭素数２～９のアルケニルオキシであり；X^1が、フッ素、塩素、－Ｃ≡Ｎ、$-CF_3$、$-CHF_2$、$-OCF_3$、$-OCHF_2$、$-CH=CHCF_3$、$-CF=CHCF_3$、または$-CF=CFCF_3$である項１に記載の化合物。

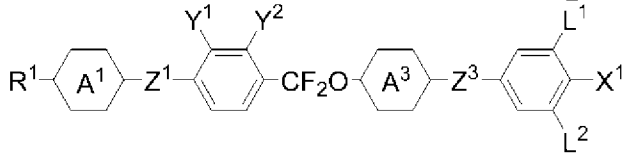
[0021] 項４．　式（１－１）～（１－８）のいずれか１つで表される、項１に記載の化合物。

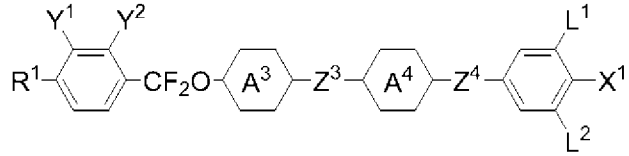

(1-1)

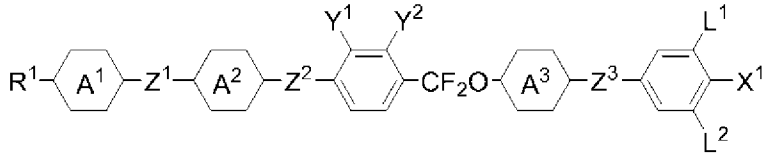

(1-2)

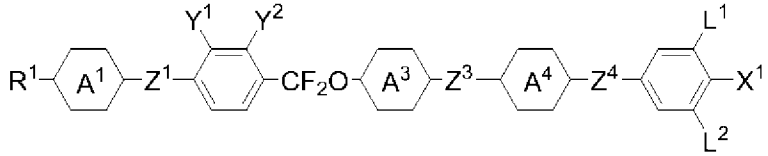

(1-3)


(1-4)


(1-5)


(1-6)


(1-7)


(1-8)

式（１－１）～（１－８）において、

Ｒ[1]は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

環Ａ[1]、環Ａ[2]、環Ａ[3]、および環Ａ[4]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり；

Ｚ[1]、Ｚ[2]、Ｚ[3]、およびＺ[4]は独立して、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－ＣＯ

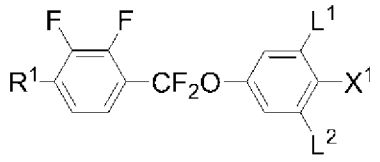
Ｏ－、－ＣＦ$_2$Ｏ－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、または－ＯＣＨ$_2$－であり；

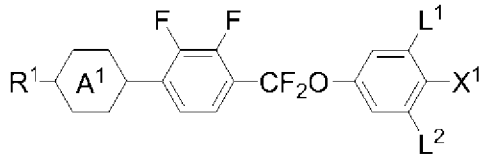
Ｘ^{1}は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；

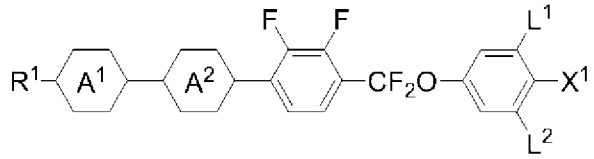
Ｌ^{1}およびＬ^{2}は独立して、水素またはフッ素であり；

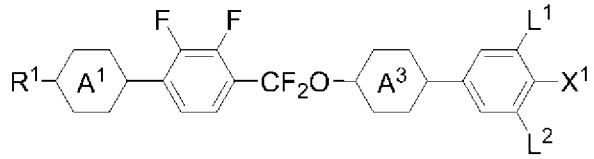
Ｙ^{1}およびＹ^{2}は独立して、フッ素または塩素である。

[0022] 項５．　式（１－９）～（１－１２）のいずれか１つで表される、項１に記載の化合物。


(1-9)


(1-10)


(1-11)


(1-12)

式（１－９）～（１－１２）において、

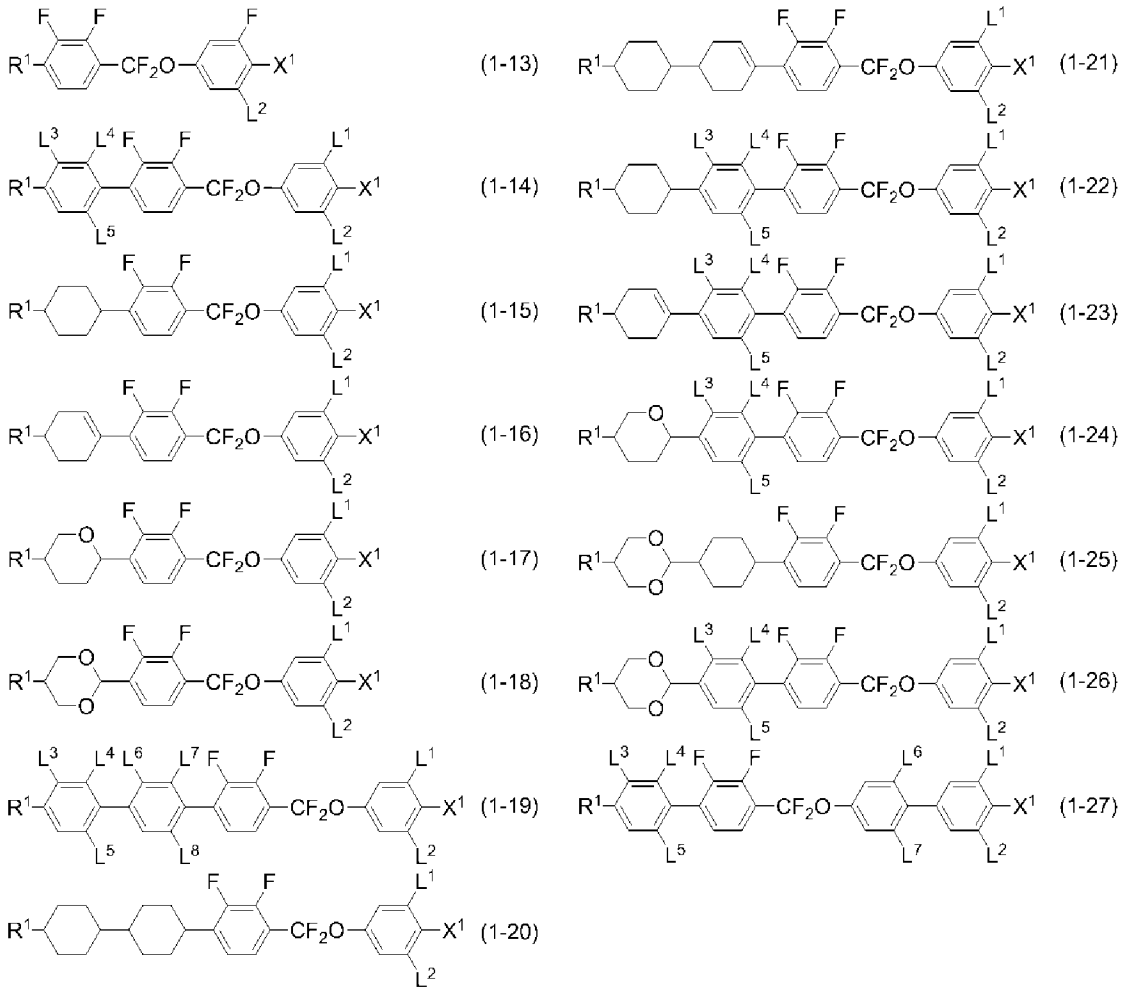
Ｒ^{1}は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

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

Ｘ^{1}は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；

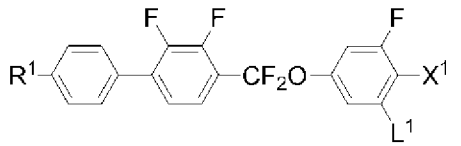
Ｌ^{1}およびＬ^{2}は独立して、水素またはフッ素である。

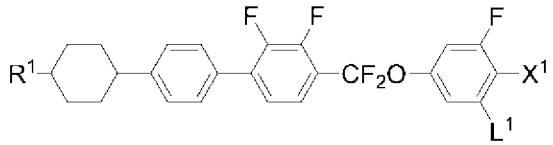
[0023] 項６．　式（１－１３）～（１－２７）のいずれか１つで表される、項１に記載の化合物。

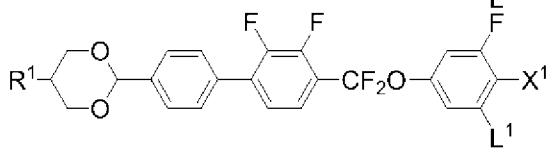


式（１－１３）～（１－２７）において、Ｒ[1]は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；Ｘ[1]は、フッ素、－ＣＦ[3]、または－ＯＣＦ[3]であり；Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、およびＬ[8]は独立して、水素またはフッ素である。

[0024] 項７．　式（１－２８）～（１－３０）のいずれか１つで表される、項１に記載の化合物。


(1-28)

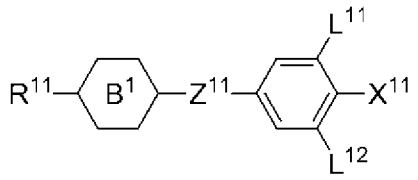

(1-29)

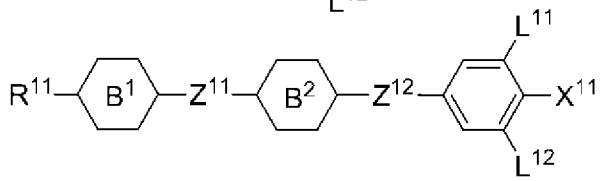

(1-30)

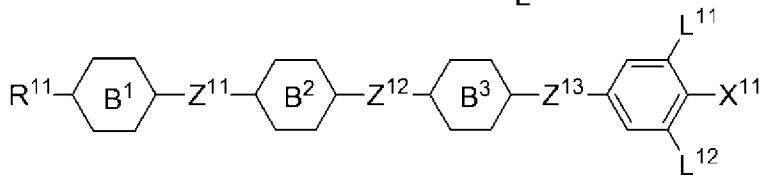
式（１－２８）～（１－３０）において、Ｒ[1]は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；Ｘ[1]は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；Ｌ[1]は、水素またはフッ素である。

[0025] 項８．　項１～項７のいずれか１項に記載の化合物の少なくとも１つを含有する液晶組成物。

[0026] 項９．　式（２）～（４）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、項８に記載の液晶組成物。


(2)


(3)


(4)

式（２）～（４）において、

Ｒ[11]は、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置き換

えられてもよく；

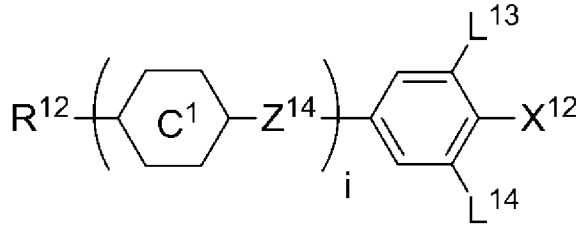
X^{11}は、フッ素、塩素、－OCF_3、－$OCHF_2$、－CF_3、－CHF_2、－CH_2F、－OCF_2CHF_2、または－OCF_2CHFCF_3であり；

環B^1、環B^2、および環B^3は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

Z^{11}、Z^{12}およびZ^{13}は独立して、単結合、－CH_2CH_2－、－CH＝CH－、－C≡C－、－COO－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、または－$(CH_2)_4$－であり；

L^{11}およびL^{12}は独立して、水素またはフッ素である。

[0027] 項１０．　式（５）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、項８または項９に記載の液晶組成物。



(5)

式（５）において、

R^{12}は、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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、少なくとも１つの－CH_2－は－O－で置き換えられてもよく；

X^{12}は、－C≡Nまたは－C≡C－C≡Nであり；

環C^1は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

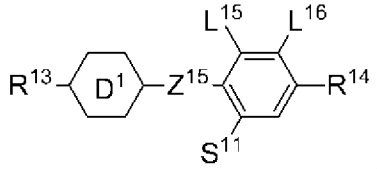
Z^{14}は、単結合、－CH_2CH_2－、－C≡C－、－COO－、－CF_2O－

、－ＯＣＦ$_2$－、または－ＣＨ$_2$Ｏ－であり；

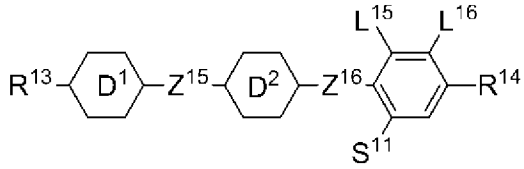
Ｌ^{13}およびＬ^{14}は独立して水素またはフッ素であり；

ｉは、１、２、３、または４である。

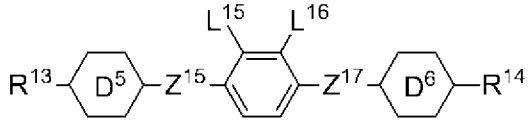
[0028] 項１１．　式（６）～（１２）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、項８～項１０のいずれか１項に記載の液晶組成物。



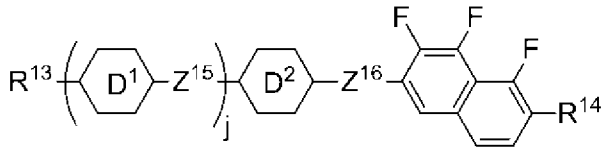
(6)



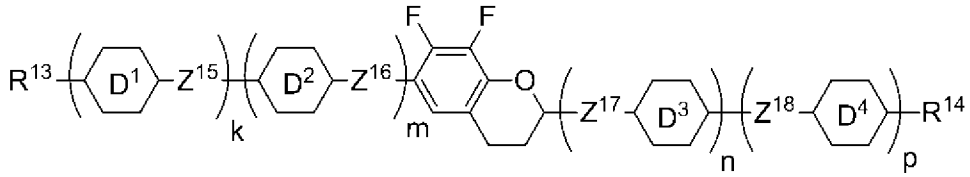
(7)



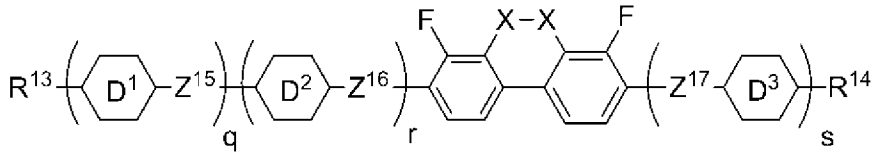
(8)



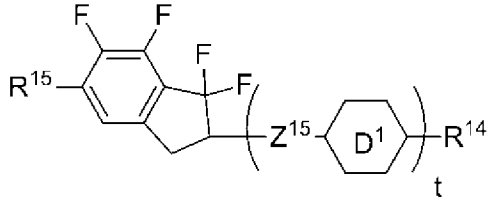
(9)



(10)



(11)



(12)

式（６）～（１２）において、

Ｒ^{13}およびＲ^{14}は独立して、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～

１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｒ^{15}は、水素、フッ素、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、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；

Ｓ^{11}は水素またはメチルであり；

Ｘは、－ＣＦ$_2$－、－Ｏ－、または－ＣＨＦ－であり；

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

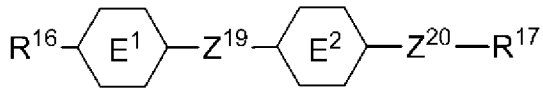
環Ｄ^5、および環Ｄ^{6}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン，テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、またはデカヒドロナフタレン－２，６－ジイルであり；

Ｚ^{15}、Ｚ^{16}、Ｚ^{17}、およびＺ^{18}は独立して、単結合、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＯＯ－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＦ$_2$－、または－ＯＣＦ$_2$ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－であり；

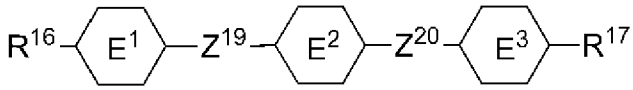
Ｌ^{15}およびＬ^{16}は独立して、フッ素または塩素であり；

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

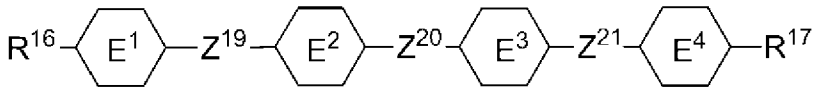
[0029] 項１２．　式（１３）～（１５）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、項８～項１１のいずれか１項に記載の液晶組成物。



(13)



(14)



(15)

式（１３）～（１５）において、

R^{16}およびR^{17}は独立して、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルまたはアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

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

Z^{19}、Z^{20}、およびZ^{21}は独立して、単結合、－CH_2CH_2－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、または－ＣＯＯ－である。

[0030] 項１３．　重合可能な化合物、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、および消泡剤の少なくとも１つをさらに含有する、項８～項１２に記載の液晶組成物。

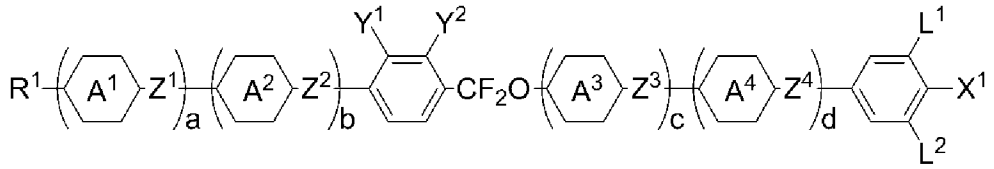
[0031] 項１４．　項８～項１３のいずれか１項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

[0032] 本発明の化合物、液晶組成物および液晶表示素子について、順に説明する。

[0033] １－１．化合物（１）

本発明の化合物（１）は、環として２位および３位の水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレンを有し、その隣の結合基としてジフルオロ

メチレンオキシを有しているので、大きな誘電率異方性と、短軸方向の大きな誘電率を併せ持つという特徴を有する。本発明の化合物（１）の好ましい例について説明する。化合物（１）における末端基、環構造、結合基、および置換基の好ましい例は、化合物（１）の下位式にも適用される。



(1)

式（１）において、

Ｒ[1]は、炭素数１～１５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－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[0034] このような末端基Ｒ[1]の例は、アルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシアルコキシ、アルキルチオ、アルキルチオアルコキシ、アルケニル、アルケニルオキシ、アルケニルオキシアルキル、アルコキシアルケニル、およびアルケニルチオである。これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。好ましいハロゲンは、フッ素および塩素である。さらに好ましいハロゲンはフッ素である。これらの基は、直鎖または分岐鎖であり、シクロヘキシルのような環状基を含まない。これらの基において分岐鎖よりも直鎖の方が好ましい。

[0035] 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。－ＣＨ＝ＣＨＣＨ$_3$、－ＣＨ＝ＣＨＣ$_2$Ｈ$_5$、－ＣＨ＝ＣＨＣ$_3$Ｈ$_7$、－ＣＨ＝ＣＨＣ$_4$Ｈ$_9$、－Ｃ$_2$Ｈ$_4$ＣＨ＝ＣＨＣＨ$_3$、および－Ｃ$_2$Ｈ$_4$ＣＨ＝ＣＨＣ$_2$Ｈ$_5$のような奇数位に二重結合をもつアルケニルにおいてはトランス配置が好ましい。－ＣＨ$_2$ＣＨ＝ＣＨＣＨ$_3$、－ＣＨ$_2$ＣＨ＝ＣＨＣ$_2$Ｈ$_5$、および－ＣＨ$_2$ＣＨ＝ＣＨＣ$_3$Ｈ$_7$のような偶数位に二重結合をもつアルケニルにおいてはシス配置が好ましい。好ましい立体配置を有するアルケニル化合物

は、高い透明点または液晶相の広い温度範囲を有する。Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 109およびMol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 327、に詳細な説明がある。

[0036] アルキルの例は、－CH_3、－C_2H_5、－C_3H_7、－C_4H_9、－C_5H_{11}、－C_6H_{13}、－C_7H_{15}、－C_8H_{17}、－C_9H_{19}、－$C_{10}H_{21}$、－$C_{11}H_{23}$、－$C_{12}H_{25}$、－$C_{13}H_{27}$、－$C_{14}H_{29}$、および－$C_{15}H_{31}$である。

[0037] アルコキシの例は、－OCH_3、－OC_2H_5、－OC_3H_7、－OC_4H_9、－OC_5H_{11}、－OC_6H_{13}、－OC_7H_{15}、－OC_8H_{17}、－OC_9H_{19}、－$OC_{10}H_{21}$、－$OC_{11}H_{23}$、－$OC_{12}H_{25}$、－$OC_{13}H_{27}$、および－$OC_{14}H_{29}$である。

[0038] アルコキシアルキルの例は、－CH_2OCH_3、－$CH_2OC_2H_5$、－$CH_2OC_3H_7$、－$(CH_2)_2$－OCH_3、－$(CH_2)_2$－OC_2H_5、－$(CH_2)_2$－OC_3H_7、－$(CH_2)_3$－OCH_3、－$(CH_2)_4$－OCH_3、および－$(CH_2)_5$－OCH_3である。

[0039] アルケニルの例は、－$CH=CH_2$、－$CH=CHCH_3$、－$CH_2CH=CH_2$、－$CH=CHC_2H_5$、－$CH_2CH=CHCH_3$、－$(CH_2)_2$－$CH=CH_2$、－$CH=CHC_3H_7$、－$CH_2CH=CHC_2H_5$、－$(CH_2)_2$－$CH=CHCH_3$、および－$(CH_2)_3$－$CH=CH_2$である。

[0040] アルケニルオキシの例は、－$OCH_2CH=CH_2$、－$OCH_2CH=CHCH_3$、および－$OCH_2CH=CHC_2H_5$である。

[0041] 少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられたアルキルの例は、－CH_2F、－CHF_2、－CF_3、－$(CH_2)_2$－F、－CF_2CH_2F、－CF_2CHF_2、－CH_2CF_3、－CF_2CF_3、－$(CH_2)_3$－F、－$(CF_2)_3$－F、－CF_2CHFCF_3、－$CHFCF_2CF_3$、－$(CH_2)_4$－F、－$(CF_2)_4$－F、－$(CH_2)_5$－F、－$(CF_2)_5$－F、－CH_2Cl、－$CHCl_2$、－CCl_3、－$(CH_2)_2$－Cl、－CCl_2CH_2Cl、－CCl_2CHCl_2、－CH_2CCl_3、－CCl_2CCl_3、－$(CH_2)_3$－Cl、－$(CCl_2)_3$－Cl、－$CCl_2CHClCCl_3$、－$CHClCCl_2CCl$

$_3$、－（CH_2）$_4$－Cl、－（CCl_2）$_4$－Cl、－（CH_2）$_5$－Cl、および－（CCl_2）$_5$－Clである。

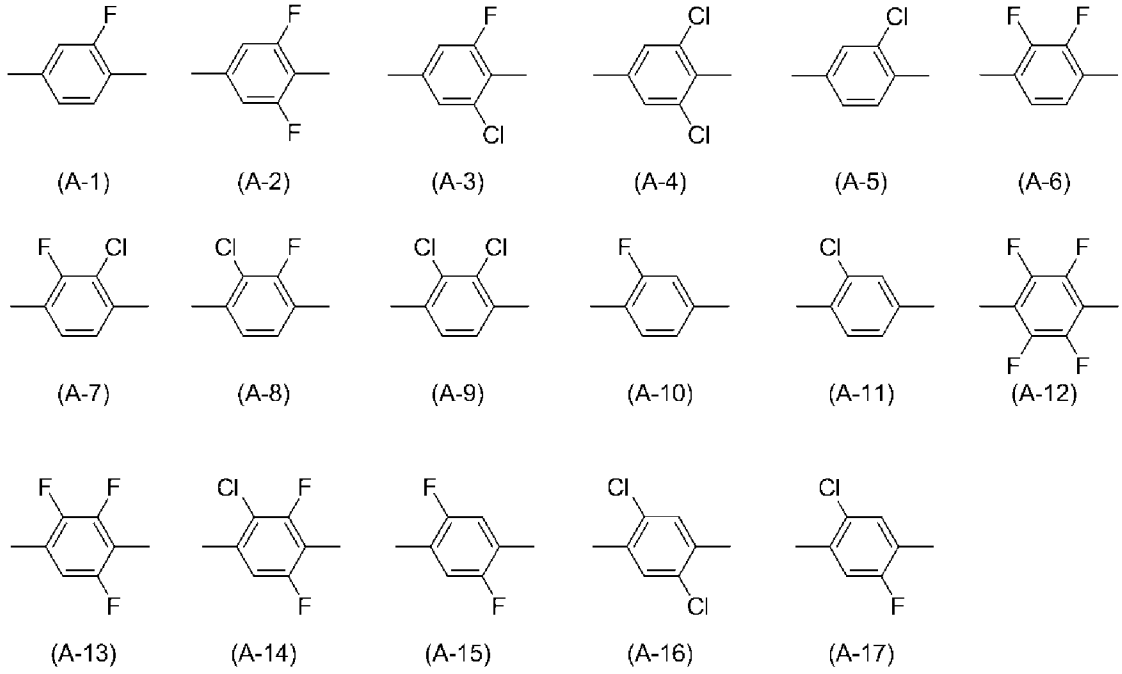
[0042] 少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられたアルコキシの例は、－OCH_2F、－$OCHF_2$、－OCF_3、－O－（CH_2）$_2$－F、－OCF_2CH_2F、－OCF_2CHF_2、－OCH_2CF_3、－O－（CH_2）$_3$－F、－O－（CF_2）$_3$－F、－OCF_2CHFCF_3、－$OCHFCF_2CF_3$、－O（CH_2）$_4$－F、－O－（CF_2）$_4$－F、－O－（CH_2）$_5$－F、－O－（CF_2）$_5$－F、－OCH_2Cl、－$OCHCl_2$、－$OCCl_3$、－O－（CH_2）$_2$－Cl、－$OCCl_2CH_2Cl$、－$OCCl_2CHCl_2$、－OCH_2CCl_3、－O－（CH_2）$_3$－Cl、－O－（CCl_2）$_3$－Cl、－$OCCl_2CHClCCl_3$、－$OCHClCCl_2CCl_3$、－O（CH_2）$_4$－Cl、－O－（CCl_2）$_4$－Cl、－O－（CH_2）$_5$－Cl、および－O－（CCl_2）$_5$－Clである。

[0043] 少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられたアルケニルの例は、－$CH=CHF$、－$CH=CF_2$、－$CF=CHF$、－$CH=CHCH_2F$、－$CH=CHCF_3$、－（CH_2）$_2$－$CH=CF_2$、－$CH_2CH=CHCF_3$、－$CH=CHCF_2CF_3$、－$CH=CHCl$、－$CH=CCl_2$、－$CCl=CHCl$、－$CH=CHCH_2Cl$、－$CH=CHCCl_3$、－（CH_2）$_2$－$CH=CCl_2$、－$CH_2CH=CHCCl_3$、および－$CH=CHCCl_2CCl_3$である。

[0044] R^1の好ましい例は、炭素数１～１５のアルキル、炭素数２～１５のアルケニル、および炭素数２～１５のアルコキシである。R^1のさらに好ましい例は、炭素数１～１０のアルキルおよび炭素数２～１０のアルケニルである。R^1の最も好ましい例は、－CH_3、－C_2H_5、－C_3H_7、－C_4H_9、－C_5H_{11}、－C_6H_{13}、－C_7H_{15}、－$CH=CH_2$、－$CH=CHCH_3$、－$CH_2CH=CH_2$、－$CH=CHC_2H_5$、－$CH_2CH=CHCH_3$、－（CH_2）$_2$－$CH=CH_2$、－$CH=CHC_3H_7$、－$CH_2CH=CHC_2H_5$、－（CH_2）$_2$－$CH=CHCH_3$、および－（CH_2）$_3$－$CH=CH_2$である。

[0045] 式（１）において、環Ａ[1]、環Ａ[2]、環Ａ[3]、および環Ａ[4]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、２，６，７－トリオキサビシクロ[２．２．２]オクタン－１，４－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルである。

[0046] 環Ａ[1]、環Ａ[2]、環Ａ[3]、または環Ａ[4]の好ましい例は、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、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、２，６，７－トリオキサビシクロ[２．２．２]オクタン－１，４－ジイルである。１，４－シクロヘキシレンには、シスおよびトランスの立体配置が存在する。高い上限温度の観点から、トランス配置が好ましい。少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレンの好ましい例は、環（Ａ－１）～（Ａ－１７）である。

[0047] 

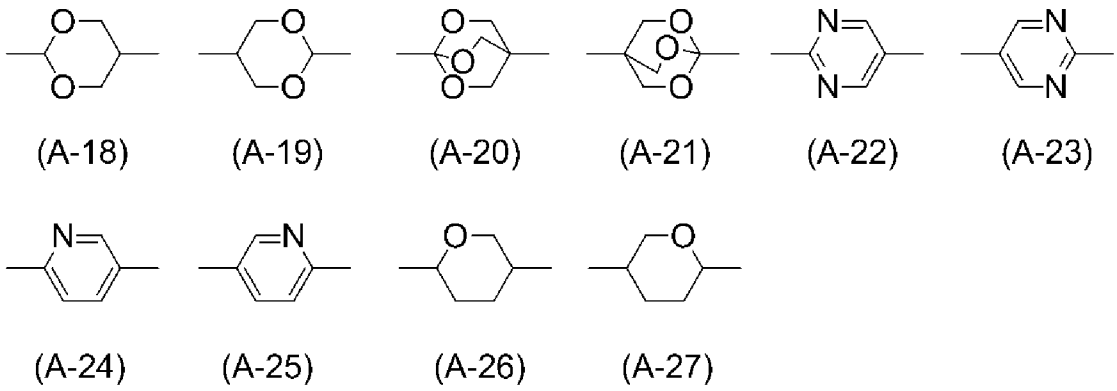
[0048] ２－フルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－１）は、左右対称ではない。化

学式において、フッ素が左末端基の側に位置する場合（左向き）と、右末端基の側に位置する場合（右向き）とが存在する。好ましい２－フルオロ－１，４－フェニレンは、誘電率異方性を大きくするために右向き（Ａ－１）である。このことは、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレンなどにも当てはまる。基（Ａ－１）～（Ａ－９）がより好ましい。

[0049] 少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレンのさらに好ましい例は、２－フルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－１）、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－２）、２－クロロ－６－フルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－３）、２，３－ジフルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－６）、および２－クロロ－３－フルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－７およびＡ－８）である。少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレンの最も好ましい例は、２－フルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－１）、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－２）、および２，３－ジフルオロ－１，４－フェニレン（Ａ－６）である。

[0050] １，３－ジオキサン－２，５－ジイルは、左右対称ではない。－Ｏ－が左末端基の側に位置する場合（左向き；Ａ－１８）と、右末端基の側に位置する場合（右向き；Ａ-１９）とがある。好ましい１，３－ジオキサン－２，５－ジイルは、誘電率異方性を大きくするために右向き（Ａ－１９）である。２，６，７－トリオキサビシクロ[２．２．２]オクタン－１，４－ジイル（Ａ－２０およびＡ－２１）、ピリミジン－２，５－ジイル（Ａ－２２およびＡ－２３）、およびピリジン－２，５－ジイル（Ａ－２４およびＡ－２５）においても、右向き（Ａ－２１、Ａ－２３、およびＡ－２５）が好ましい。テトラヒドロピラン－２，５－ジイル（Ａ－２６およびＡ－２７）においては、大きな誘電率異方性の観点からは右向き（Ａ－２７）が好ましく、短軸方向の大きな誘電率の観点からは左向き（Ａ－２６）が好ましい。

[0051]



(A-18) (A-19) (A-20) (A-21) (A-22) (A-23)

(A-24) (A-25) (A-26) (A-27)

[0052] 環A^1、環A^2、環A^3、および環A^4のさらに好ましい例は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、および１，３－ジオキサン－２，５－ジイルである。

[0053] 式（１）において、結合基Z^1、Z^2、Z^3、およびZ^4は独立して、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、または－ＣＦ＝ＣＦ－である。Z^1、Z^2、Z^3、およびZ^4の好ましい例は、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＯＯ－、－CF_2O－、－CH_2O－、および－OCH_2－である。Z^1、Z^2、Z^3、およびZ^4のさらに好ましい例は、単結合である。

[0054] 式（１）において、末端基X^1は、ハロゲン、－Ｃ≡Ｎ、－Ｎ＝Ｃ＝Ｓ、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシである。

[0055] 少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられたアルキルの例は、－CH_2F、－CHF_2、－CF_3、－（CH_2）$_2$－Ｆ、－CF_2CH_2F、－CF_2CHF_2、－CH_2CF_3、－CF_2CF_3、－（CH_2）$_3$－Ｆ、－（CF_2）$_2$－CF_3、－CF_2CHFCF_3、－$CHFCF_2CF_3$、－（CH_2）$_4$－Ｆ、－（CF_2）$_3$－CF_3、－（CH_2）$_5$－Ｆ、および－（CF_2）$_4$－CF_3である。

[0056] 少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられたアルコキシの例は、－ＯＣＨ$_2$Ｆ、－ＯＣＨＦ$_2$、－ＯＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_2$－Ｆ、－ＯＣＦ$_2$ＣＨ$_2$Ｆ、－ＯＣＦ$_2$ＣＨＦ$_2$、－ＯＣＨ$_2$ＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_3$－Ｆ、－Ｏ－（ＣＦ$_2$）$_2$－ＣＦ$_3$、－ＯＣＦ$_2$ＣＨＦＣＦ$_3$、－ＯＣＨＦＣＦ$_2$ＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_4$－Ｆ、－Ｏ－（ＣＦ$_2$）$_3$－ＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_5$－Ｆ、および－Ｏ－（ＣＦ$_2$）$_4$－ＣＦ$_3$である。

[0057] 少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられたアルケニルの例は、－ＣＨ＝ＣＨＦ、－ＣＨ＝ＣＦ$_2$、－ＣＦ＝ＣＨＦ、－ＣＦ＝ＣＦ$_2$、－ＣＨ＝ＣＨＣＨ$_2$Ｆ、－ＣＨ＝ＣＨＣＦ$_3$、－ＣＦ＝ＣＨＣＦ$_3$、－ＣＦ＝ＣＦＣＦ$_3$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＨ＝ＣＦ$_2$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ＝ＣＦ$_2$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＨ＝ＣＨＣＦ$_3$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ＝ＣＨＣＦ$_3$、および－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ＝ＣＦＣＦ$_3$である。

[0058] Ｘ^{1}の好ましい例は、フッ素、塩素、－Ｃ≡Ｎ、－Ｎ＝Ｃ＝Ｓ、－ＣＨ$_2$Ｆ、－ＣＨＦ$_2$、－ＣＦ$_3$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－Ｆ、－ＣＨ$_2$ＣＦ$_3$、－ＣＦ$_2$ＣＦ$_3$、－（ＣＨ$_2$）$_3$－Ｆ、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ$_3$、－（ＣＦ$_2$）$_3$－Ｆ、－（ＣＨ$_2$）$_4$－Ｆ、－（ＣＨ$_2$）$_3$－ＣＦ$_3$、－（ＣＦ$_2$）$_4$－Ｆ、－（ＣＦ$_2$）$_5$－Ｆ、－（ＣＦ$_2$）$_6$－Ｆ、－（ＣＦ$_2$）$_7$－Ｆ、－ＯＣＨ$_2$Ｆ、－ＯＣＨＦ$_2$、－ＯＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_2$－Ｆ、－ＯＣＨ$_2$ＣＦ$_3$、－ＯＣＦ$_2$ＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_3$－Ｆ、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＦ$_2$）$_3$－Ｆ、－Ｏ（ＣＨ$_2$）$_4$－Ｆ、－Ｏ－（ＣＨ$_2$）$_3$－ＣＦ$_3$、－Ｏ－（ＣＦ$_2$）$_4$－Ｆ、－Ｏ－（ＣＦ$_2$）$_5$－Ｆ、－Ｏ－（ＣＦ$_2$）$_6$－Ｆ、－ＣＨ＝ＣＨＦ、－ＣＨ＝ＣＦ$_2$、－ＣＦ＝ＣＨＦ、－ＣＦ＝ＣＦ$_2$、－ＣＨ＝ＣＨＣＨ$_2$Ｆ、－ＣＨ＝ＣＨＣＦ$_3$、－ＣＦ＝ＣＨＣＦ$_3$、－ＣＦ＝ＣＦＣＦ$_3$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＨ＝ＣＦ$_2$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ＝ＣＦ$_2$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＨ＝ＣＨＣＦ$_3$、－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ＝ＣＨＣＦ$_3$、および－（ＣＨ$_2$）$_2$－ＣＦ＝ＣＦＣＦ$_3$である。

[0059] Ｘ^{1}のさらに好ましい例は、フッ素、塩素、－Ｃ≡Ｎ、－ＣＨＦ$_2$、－ＣＦ$_3$、－ＯＣＨＦ$_2$、－ＯＣＦ$_3$、－ＣＨ＝ＣＨＣＦ$_3$、－ＣＦ＝ＣＨＣＦ$_3$、および－ＣＦ＝ＣＦＣＦ$_3$である。Ｘ^{1}の最も好ましい例は、フッ素、－ＣＦ$_3$、お

よび－ＯＣＦ$_3$である。

[0060] 式（１）において、Ｌ^{1}およびＬ^{2}は独立して、水素またはフッ素である。Ｌ^{1}およびＬ^{2}の好ましい組み合わせは、Ｌ^{1}およびＬ^{2}の両方がフッ素である、および一方が水素であり、他方がフッ素である。Ｌ^{1}およびＬ^{2}のさらに好ましい組み合わせは、Ｌ^{1}およびＬ^{2}の両方がフッ素である。Ｘ^{1}が、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシであるときは、Ｌ^{1}はフッ素である。

[0061] 式（１）において、Ｙ^{1}およびＹ^{2}は独立して、フッ素または塩素である。Ｙ^{1}およびＹ^{2}の好ましい組み合わせは、Ｙ^{1}およびＹ^{2}の両方がフッ素である、および一方がフッ素であり、他方が塩素である。Ｙ^{1}およびＹ^{2}のさらに好ましい組み合わせは、Ｙ^{1}およびＹ^{2}の両方がフッ素である。

[0062] 式（１）において、ａ、ｂ、ｃ、およびｄは独立して、０または１であり、ａ、ｂ、ｃ、およびｄの和は、０、１、２、または３である。好ましいａ、ｂ、ｃ、およびｄの組合せは、（ａ＝ｂ＝ｃ＝ｄ＝０）、（ａ＝１、ｂ＝ｃ＝ｄ＝０）、（ｃ＝１、ａ＝ｂ＝ｄ＝０）、（ａ＝ｂ＝１、ｃ＝ｄ＝０）、（ａ＝ｃ＝１、ｂ＝ｄ＝０）、および（ｃ＝ｄ＝１、ａ＝ｂ＝０）である。さらに好ましいａ、ｂ、ｃ、およびｄの組合せは、（ａ＝１、ｂ＝ｃ＝ｄ＝０）、（ａ＝ｂ＝１、ｃ＝ｄ＝０）、および（ａ＝ｃ＝１、ｂ＝ｄ＝０）である。

[0063] １－２．化合物（１）の物性

化合物（１）において、Ｒ^1、環Ａ^1～環Ａ^4、Ｚ^1～Ｚ^4、Ｘ^1、Ｌ^1、Ｌ^2、Ｙ^1、およびＹ^{2}の種類、ａ、ｂ、ｃ、およびｄの組合せを適切に選択することによって、透明点、光学的異方性、誘電率異方性などの物性を任意に調整することが可能である。化合物の物性に大きな差異がないので、化合物（１）は、^{2}Ｈ（重水素）、^{13}Ｃなどの同位体を天然存在比の量より多く含んでも

よい。R^1などの種類が化合物（１）の物性に及ぼす主要な効果を以下に説明する。

[0064] 左末端基R^1が直鎖であるときは、液晶相の温度範囲が広く、そして粘度が小さい。R^1が分岐鎖であるときは、他の液晶性化合物との相溶性がよい。R^1が光学活性である化合物は、キラルドーパントとして有用である。この化合物を組成物に添加することによって、液晶表示素子に発生するリバース・ツイスト・ドメイン（reverse twisted domain）を防止することができる。R^1が光学活性でない化合物は、組成物の成分として有用である。R^1がアルケニルであるとき、好ましい立体配置は二重結合の位置に依存する。好ましい立体配置を有するアルケニル化合物は、小さい粘度、高い上限温度または液晶相の広い温度範囲を有する。R^1がアルコキシであるときは、高い上限温度を有する。

[0065] 環A^1～環A^4のすべてが１，４－シクロヘキシレンであるときは、透明点が高く、粘度が小さい。環A^1～環A^4の少なくとも１つが１，４－フェニレン、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレンであるときは、光学的異方性が比較的大きく、そして配向秩序パラメーター（orientational order parameter）が比較的大きい。環A^1～環A^4のすべてが、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、またはこれらの組み合わせであるときは、光学的異方性が特に大きい。環A^1～環A^4の少なくとも１つが、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２－クロロ－１，４－フェニレン、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン、２，６－ジクロロ－１，４－フェニレン、２－クロロ－６－フルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、２，６，７－トリオキサビシクロ[２．２．２]オクタン－１，４－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルであるときは、誘電率異方性が大きい。環A^1～環A^4の少なくとも１つが、２，３－ジフルオロ－１，４－フェニレン、２，３－

ジクロロ－１，４－フェニレン、２－クロロ－３－フルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであるときは、短軸方向の誘電率が大きい。

[0066] 結合基Z^1～Z^4が、単結合、－CH_2CH_2－、－CH＝CH－、－CF_2O－、または－OCF_2－であるときは、粘度が小さい。Z^1～Z^4が、－CH＝CH－、－CH_2O－、または－OCH_2－であるときは、液晶相の温度範囲が広く、そして弾性定数（Ｋ）が大きい。Z^1～Z^4が、単結合、－CH＝CH－、－C≡C－、－COO－、－OCO－、または－CF＝CF－であるときは、透明点が高い。Z^1～Z^4が、－CH＝CH－、－C≡C－、または－CF＝CF－であるときは、光学的異方性が大きい。Z^1～Z^4が、－CF_2O－または－COO－であるときは、誘電率異方性が大きい。Z^1～Z^4が、－CH_2CH_2－、－CH_2O－、または－OCH_2－であるときは、短軸方向の誘電率が大きい。Z^1～Z^4が、単結合、－CH_2CH_2－、－CH_2O－、または－OCH_2－であるときは、化学的安定性が高い。

[0067] X^1が、フッ素、塩素、－C≡N、－N＝C＝S、－CF_3、－CF＝CHF、－CH＝CHCF$_3$、－CF＝CHCF$_3$、または－CF＝CFCF$_3$であるときは、誘電率異方性が特に大きい。X^1が、－C≡N、－N＝C＝S、－CH＝CHF、－$CH=CF_2$、－CF＝CHF、－$CF=CF_2$、－CH＝CHCH$_2$F、－CH＝CHCF$_3$、－CF＝CHCF$_3$、または－CF＝CFCF$_3$であるときは、透明点が高く光学的異方性が大きい。X^1がフッ素、塩素、－OCH_2F、－$OCHF_2$、または－OCF_3であるときは、他の液晶性化合物との相溶性が良好である。X^1がフッ素、－CF_3、－CF_2CF_3、－$(CF_2)_3$－F、－$(CF_2)_4$－F、－$(CF_2)_5$－F、－$(CF_2)_6$－F、－$(CF_2)_7$－F、－OCF_3、－OCF_2CF_3、－O－$(CF_2)_3$－F、－O－$(CF_2)_4$－F、－O－$(CF_2)_5$－F、または－O－$(CF_2)_6$－Fであるときは化学的安定性が高い。

[0068] L^1およびL^2の両方が水素であるときは透明点が高い。L^1およびL^2の一方がフッ素であるときは、誘電率異方性が比較的大きく、短軸方向の誘電率

が大きく、他の液晶性化合物との相溶性が良好である。L^1およびL^2の両方がフッ素であるときは、特に誘電率異方性が大きい。

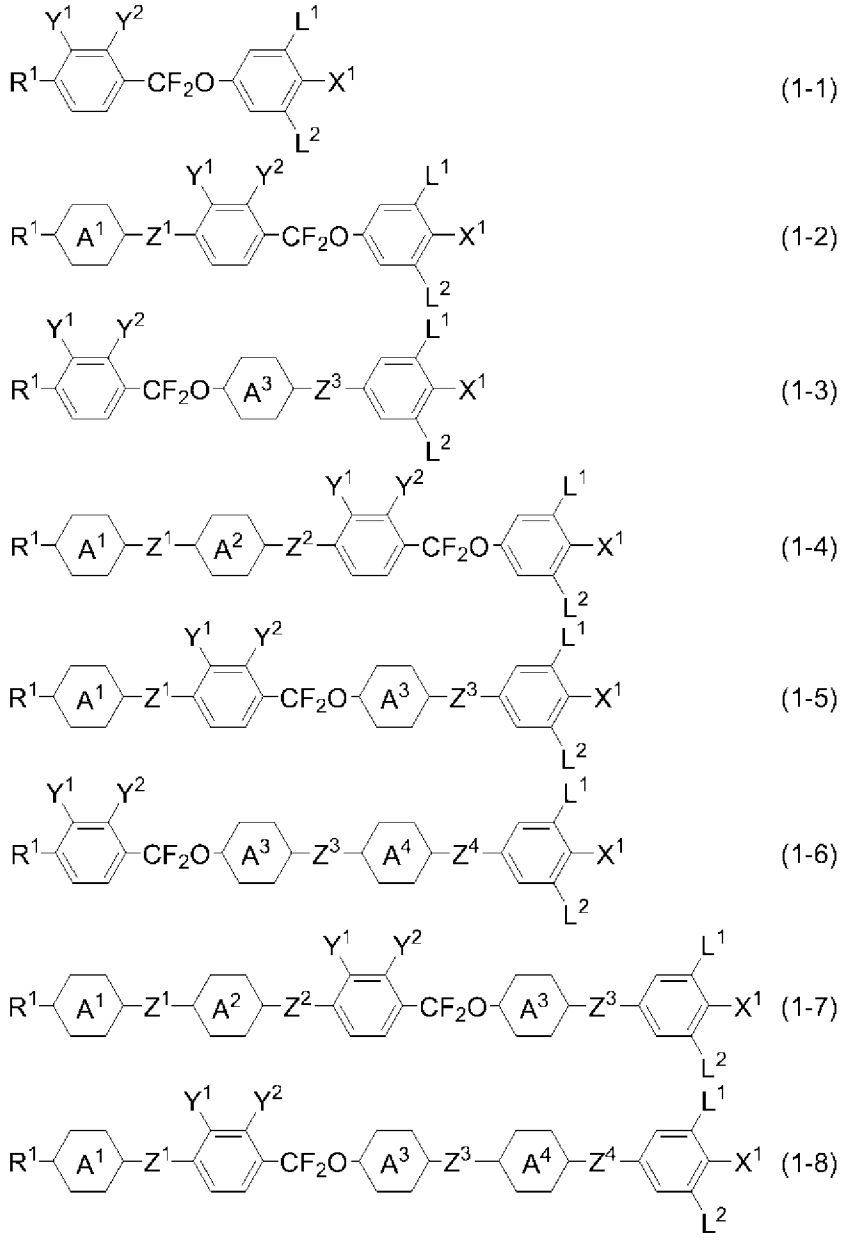
[0069] Y^1およびY^2の両方がフッ素であるとき、またはY^1がフッ素でY^2が塩素であるときは透明点が高い。Y^1およびY^2の両方がフッ素であるときは、粘度が小さく、化学的安定性が高い。

[0070] a、b、c、およびdの組合せが（a＝b＝c＝d＝0）であるときは、他の液晶性化合物との相溶性が良好であり、粘度が小さい。（a＝1、b＝c＝d＝0）であるとき、または（c＝1、a＝b＝d＝0）であるときは、他の液晶性化合物との相溶性が良好であり、誘電率異方性が大きく、短軸方向の誘電率が特に大きい。（a＝b＝1、c＝d＝0）であるときは透明点が高く、誘電率異方性が大きく、短軸方向の誘電率が大きい。（a＝c＝1、b＝d＝0）であるときは、誘電率異方性が大きく、他の液晶性化合物との相溶性が良好である。（a＝b＝c＝1、d＝0）であるとき、または（a＝1、b＝c＝d＝0）であるときは、透明点が特に高く、誘電率異方性が大きい。

[0071] 以上のように、環構造、末端基、結合基などの種類を適切に選択することによって目的の物性を有する化合物を得ることができる。したがって、化合物（1）は、PC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、FFS、VAのようなモードの液晶表示素子に用いられる液晶組成物の成分として有用である。

[0072] 1－3．好ましい化合物

化合物（1）の好ましい例としては、式（1－1）～（1－8）で表される化合物を挙げることができる。



(1-1)

(1-2)

(1-3)

(1-4)

(1-5)

(1-6)

(1-7)

(1-8)

式（１－１）～（１－８）において、

Ｒ[1]は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

環Ａ[1]、環Ａ[2]、環Ａ[3]、および環Ａ[4]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり；

Ｚ[1]、Ｚ[2]、Ｚ[3]、およびＺ[4]は独立して、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－ＣＯ

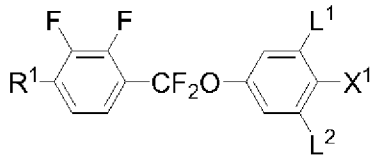
Ｏ－、－ＣＦ$_2$Ｏ－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、または－ＯＣＨ$_2$－であり；

Ｘ^{1}は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；

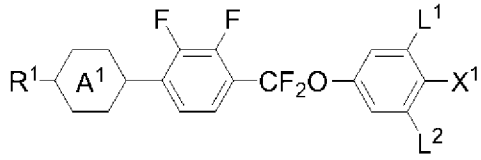
Ｌ^{1}およびＬ^{2}は独立して、水素またはフッ素であり；

Ｙ^{1}およびＹ^{2}は独立して、フッ素または塩素である。

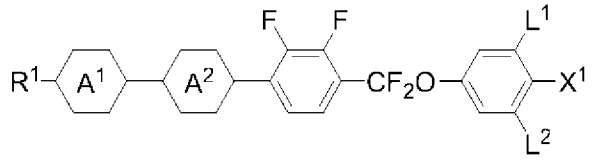
[0073] 化合物（１）のより好ましい例は、式（１－９）～（１－１２）で表される化合物である。



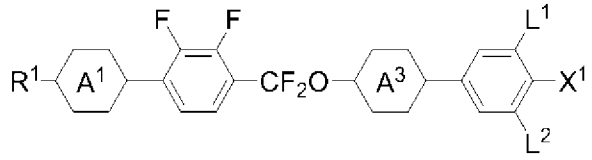
(1-9)



(1-10)



(1-11)



(1-12)

式（１－９）～（１－１２）において、

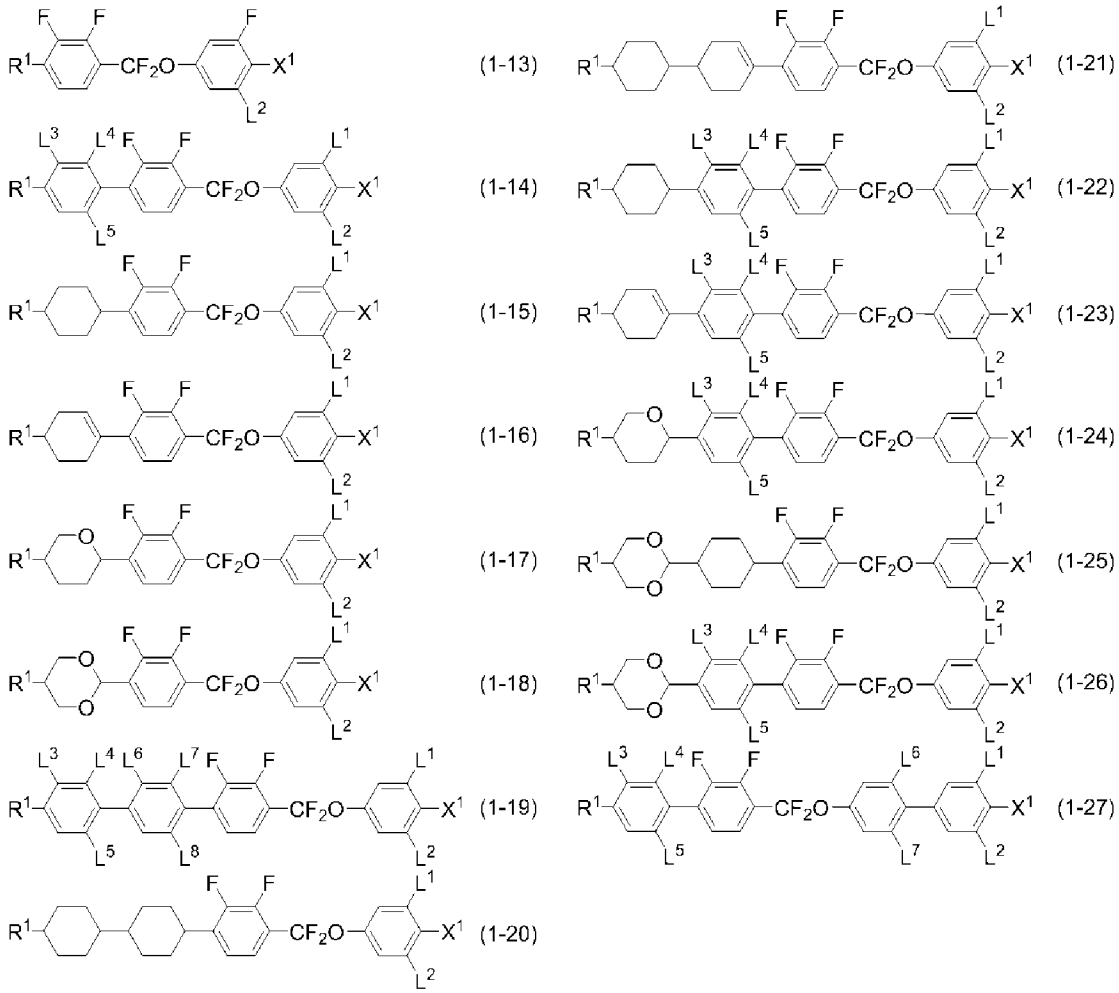
Ｒ^{1}は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

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

Ｘ^{1}は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；

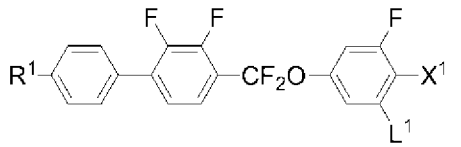
Ｌ^{1}およびＬ^{2}は独立して、水素またはフッ素である。

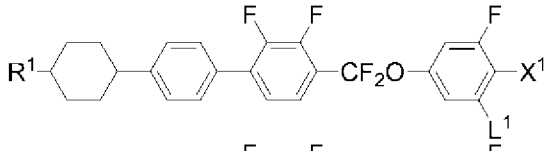
[0074] 化合物（１）のさらに好ましい例は、式（１－１３）～（１－２７）で表される化合物である。

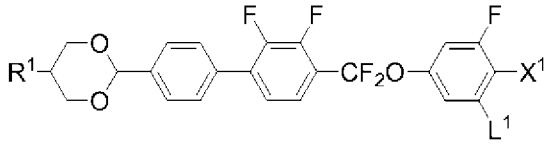


式（１－１３）～（１－２７）において、Ｒ[1]は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；Ｘ[1]は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、およびＬ[8]は独立して、水素またはフッ素である。

[0075] 化合物（１）の最も好ましい例は、式（１－２８）～（１－３０）で表される化合物である。


(1-28)


(1-29)


(1-30)

式（１－２８）～（１－３０）において、Ｒ[1]は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；Ｘ[1]は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；Ｌ[1]は、水素またはフッ素である。

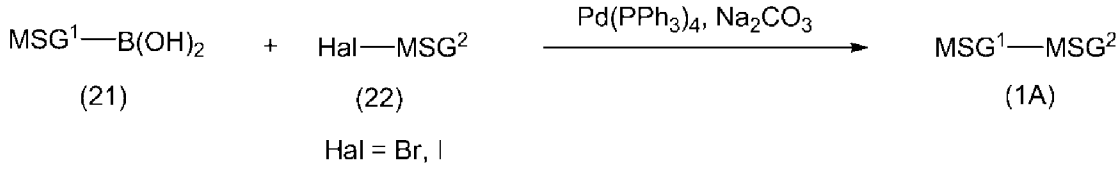
[0076] １－４．化合物（１）の合成

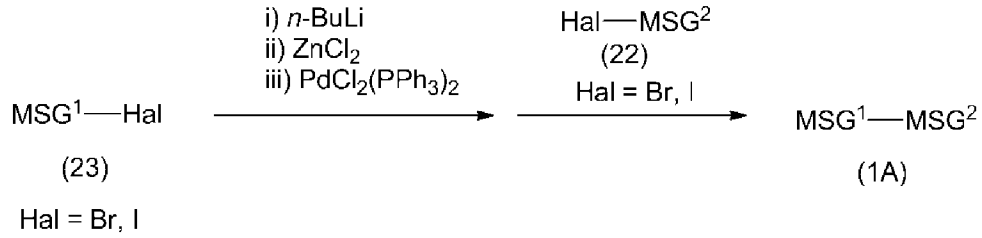
化合物（１）の合成法について説明する。化合物（１）は有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成できる。出発物に目的の末端基、環および結合基を導入する方法は、「オーガニック・シンセシス」（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc.）、「オーガニック・リアクションズ」（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc.）、「コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス」（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、「新実験化学講座」（丸善）などの成書に記載されている。

[0077] １－４－１．結合基の生成

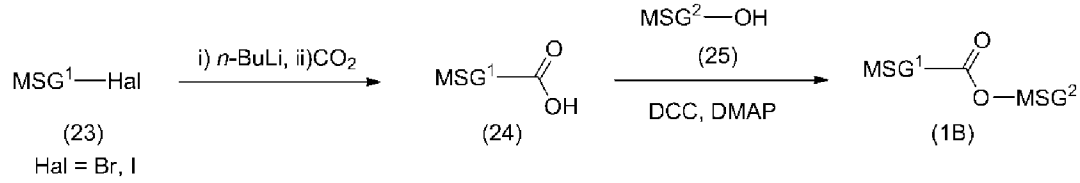
化合物（１）における結合基を生成する方法の例は、下記のスキームのとおりである。このスキームにおいて、ＭＳＧ[1]（またはＭＳＧ[2]）は、少なくとも１つの環を有する一価の有機基である。複数のＭＳＧ[1]（またはＭＳＧ[2]）が表す一価の有機基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。化合物（１Ａ）～（１Ｇ）は、化合物（１）または化合物（１）の中間体に相当する。

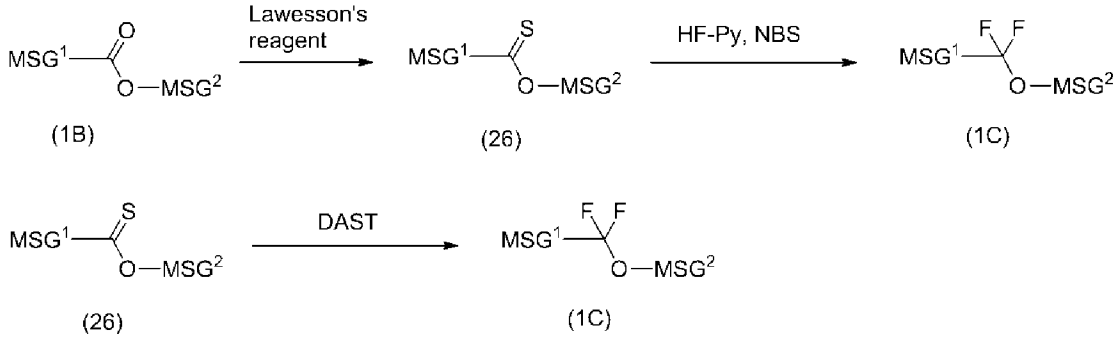
[0078]



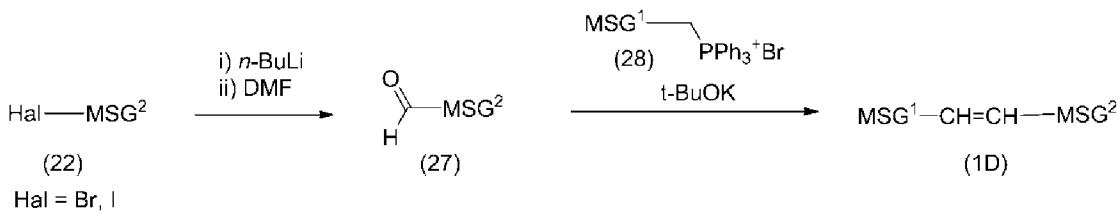


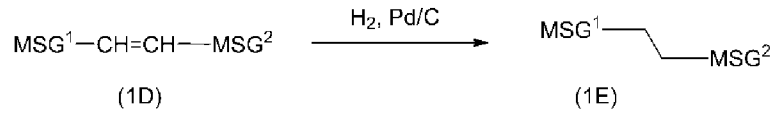
[0079]



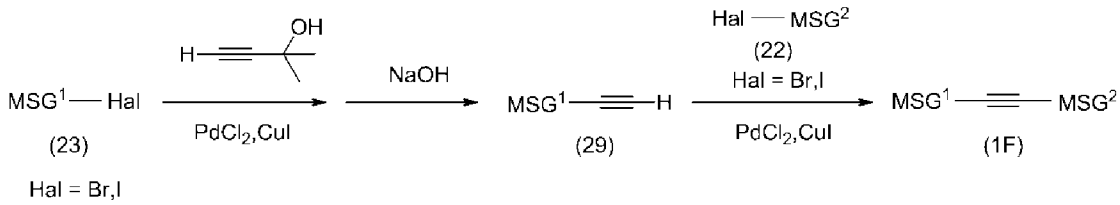


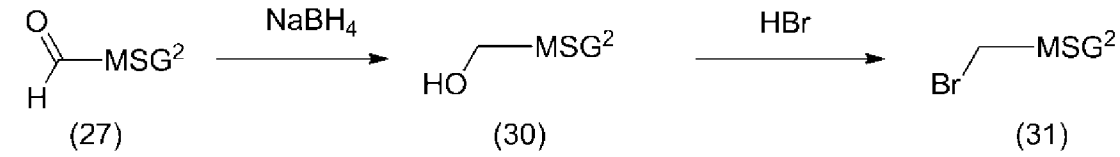
[0080]

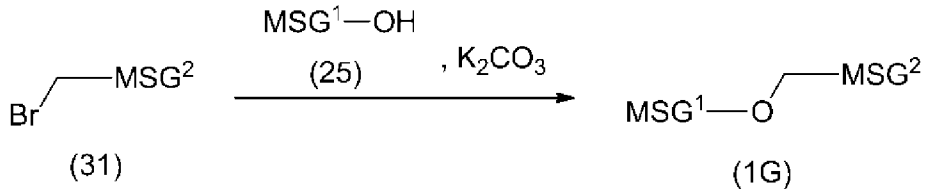


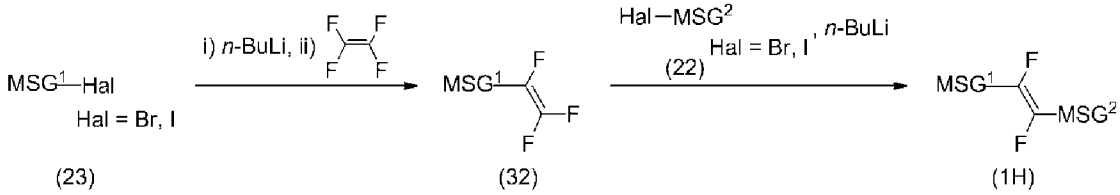


[0081]



[0082] 



[0083] 

[0084] （Ｉ）単結合の生成

アリールホウ酸（２１）と化合物（２２）を、炭酸塩、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム触媒の存在下で反応させ、化合物（１Ａ）を合成する。この化合物（１Ａ）は、化合物（２３）にｎ－ブチルリチウムを、次いで塩化亜鉛を反応させ、ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム触媒の存在下で化合物（２２）を反応させても合成される。

[0085] （ＩＩ）－ＣＯＯ－と－ＯＣＯ－の生成

化合物（２３）にｎ－ブチルリチウムを、次いで二酸化炭素を反応させ、カルボン酸（２４）を得る。このカルボン酸（２４）と、化合物（２１）から誘導したフェノール（２５）とをＤＣＣ（１，３－ジシクロヘキシルカルボジイミド）とＤＭＡＰ（４－ジメチルアミノピリジン）の存在下で脱水させて－ＣＯＯ－を有する化合物（１Ｂ）を合成する。この方法によって－ＯＣＯ－を有する化合物も合成する。

[0086] （ＩＩＩ）－CF_2O－と－OCF_2－の生成

化合物（１Ｂ）をローソン試薬で硫黄化し、化合物（２６）を得る。化合物（２６）をフッ化水素ピリジン錯体とＮＢＳ（Ｎ－ブロモスクシンイミド）でフッ素化し、－CF_2O－を有する化合物（１Ｃ）を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827.を参照。化合物（１Ｃ）は化合物（

２６）をＤＡＳＴ（（ジエチルアミノ）サルファートリフルオリド）でフッ素化しても合成される。W. H. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768.を参照。この方法によって－ＯＣＦ$_2$－を有する化合物も合成する。

[0087] （ＩＶ）－ＣＨ＝ＣＨ－の生成

化合物（２２）をｎ－ブチルリチウム、次いでＤＭＦ（Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド）と反応させてアルデヒド（２７）を得る。ホスホニウム塩（２８）とカリウムｔｅｒｔ－ブトキシドを反応させて発生させたリンイリドを、アルデヒド（２７）と反応させて化合物（１Ｄ）を合成する。反応条件によってはシス体が生成するので、必要に応じて公知の方法によりシス体をトランス体に異性化する。

[0088] （Ｖ）－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－の生成

化合物（１Ｄ）をパラジウム炭素触媒の存在下で水素化し、化合物（１Ｅ）を合成する。

[0089] （ＶＩ）－Ｃ≡Ｃ－の生成

ジクロロパラジウムとヨウ化銅の触媒存在下で、化合物（２３）に２－メチル－３－ブチン－２－オールを反応させたのち、塩基性条件下で脱保護して化合物（２９）を得る。ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウムとハロゲン化銅との触媒存在下、化合物（２９）を化合物（２２）と反応させて、化合物（１Ｆ）を合成する。

[0090] （ＶＩＩ）－ＣＨ$_2$Ｏ－と－ＯＣＨ$_2$－の生成

化合物（２７）を水素化ホウ素ナトリウムで還元して化合物（３０）を得る。これを臭化水素酸で臭素化して化合物（３１）を得る。炭酸カリウムの存在下、化合物（２５）と化合物（３１）を反応させて、化合物（１Ｇ）を合成する。この方法によって－ＯＣＨ$_2$－を有する化合物も合成する。

[0091] （ＶＩＩＩ）－ＣＦ＝ＣＦ－の生成

化合物（２３）をｎ－ブチルリチウムで処理したあと、テトラフルオロエチレンを反応させて化合物（３２）を得る。化合物（２２）をｎ－ブチルリチウムで処理したあと化合物（３２）と反応させて、化合物（１Ｈ）を合成

する。

[0092] １－４－２．環Ａ[1]および環Ａ[2]の生成

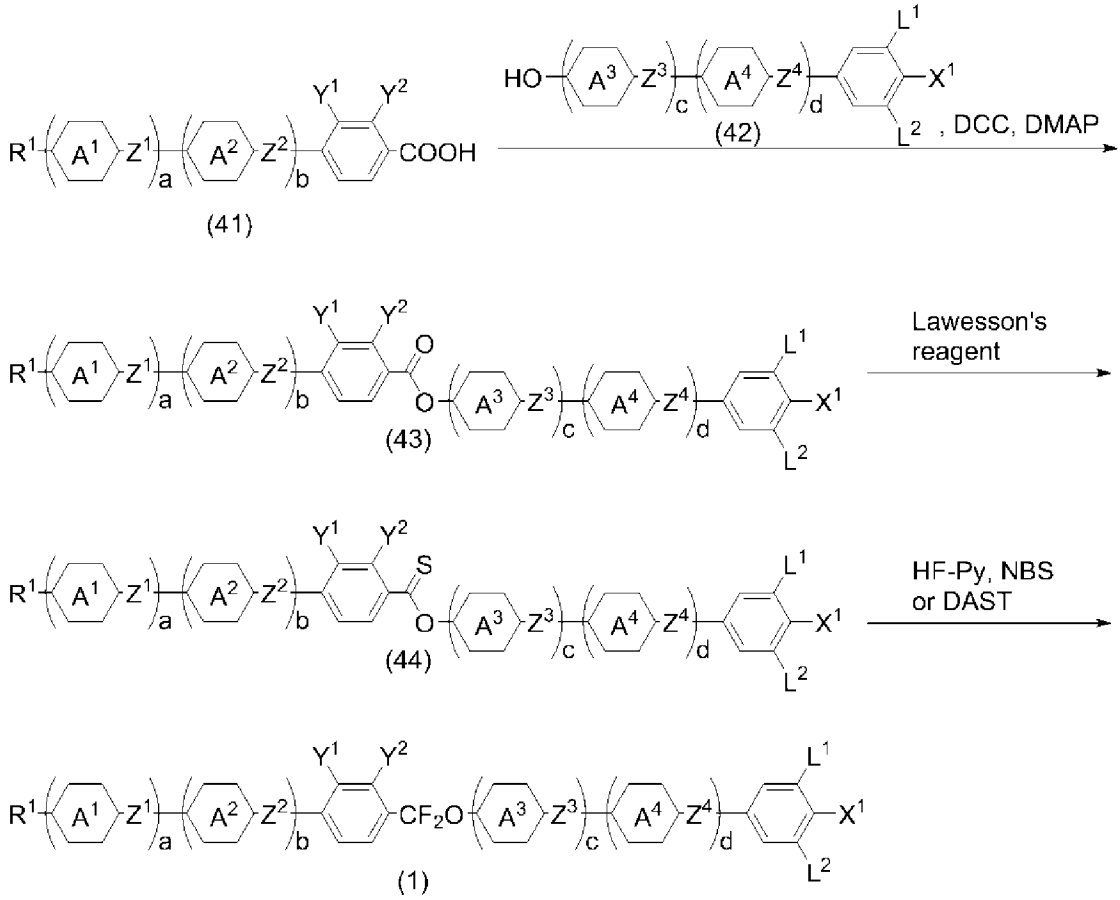
１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、２，６，７－トリオキサビシクロ［２．２．２］オクタン－１，４－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイルなどの環に関しては出発物が市販されているか、または合成法がよく知られている。

[0093] １－４－３．合成例

化合物（１）を合成する方法の例は、次のとおりである。これらの化合物において、Ｒ[1]、環Ａ[1]～環Ａ[4]、Ｚ[1]～Ｚ[4]、Ｘ[1]、Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｙ[1]、Ｙ[2]、ａ、ｂ、ｃ、およびｄの定義は、前記の項１と同一である。

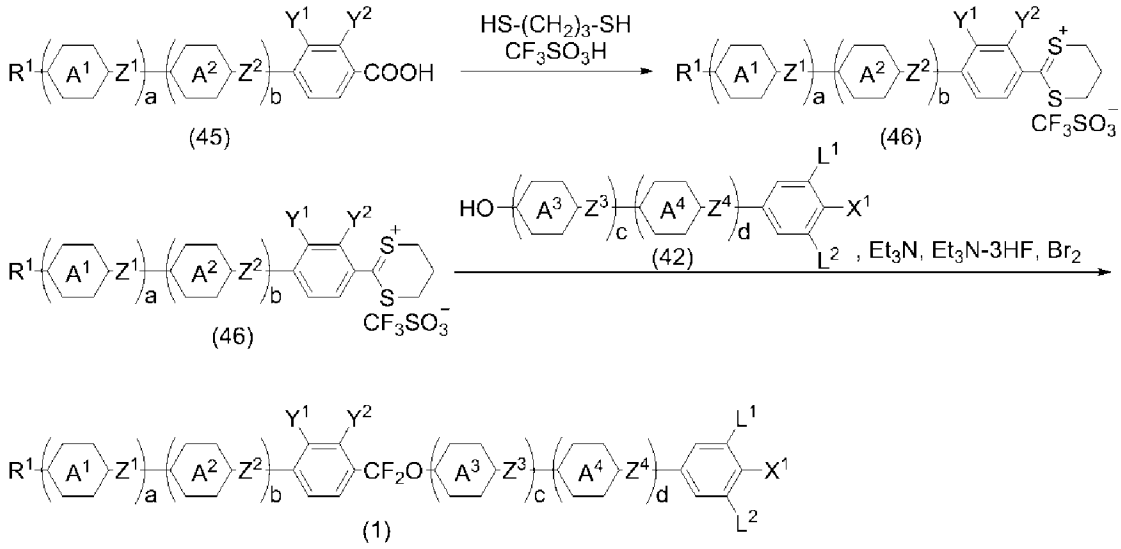
[0094] 化合物（１）は次の方法によって合成できる。公知の方法によって合成される化合物（４１）と、公知の方法によって合成される化合物（４２）とを、ＤＣＣとＤＭＡＰの存在下で脱水させて、化合物（４３）を得る。次に化合物（４３）を、ローソン試薬で硫黄化し、化合物（４４）を得る。次にフッ化水素ピリジン錯体とＮＢＳ、あるいはＤＡＳＴなどのフッ素化試薬を用いてフッ素化させることによって化合物（１）へと導くことができる。

[0095]



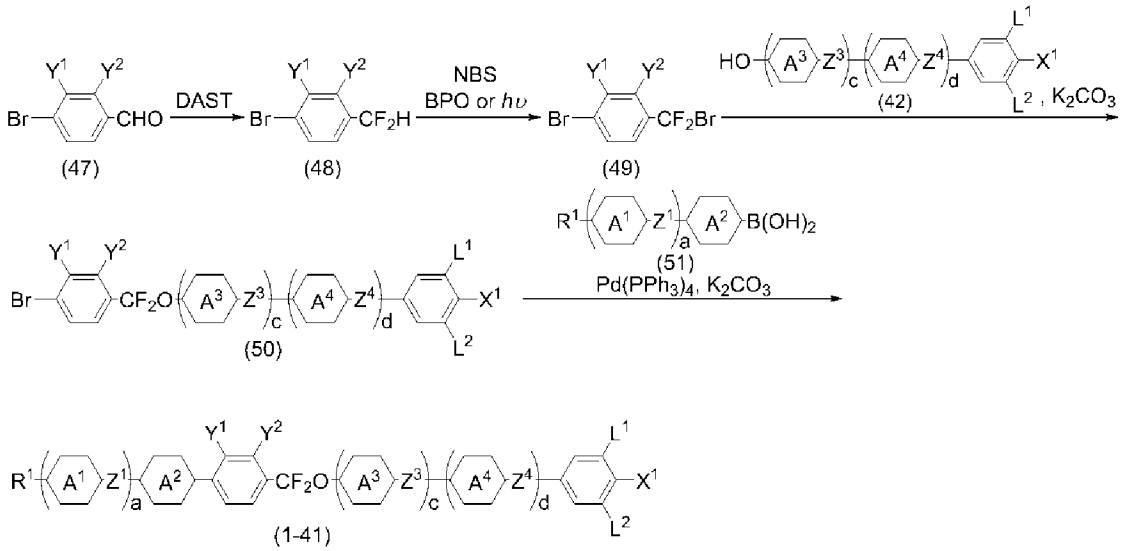
[0096] 化合物（１）は次の方法によって合成することもできる。公知の方法によって合成される化合物（４５）に対してプロパンジチオールおよびトリフルオロメタンスルホン酸を作用させることによって、化合物（４６）を得る。次に公知の方法によって合成される化合物（４２）と、化合物（４６）とを、トリエチルアミン、フッ化水素トリエチルアミン錯体、および臭素を用いて反応させることによって化合物（１）へと導くことができる。

[0097]



[0098] 化合物（１）において、ｂ＝１でＡ^{2}が１，４－フェニレンまたは少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレンであり、Ｚ^{2}が単結合である化合物（１－４１）は次の方法でも合成できる。公知の方法によって合成される化合物（４７）に対してＤＡＳＴなどのフッ素化試薬を作用させることによって、化合物（４８）を得る。次にＢＰＯ（過酸化ベンゾイル）などのラジカル開始剤の存在下、または光照射条件下で、ＮＢＳなどの臭素化剤を作用させることによって、化合物（４９）を得る。次に公知の方法によって合成される化合物（４２）と、化合物（４９）とを、炭酸カリウムなどの塩基の存在下で反応させることによって化合物（５０）を得る。次に公知の方法によって合成される化合物（５１）と化合物（５０）とを、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウムなどのパラジウム触媒および炭酸カリウムのような塩基の存在下で反応させて化合物（１－４１）へと導くことができる。

[0099]



[0100] ２．組成物（１）

本発明の液晶組成物（１）について説明をする。この組成物（１）は、少なくとも１つの化合物（１）を成分Ａとして含む。組成物（１）は、２つ以上の化合物（１）を含んでいてもよい。液晶性化合物の成分が化合物（１）のみであってもよい。組成物（１）は、化合物（１）の少なくとも１つを１～９９重量％の範囲で含有することが、優良な物性を発現させるために好ましい。誘電率異方性が正である組成物において、化合物（１）の好ましい含有量は５～６０重量％の範囲である。誘電率異方性が負である組成物において、化合物（１）の好ましい含有量は３０重量％以下である。組成物（１）は、化合物（１）と、本明細書中に記載しなかった種々の液晶性化合物とを含んでもよい。

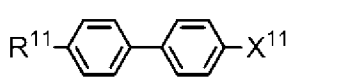
[0101] 好ましい組成物は、以下に示す成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥから選択された化合物を含有する。組成物（１）を調製するときには、例えば、化合物（１）の誘電率異方性を考慮して成分を選択することもできる。ＴＦＴ、ＩＰＳ、ＦＦＳなどのモード用に誘電率異方性が正の組成物を調製するとき、主要な成分は、成分Ａ、ＢおよびＥである。ＳＴＮ、ＴＮなどのモード用に誘電率異方性が正の組成物を調製するとき、主要な成分は、成分Ａ、ＣおよびＥである。ＶＡ、ＰＳＡなどのモード用に誘電率異方性が負の組成物を調製するとき、主要な成分は、成分ＤおよびＥであり、成分Ａは素子の電圧－透過

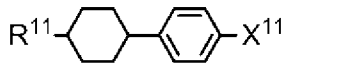
率曲線を調整する目的で添加される。成分を適切に選択した組成物は、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、および適切な弾性定数を有する。

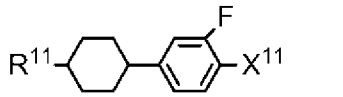
[0102] 成分Ｂは、化合物（２）～（４）である。成分Ｃは化合物（５）である。成分Ｄは、化合物（６）～（１２）である。成分Ｅは、化合物（１３）～（１５）である。これらの成分について、順に説明する。

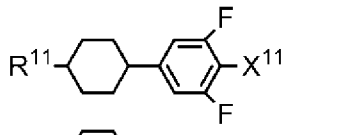
[0103] 成分Ｂは、右末端にハロゲンまたはフッ素含有基を有する化合物である。成分Ｂの好ましい例として、化合物（２－１）～（２－１６）、化合物（３－１）～（３－１１３）、化合物（４－１）～（４－５７）を挙げることができる。これらの化合物において、R^{11}およびX^{11}の定義は、前記の項９と同一である。

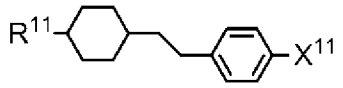
[0104]

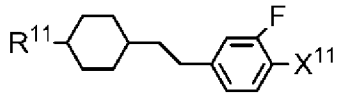

(2-1)

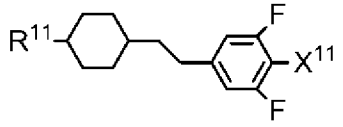

(2-2)

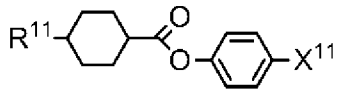

(2-3)

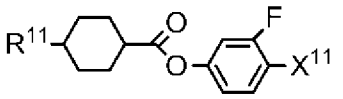

(2-4)

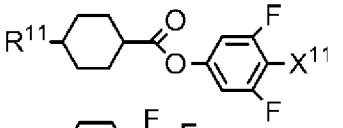

(2-5)

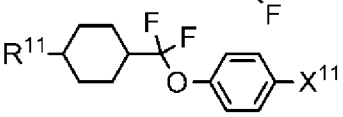

(2-6)

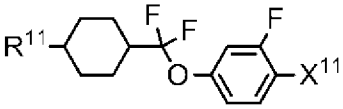

(2-7)

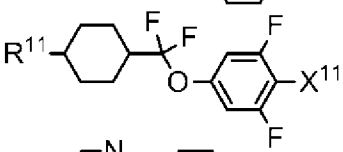

(2-8)

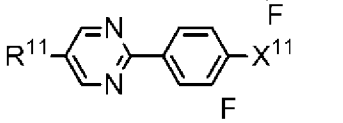

(2-9)

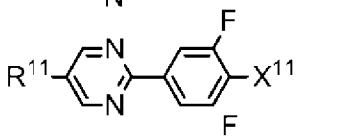

(2-10)

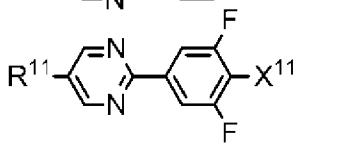

(2-11)


(2-12)

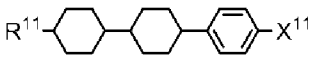

(2-13)

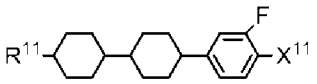

(2-14)

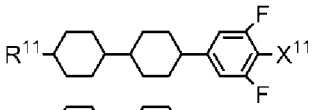

(2-15)

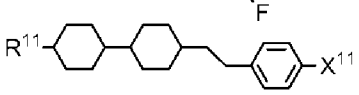

(2-16)

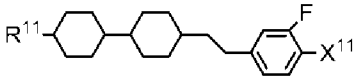
[0105]

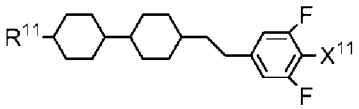

(3-1)

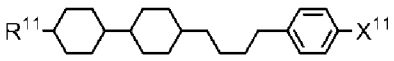

(3-2)

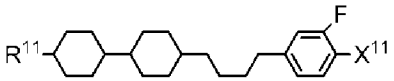

(3-3)

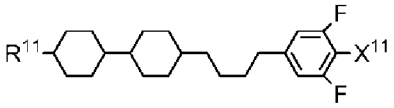

(3-4)

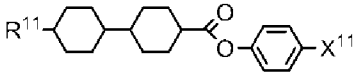

(3-5)

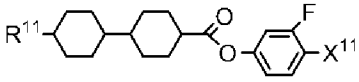

(3-6)

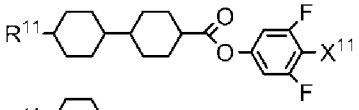

(3-7)

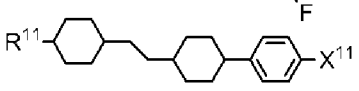

(3-8)

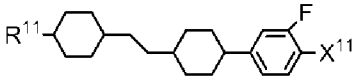

(3-9)

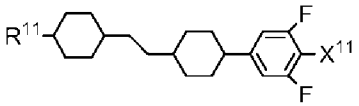

(3-10)

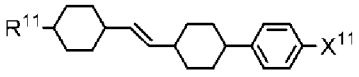

(3-11)

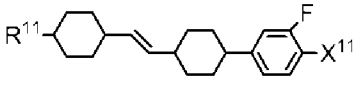

(3-12)

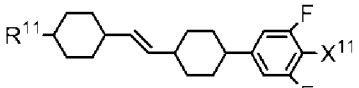

(3-13)

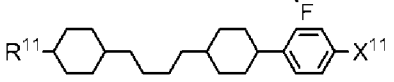

(3-14)

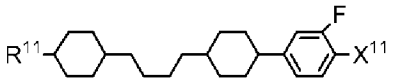

(3-15)

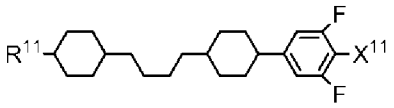

(3-16)

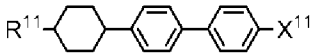

(3-17)

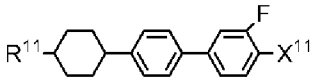

(3-18)

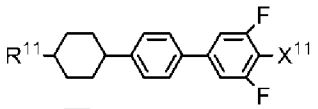

(3-19)

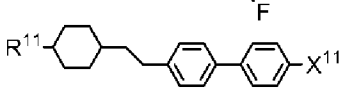

(3-20)

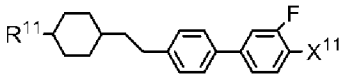

(3-21)

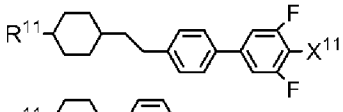

(3-22)

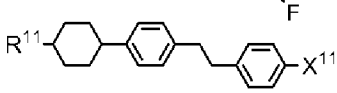

(3-23)

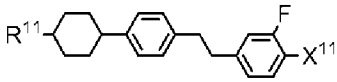

(3-24)

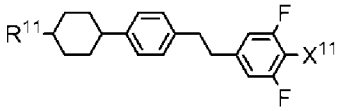

(3-25)

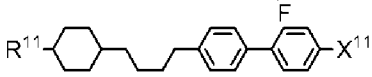

(3-26)

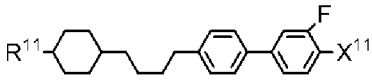

(3-27)

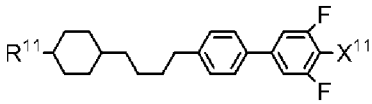

(3-28)

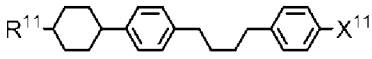

(3-29)

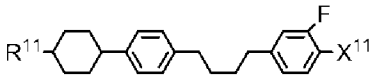

(3-30)

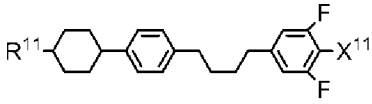

(3-31)

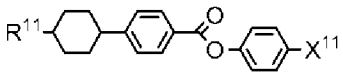

(3-32)

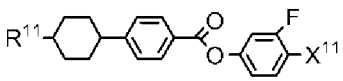

(3-33)


(3-34)

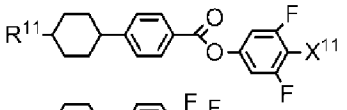

(3-35)

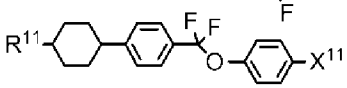

(3-36)

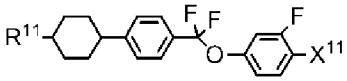

(3-37)

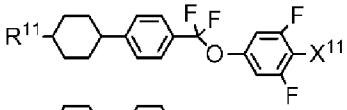

(3-38)

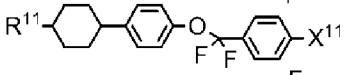
[0106]

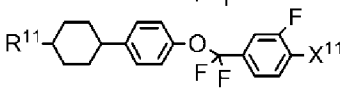

(3-39)

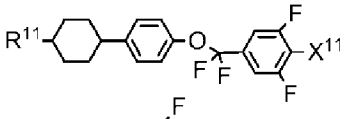

(3-40)

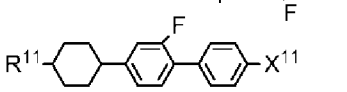

(3-41)

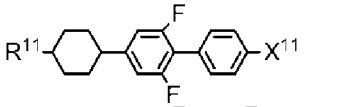

(3-42)

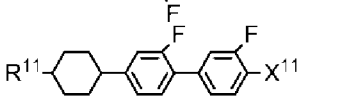

(3-43)

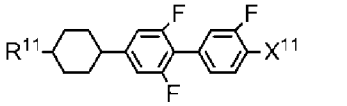

(3-44)

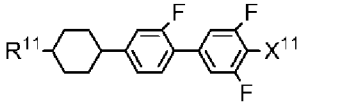

(3-45)

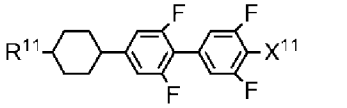

(3-46)

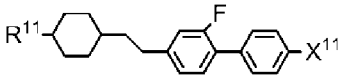

(3-47)

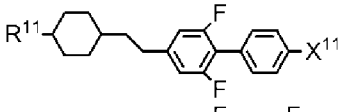

(3-48)

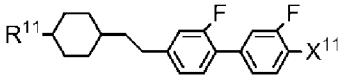

(3-49)

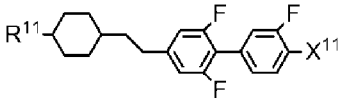

(3-50)

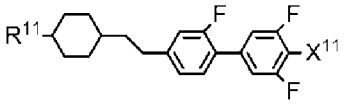

(3-51)

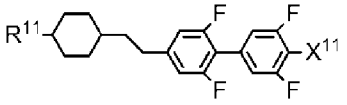

(3-52)

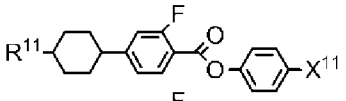

(3-53)

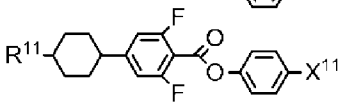

(3-54)

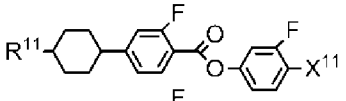

(3-55)

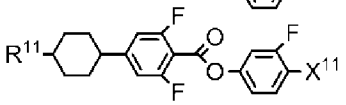

(3-56)

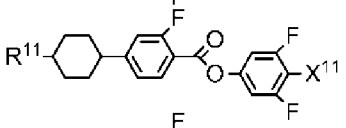

(3-57)

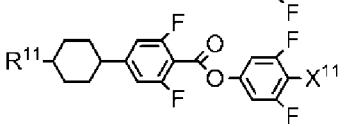

(3-58)

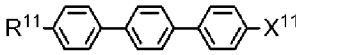

(3-59)

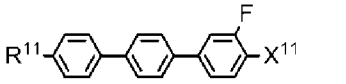

(3-60)

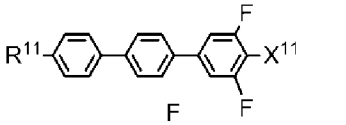

(3-61)

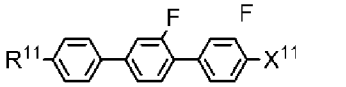

(3-62)

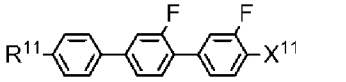

(3-63)

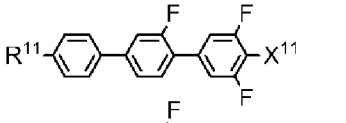

(3-64)

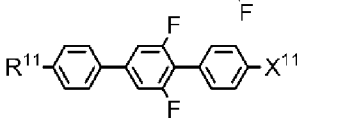

(3-65)

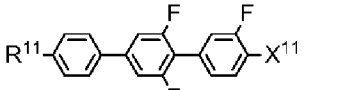

(3-66)

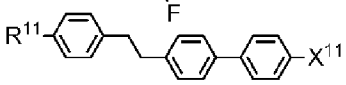

(3-67)

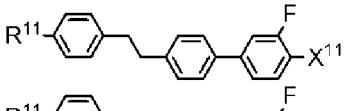

(3-68)

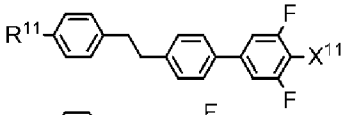

(3-69)

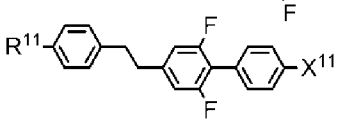

(3-70)

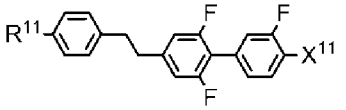

(3-71)


(3-72)

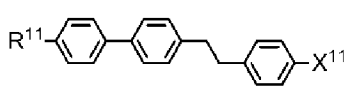

(3-73)

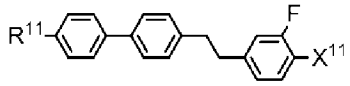

(3-74)

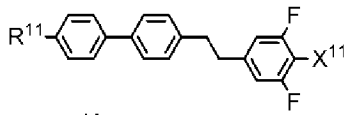

(3-75)

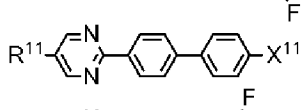

(3-76)

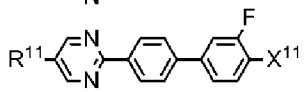
[0107]

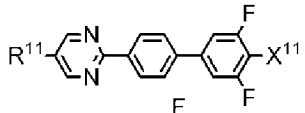

(3-77)

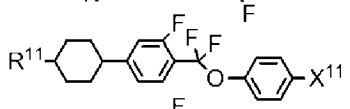

(3-78)

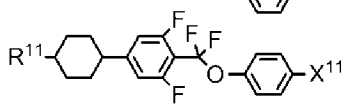

(3-79)

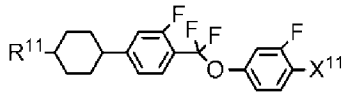

(3-80)

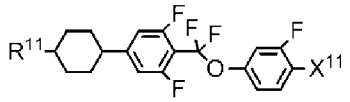

(3-81)

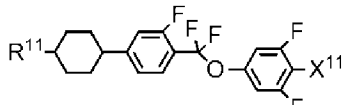

(3-82)

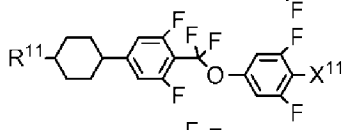

(3-83)

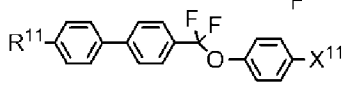

(3-84)

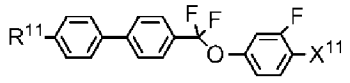

(3-85)

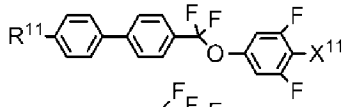

(3-86)

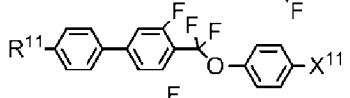

(3-87)

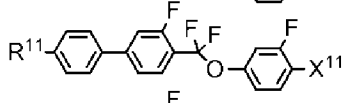

(3-88)

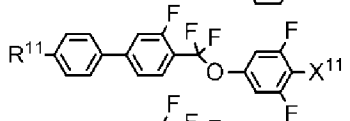

(3-89)

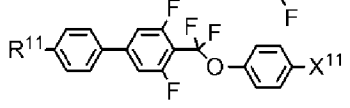

(3-90)

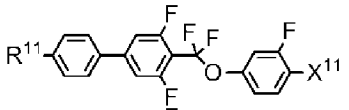

(3-91)

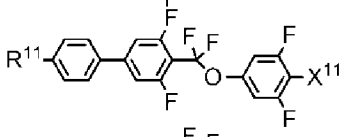

(3-92)

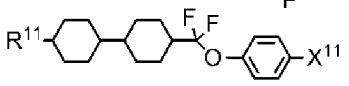

(3-93)

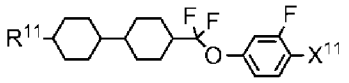

(3-94)

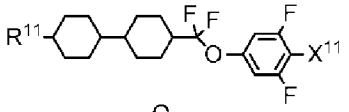

(3-95)

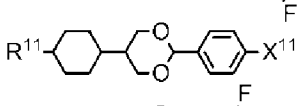

(3-96)

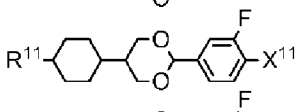

(3-97)

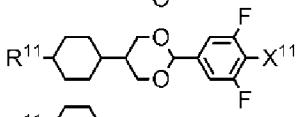

(3-98)

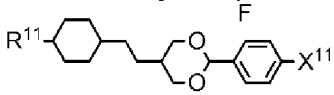

(3-99)

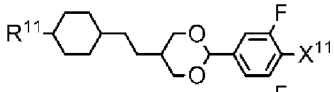

(3-100)

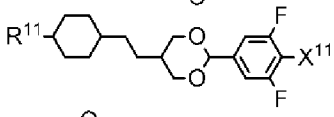

(3-101)

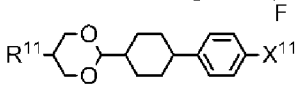

(3-102)

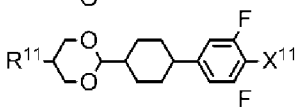

(3-103)

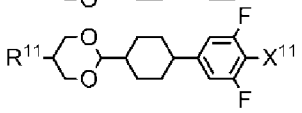

(3-104)

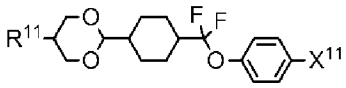

(3-105)

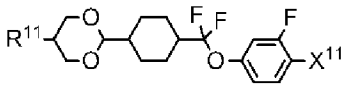

(3-106)

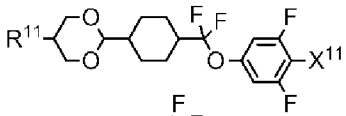

(3-107)

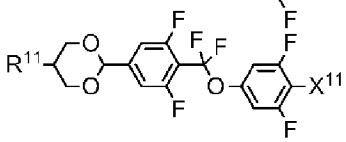

(3-108)


(3-109)

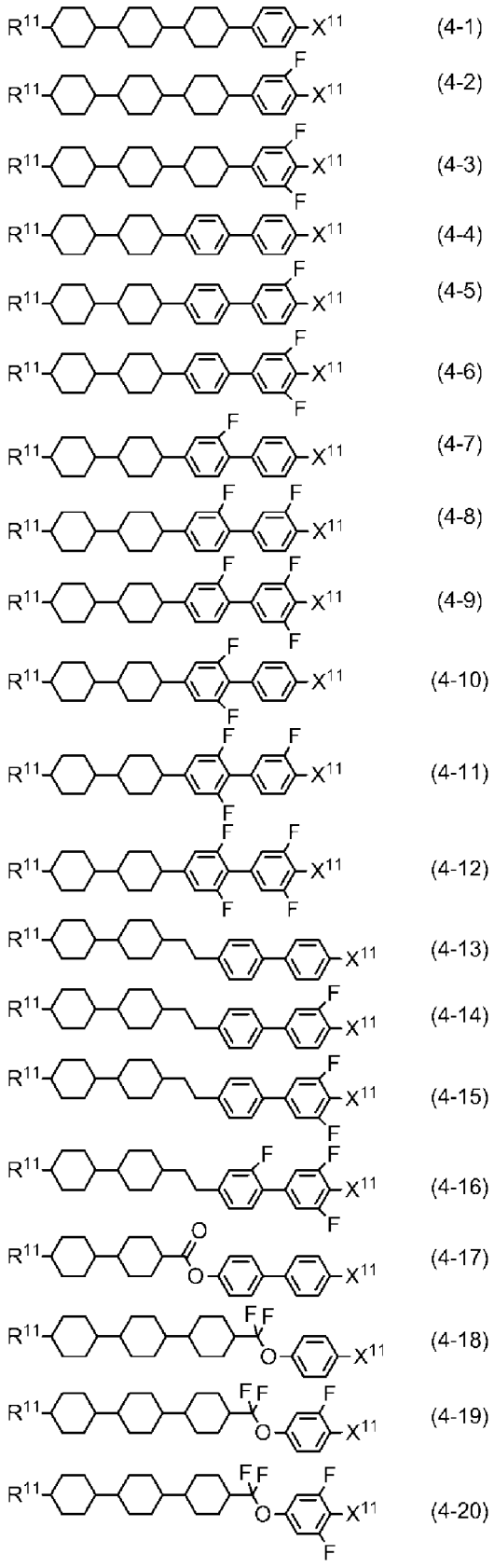

(3-110)

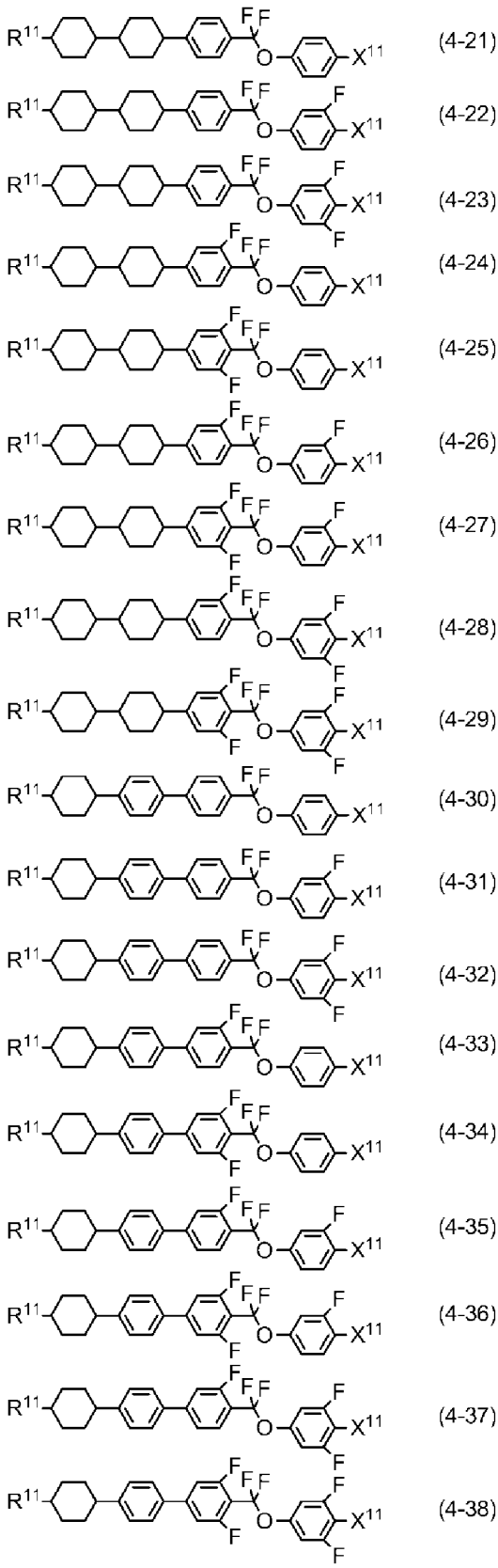

(3-111)


(3-112)

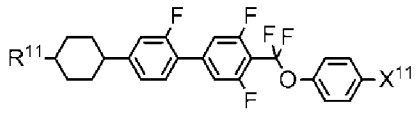

(3-113)

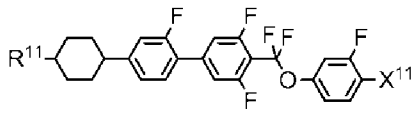
[0108]

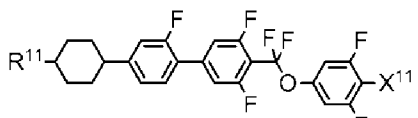

(4-1)
(4-2)
(4-3)
(4-4)
(4-5)
(4-6)
(4-7)
(4-8)
(4-9)
(4-10)
(4-11)
(4-12)
(4-13)
(4-14)
(4-15)
(4-16)
(4-17)
(4-18)
(4-19)
(4-20)

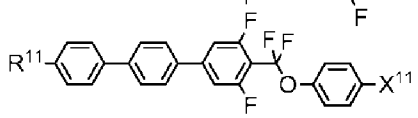

(4-21)
(4-22)
(4-23)
(4-24)
(4-25)
(4-26)
(4-27)
(4-28)
(4-29)
(4-30)
(4-31)
(4-32)
(4-33)
(4-34)
(4-35)
(4-36)
(4-37)
(4-38)

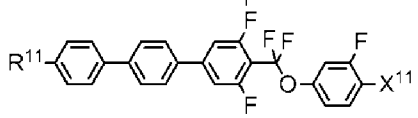
[0109]

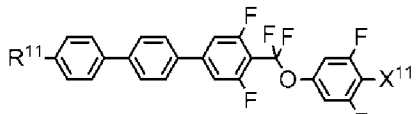

(4-39)

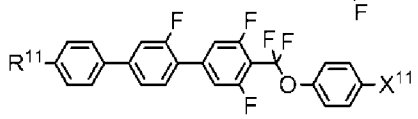

(4-40)

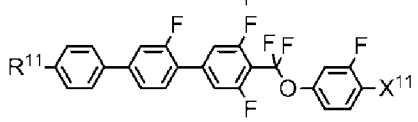

(4-41)

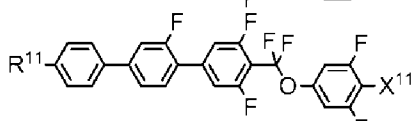

(4-42)

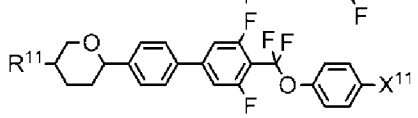

(4-43)

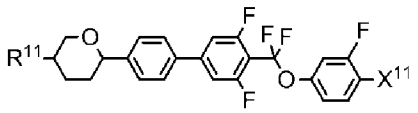

(4-44)

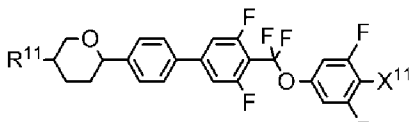

(4-45)

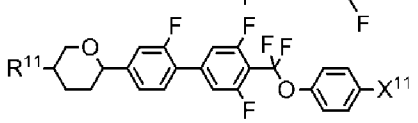

(4-46)

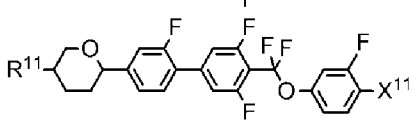

(4-47)

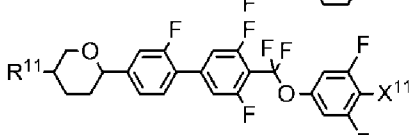

(4-48)

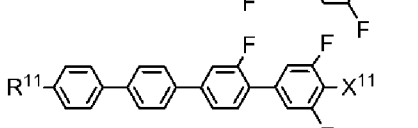

(4-49)

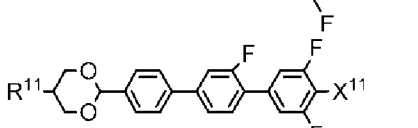

(4-50)

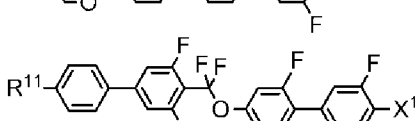

(4-51)

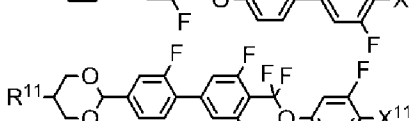

(4-52)


(4-53)


(4-54)


(4-55)

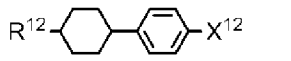

(4-56)

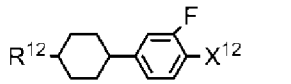

(4-57)

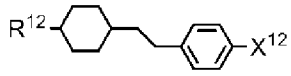
[0110] 成分Ｂは、誘電率異方性が正であり、熱、光などに対する安定性が非常に優れているので、ＴＦＴ、ＩＰＳ、ＦＦＳなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分Ｂの含有量は、組成物の重量に基づいて１～９９重量％の範囲が適するが、好ましくは１０～９７重量％の範囲、より好ましくは４０～９５重量％の範囲である。この組成物は、化合物（１３）～（１５）（成分Ｅ）をさらに添加することにより粘度を調整することができる。

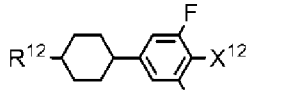
[0111] 成分Ｃは、右末端基が－Ｃ≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎである化合物（５）である。成分Ｃの好ましい例として、化合物（５－１）～（５－６４）を挙げることができる。これらの化合物（成分Ｃ）において、R^{12}およびX^{12}の定義は、前記の項１０と同一である。

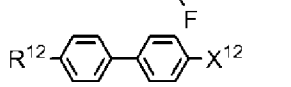
[0112]

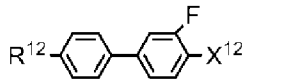

(5-1)

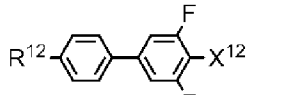

(5-2)

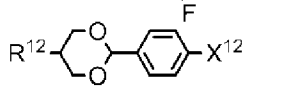

(5-3)

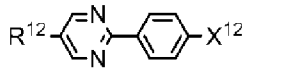

(5-4)

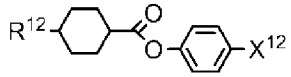

(5-5)

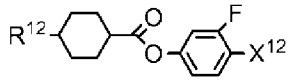

(5-6)

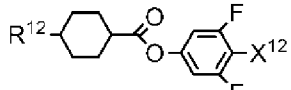

(5-7)

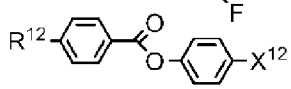

(5-8)

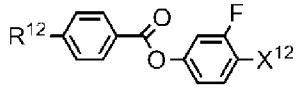

(5-9)

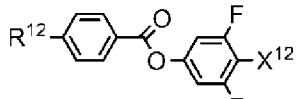

(5-10)

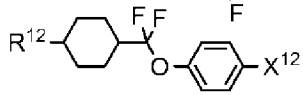

(5-11)

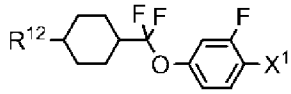

(5-12)

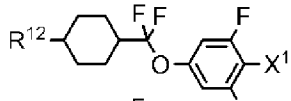

(5-13)

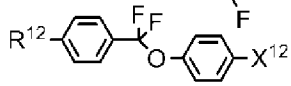

(5-14)

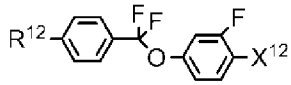

(5-15)

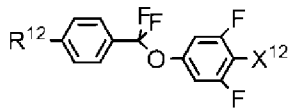

(5-16)

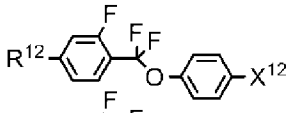

(5-17)

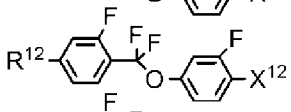

(5-18)

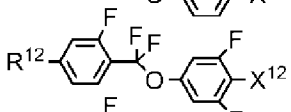

(5-19)

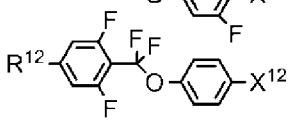

(5-20)

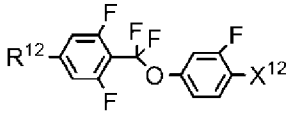

(5-21)

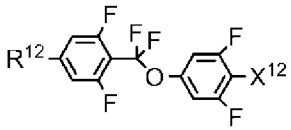

(5-22)

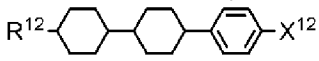

(5-23)

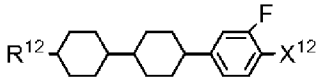

(5-24)

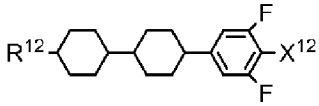

(5-25)

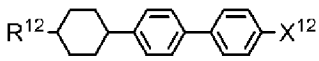

(5-26)

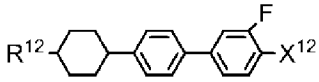

(5-27)

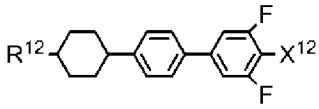

(5-28)


(5-29)

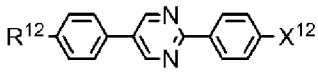

(5-30)

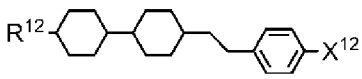

(5-31)

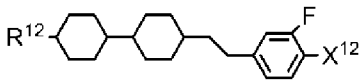

(5-32)

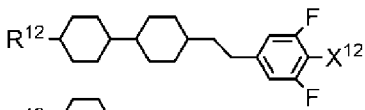

(5-33)

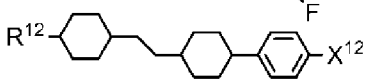

(5-34)

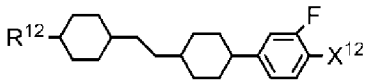

(5-35)


(5-36)

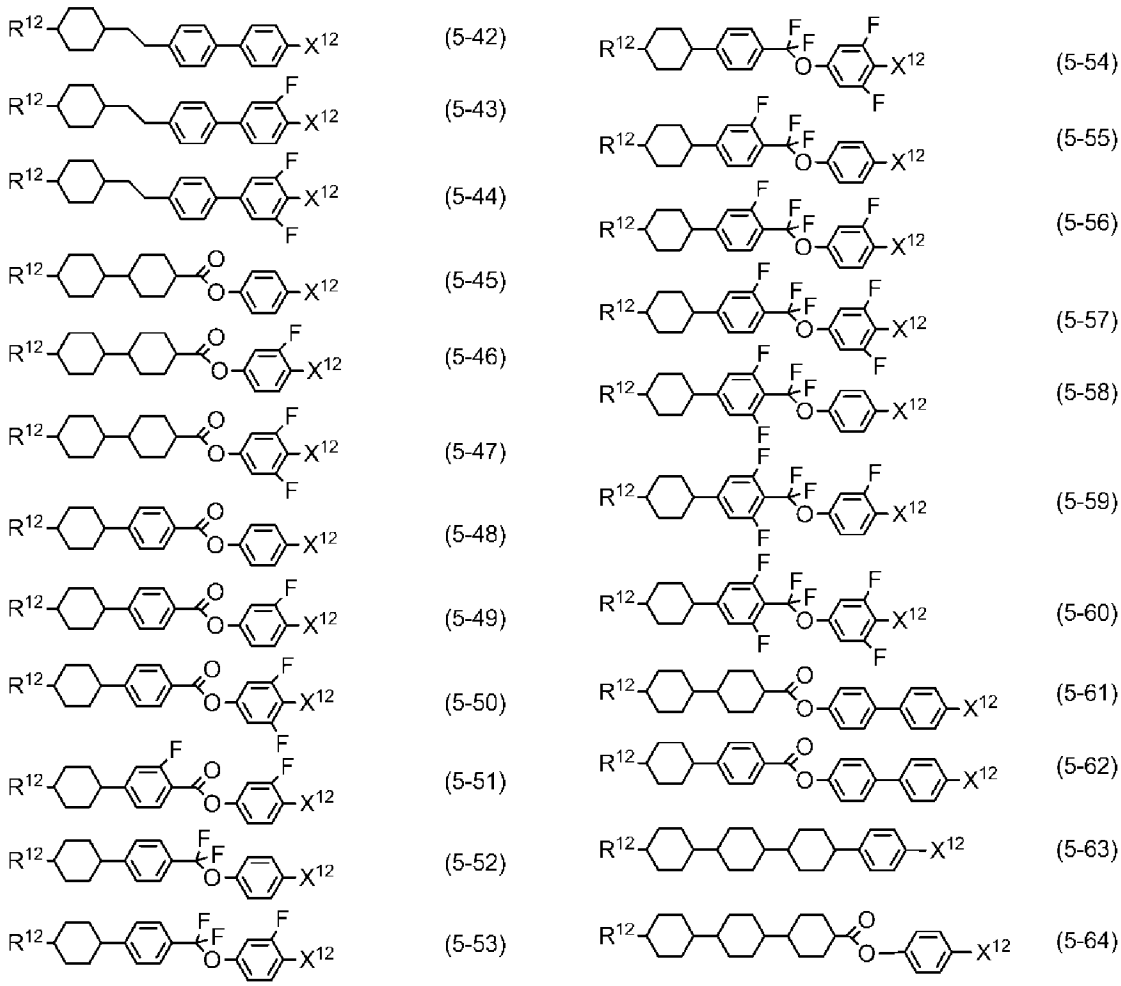

(5-37)


(5-38)


(5-39)


(5-40)

(5-41)

[0113] 
(5-42)
(5-43)
(5-44)
(5-45)
(5-46)
(5-47)
(5-48)
(5-49)
(5-50)
(5-51)
(5-52)
(5-53)
(5-54)
(5-55)
(5-56)
(5-57)
(5-58)
(5-59)
(5-60)
(5-61)
(5-62)
(5-63)
(5-64)

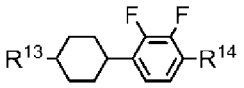
[0114] 成分Ｃは、誘電率異方性が正であり、その値が大きいのでＳＴＮモード用、ＴＮモード用またはＰＳＡモード用の組成物を調製する場合に主として用いられる。この成分Ｃを添加することにより、組成物の誘電率異方性を大きくすることができる。成分Ｃは、液晶相の温度範囲を広げる、粘度を調整する、または光学的異方性を調整する、という効果がある。成分Ｃは、素子の電圧－透過率曲線の調整にも有用である。

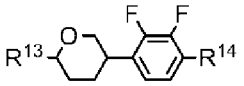
[0115] ＳＴＮモード用またはＴＮモード用の組成物を調製する場合には、成分Ｃの含有量は、組成物の重量に基づいて１～９９重量％の範囲が適しているが、好ましくは１０～９７重量％の範囲、より好ましくは４０～９５重量％の範囲である。この組成物は、成分Ｅを添加することにより液晶相の温度範囲、粘度、光学的異方性、誘電率異方性などを調整できる。

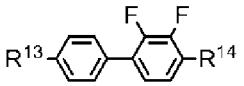
[0116] 成分Ｄは、化合物（６）～（１２）である。これらの化合物は、２，３－

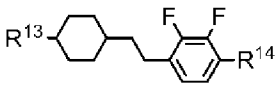
ジフルオロ－１，４－フェニレンのように、ラテラル位が２つのハロゲンで置換されたベンゼン環を有する。成分Ｄの好ましい例として、化合物（６－１）～（６－８）、化合物（７－１）～（７－１７）、化合物（８－１）、化合物（９－１）～（９－３）、化合物（１０－１）～（１０－１１）、化合物（１１－１）～（１１－３）および化合物（１２－１）～（１２－３）を挙げることができる。これらの化合物（成分Ｄ）において、R^{13}、R^{14}およびR^{15}の定義は、前記の項１１と同一である。

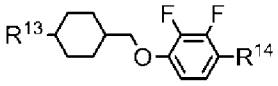
[0117]

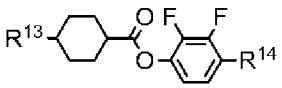

(6-1)

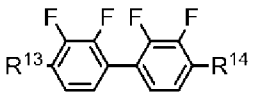

(6-2)

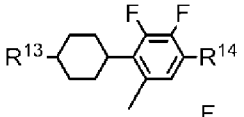

(6-3)

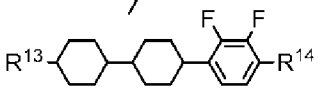

(6-4)

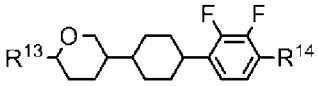

(6-5)

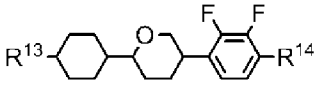

(6-6)

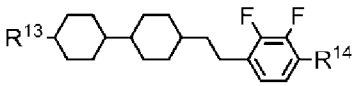

(6-7)

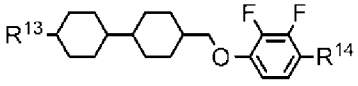

(6-8)

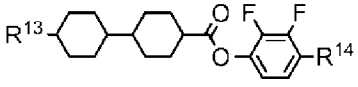

(7-1)

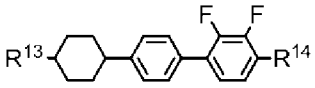

(7-2)

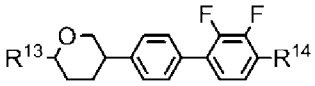

(7-3)

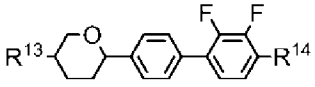

(7-4)

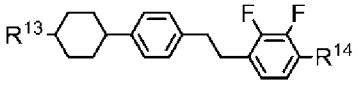

(7-5)

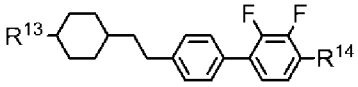

(7-6)

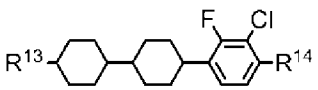

(7-7)

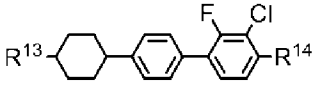

(7-8)

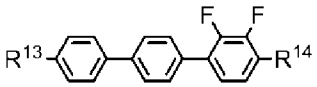

(7-9)

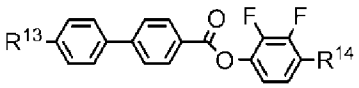

(7-10)

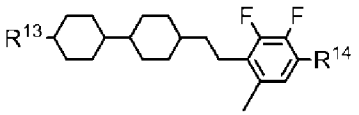

(7-11)

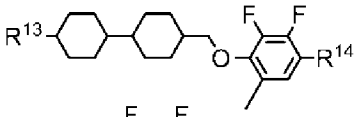

(7-12)

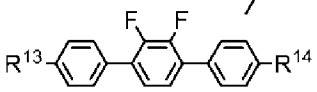

(7-13)

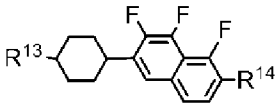

(7-14)

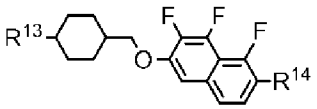

(7-15)

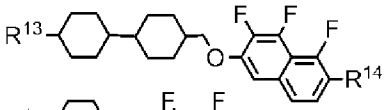

(7-16)

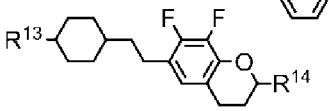

(7-17)

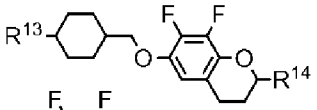

(8-1)

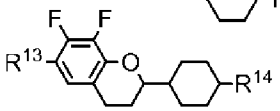

(9-1)

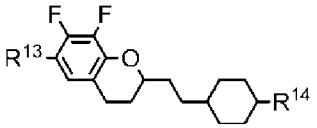

(9-2)

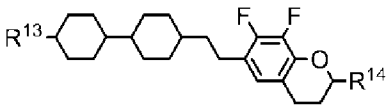

(9-3)

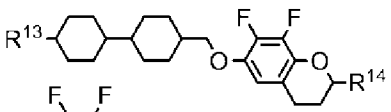

(10-1)

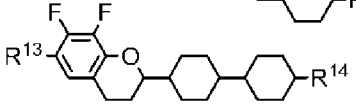

(10-2)

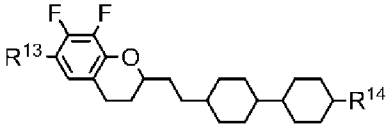

(10-3)

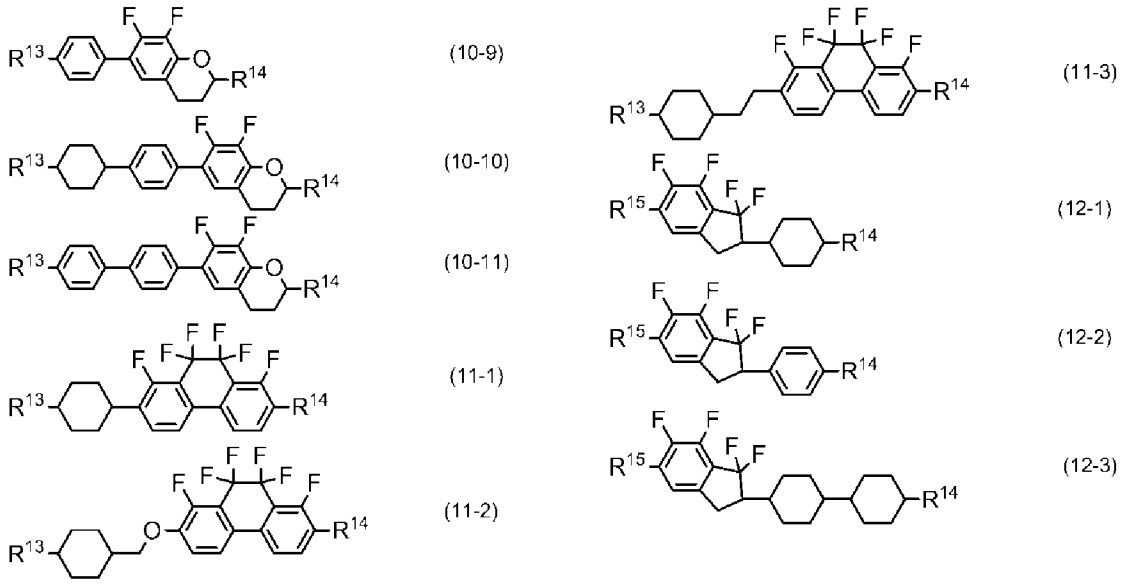

(10-4)


(10-5)


(10-6)


(10-7)


(10-8)

[0118] 

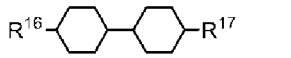
(10-9) (10-10) (10-11) (11-1) (11-2) (11-3) (12-1) (12-2) (12-3)

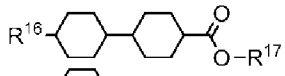
[0119] 成分Ｄは、誘電率異方性が負の化合物である。成分Ｄは、主としてＶＡモード用またはＰＳＡモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分Ｄのうち、化合物（６）は２環化合物であるので、主として、粘度の調整、光学的異方性の調整、または誘電率異方性の調整の効果がある。化合物（７）および（８）は３環化合物であるので、上限温度を高くする、光学的異方性を大きくする、または誘電率異方性を大きくするという効果がある。化合物（９）～（１２）は、誘電率異方性を大きくするという効果がある。

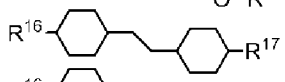
[0120] ＶＡモード用またはＰＳＡモード用の組成物を調製する場合には、成分Ｄの含有量は、組成物の重量に基づいて、好ましくは４０重量％以上であり、より好ましくは５０～９５重量％の範囲である。成分Ｄを誘電率異方性が正である組成物に添加する場合は、成分Ｄの含有量が組成物の重量に基づいて３０重量％以下が好ましい。成分Ｄを添加することにより、組成物の素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

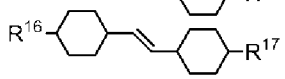
[0121] 成分Ｅは、２つの末端基がアルキルなどである化合物である。成分Ｅの好ましい例として、化合物（１３－１）～（１３－１１）、化合物（１４－１）～（１４－１９）、および化合物（１５－１）～（１５－７）を挙げることができる。これらの化合物（成分Ｅ）において、R^{16}およびR^{17}の定義は、前記の項１２と同一である。

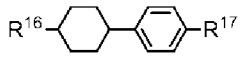
[0122]

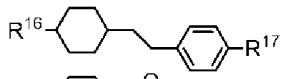

(13-1)

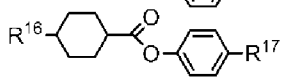

(13-2)

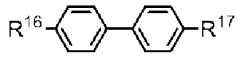

(13-3)

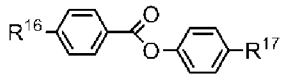

(13-4)

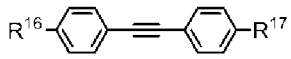

(13-5)

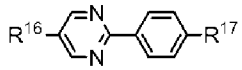

(13-6)

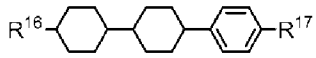

(13-7)

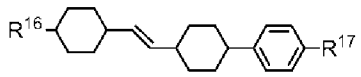

(13-8)

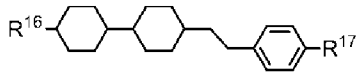

(13-9)

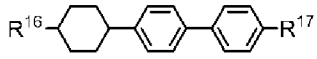

(13-10)

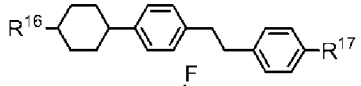

(13-11)

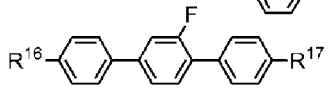

(14-1)

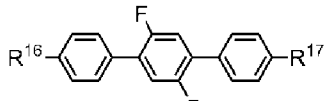

(14-2)

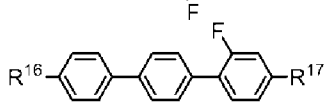

(14-3)

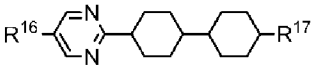

(14-4)

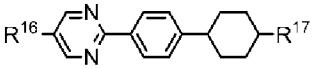

(14-5)

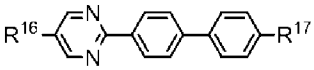

(14-6)

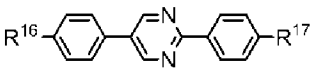

(14-7)

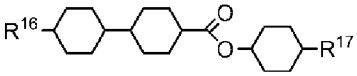

(14-8)

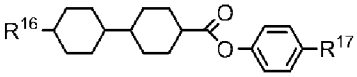

(14-9)

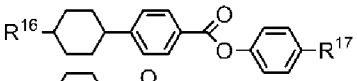

(14-10)

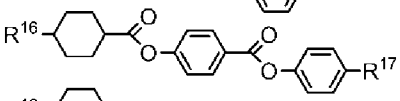

(14-11)

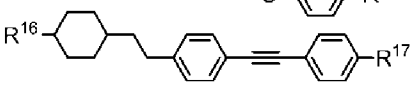

(14-12)

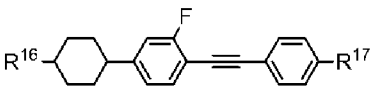

(14-13)

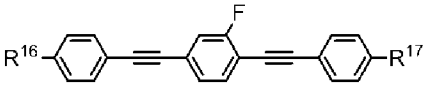

(14-14)

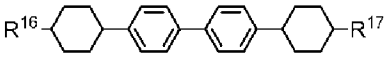

(14-15)

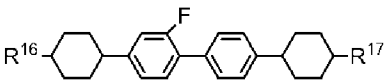

(14-16)

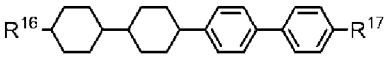

(14-17)

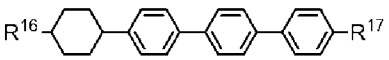

(14-18)

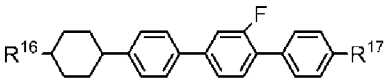

(14-19)

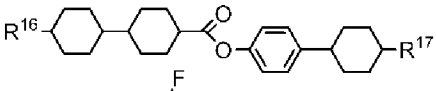

(15-1)

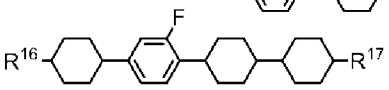

(15-2)


(15-3)


(15-4)


(15-5)


(15-6)


(15-7)

[0123] 成分Ｅは、誘電率異方性の絶対値が小さいので、中性に近い化合物である。化合物（１３）は、主として粘度の調整または光学的異方性の調整の効果がある。化合物（１４）および（１５）は、上限温度を高くすることによってネマチック相の温度範囲を広げる効果、または光学的異方性の調整の効果がある。

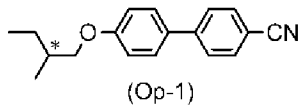
[0124] 成分Ｅの含有量を増加させると組成物の誘電率異方性が小さくなるが、粘

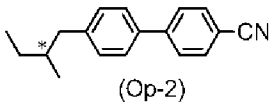
度が小さくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量は多いほうが好ましい。したがって、組成物を調製する場合には、成分Ｅの含有量は、組成物の重量に基づいて、好ましくは３０重量％以上、より好ましくは４０重量％以上である。

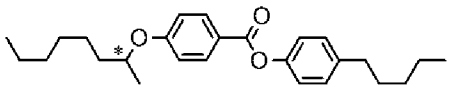
[0125] 組成物（１）の調製は、必要な成分を高い温度で溶解させるなどの方法により行われる。用途に応じて、この組成物に添加物を添加してよい。添加物の例は、光学活性化合物、重合可能な化合物、重合開始剤、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤、色素などである。このような添加物は当業者によく知られており、文献に記載されている。

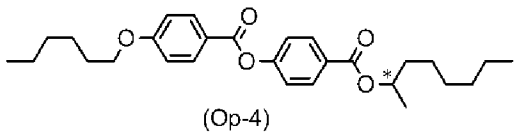
[0126] 組成物（１）は、少なくとも１つの光学活性化合物をさらに含有してもよい。光学活性化合物は、液晶分子にらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与えることによって逆ねじれを防ぐという効果を有する。光学活性化合物の好ましい例として、下記の化合物（Ｏｐ－１）～（Ｏｐ－１８）を挙げることができる。

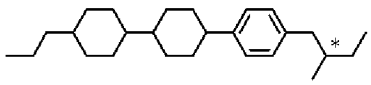
[0127]

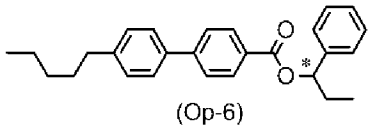

(Op-1)

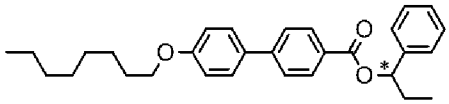

(Op-2)

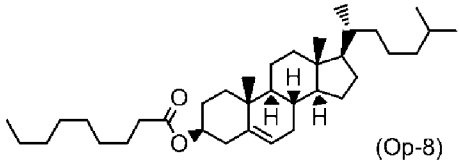

(Op-3)

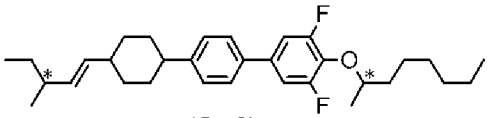

(Op-4)

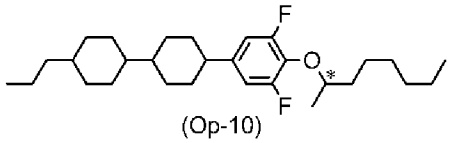

(Op-5)

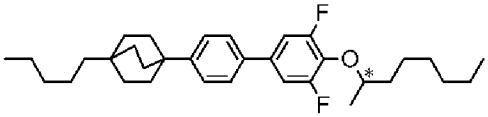

(Op-6)

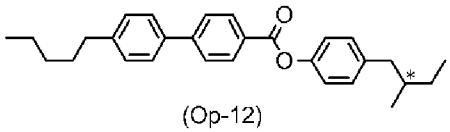

(Op-7)

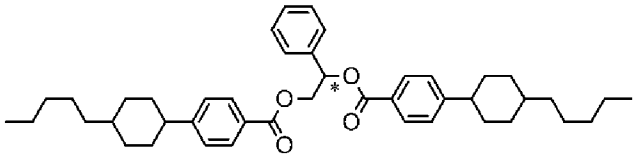

(Op-8)

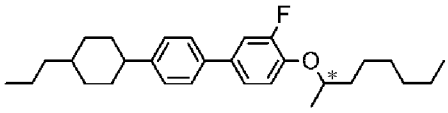

(Op-9)

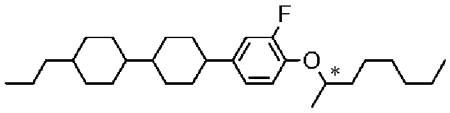

(Op-10)

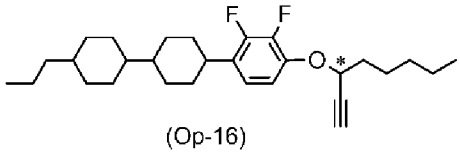

(Op-11)

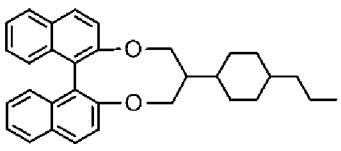

(Op-12)

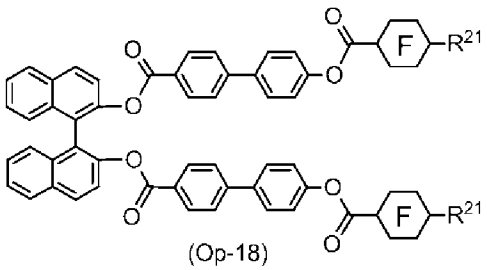

(Op-13)


(Op-14)


(Op-15)


(Op-16)


(Op-17)


(Op-18)

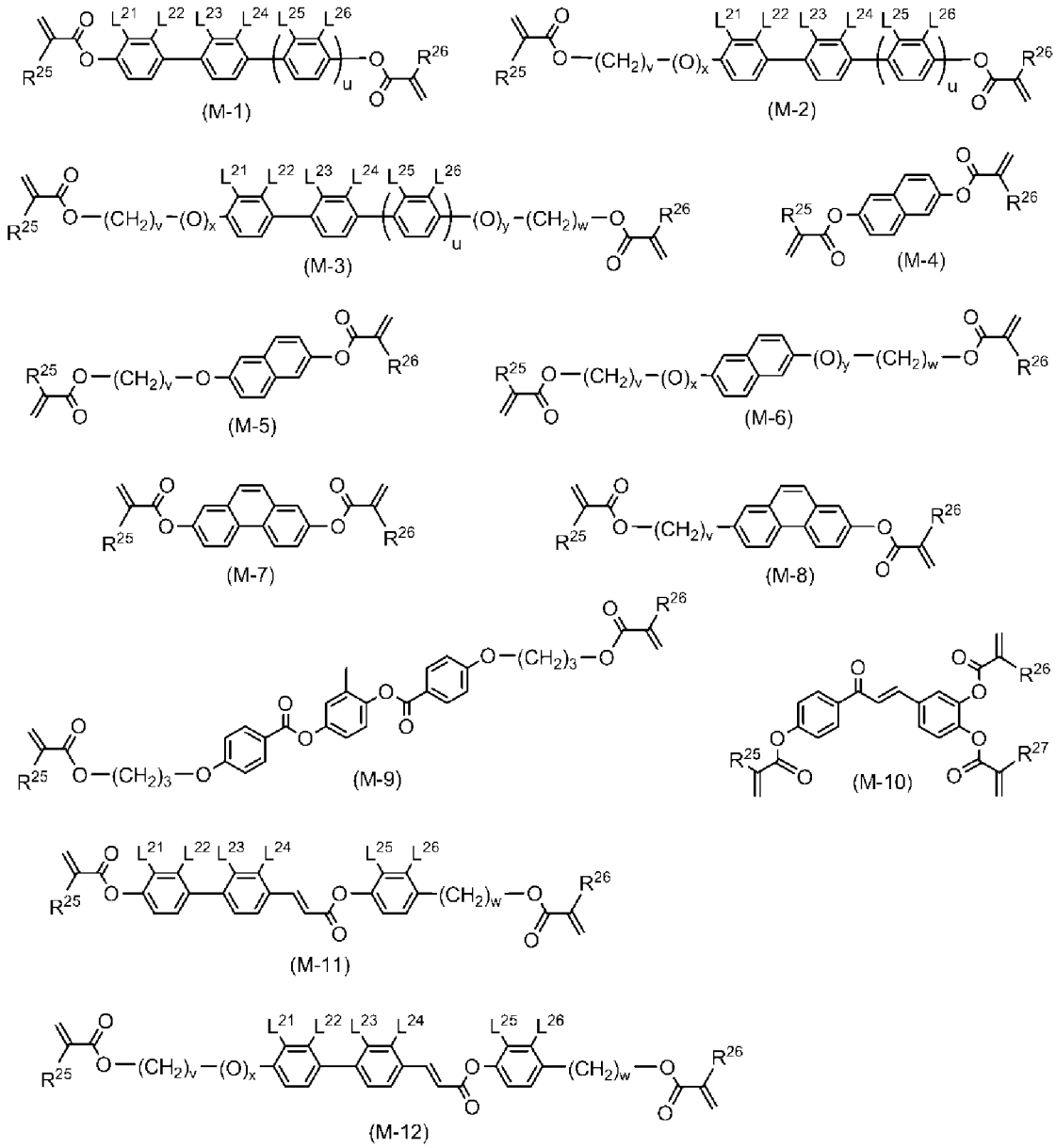
化合物（Ｏｐ－１８）において、環Ｆは１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであり、Ｒ^{21}は炭素数１～１０のアルキルである。

[0128] 組成物（１）は、このような光学活性化合物を添加して、らせんピッチを

調整する。らせんピッチは、ＴＦＴモード用およびＴＮモード用の組成物であれば４０～２００μｍの範囲に調整するのが好ましい。ＳＴＮモード用の組成物であれば６～２０μｍの範囲に調整するのが好ましい。ＢＴＮモード用の組成物の場合は、１．５～４μｍの範囲に調整するのが好ましい。らせんピッチの温度依存性を調整する目的で２つ以上の光学活性化合物を添加してもよい。

[0129] 組成物（１）は、重合可能な化合物を添加することによってＰＳＡモード用に使用することもできる。重合可能な化合物の例は、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）、ビニルケトンなどである。重合可能な化合物は、紫外線照射などにより重合する。光重合開始剤などの開始剤を添加してもよい。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。重合可能な化合物の好ましい例として、化合物（Ｍ－１）～（Ｍ－１２）を挙げることができる。

[0130]

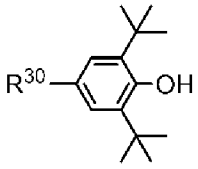


[0131] 化合物（Ｍ－１）～（Ｍ－１２）において、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}およびＲ^{27}は独立して、水素またはメチルであり；ｕ、ｘおよびｙは独立して、０または１であり；ｖおよびｗは独立して、１～１０の整数であり；Ｌ^{21}、Ｌ^{22}、Ｌ^{23}、Ｌ^{24}、Ｌ^{25}、およびＬ^{26}は独立して、水素またはフッ素である。

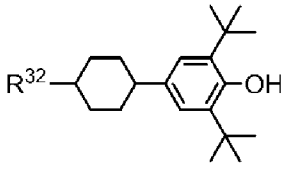
[0132] 酸化防止剤は、大きな電圧保持率を維持するために有効である。酸化防止剤の好ましい例として、下記の化合物（ＡＯ－１）および（ＡＯ－２）、ＩＲＧＡＮＯＸ　４１５、ＩＲＧＡＮＯＸ　５６５、ＩＲＧＡＮＯＸ　１０１０、ＩＲＧＡＮＯＸ　１０３５、ＩＲＧＡＮＯＸ　３１１４、およびＩＲＧＡＮＯＸ　１０９８（商品名：ＢＡＳＦ社）を挙げることができる。紫外線

吸収剤は、上限温度の低下を防ぐために有効である。紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。具体例として下記の化合物（ＡＯ－３）および（ＡＯ－４）、ＴＩＮＵＶＩＮ　３２９、ＴＩＮＵＶＩＮ　Ｐ、ＴＩＮＵＶＩＮ　３２６、ＴＩＮＵＶＩＮ　２３４、ＴＩＮＵＶＩＮ　２１３、ＴＩＮＵＶＩＮ　４００、ＴＩＮＵＶＩＮ　３２８、ＴＩＮＵＶＩＮ　９９－２（商品名：ＢＡＳＦ社）、および１，４－ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン（ＤＡＢＣＯ）を挙げることができる。立体障害のあるアミンのような光安定剤は、大きな電圧保持率を維持するために好ましい。光安定剤の好ましい例として、下記の化合物（ＡＯ－５）および（ＡＯ－６）、ＴＩＮＵＶＩＮ　１４４、ＴＩＮＵＶＩＮ　７６５、およびＴＩＮＵＶＩＮ　７７０ＤＦ（商品名：ＢＡＳＦ社）を挙げることができる。熱安定剤も大きな電圧保持率を維持するために有効であり、好ましい例としてＩＲＧＡＦＯＳ　１６８（商品名：ＢＡＳＦ社）を挙げることができる。消泡剤は、泡立ちを防ぐために有効である。消泡剤の好ましい例は、ジメチルシリコーンオイル、メチルフェニルシリコーンオイルなどである。

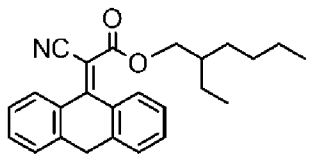
[0133]



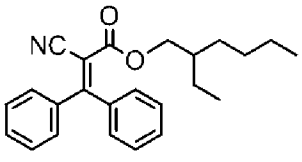
(AO-1)



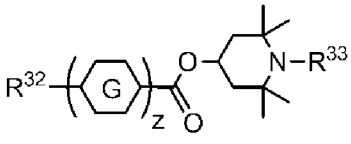
(AO-2)



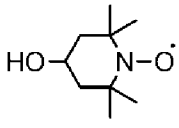
(AO-3)



(AO-4)



(AO-5)



(AO-6)

[0134] 化合物（ＡＯ－１）において、R^{30}は炭素数１～２０のアルキル、炭素数１～２０のアルコキシ、－ＣＯＯR^{31}または－$CH_2CH_2COOR^{31}$であり、R^{31}は炭素数１～２０のアルキルである。化合物（ＡＯ－２）において、R^{32}は炭素数１～２０のアルキルである。化合物（ＡＯ－５）において、R^{3}

[2]は炭素数１～２０のアルキルであり；Ｒ[33]は水素、メチルまたはＯ・（酸素ラジカル）であり；環Ｇは１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであり；ｚは１、２または３である。

[0135] 組成物（１）は、メロシアニン系、スチリル系、アゾ系、アゾメチン系、アゾキシ系、キノフタロン系、アントラキノン系、テトラジン系などの二色性色素を添加すれば、ＧＨ（guest host）モード用に使用することもできる。

[0136] ３．液晶表示素子

組成物（１）は、ＰＣモード、ＴＮモード、ＳＴＮモード、ＯＣＢモード、ＰＳＡモードなどの動作モードを有し、アクティブマトリックス（ＡＭ方式）で駆動する液晶表示素子に使用できる。組成物（１）は、ＰＣモード、ＴＮモード、ＳＴＮモード、ＯＣＢモード、ＶＡモード、ＩＰＳモードなどの動作モードを有し、パッシブマトリクス（ＰＭ）方式で駆動する液晶表示素子にも使用することができる。これらのＡＭ方式およびＰＭ方式の素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。

[0137] 組成物（１）は、ネマチック液晶をマイクロカプセル化して作製したＮＣＡＰ（nematic curvilinear aligned phase）素子、液晶中に三次元網目状高分子を形成して作製したポリマー分散型液晶表示素子（ＰＤＬＣＤ）、ポリマーネットワーク液晶表示素子（ＰＮＬＣＤ）にも使用できる。

実施例

[0138] 実施例により本発明をさらに詳しく説明する。本発明はこれら実施例によっては制限されない。

[0139] １－１．化合物（１）の実施例

化合物（１）は、下記の手順により合成した。合成した化合物は、ＮＭＲ分析などの方法により同定した。化合物の物性は、下記に記載した方法により測定した。

[0140] 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。[1]Ｈ－Ｎ

ＭＲの測定では、試料を$CDCl_3$などの重水素化溶媒に溶解させ、室温で、５００ＭＨｚ、積算回数１６回の条件で測定した。テトラメチルシランを内部標準として用いた。^{19}F－ＮＭＲの測定では、$CFCl_3$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はダブレット、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。

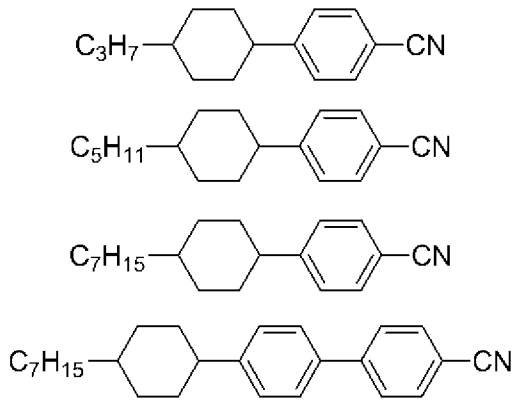
[0141] 測定試料

相構造および転移温度を測定するときには、液晶性化合物そのものを試料として用いた。ネマチック相の上限温度、粘度、光学的異方性、誘電率異方性などの物性を測定するときには、化合物を母液晶に混合して調製した組成物を試料として用いた。

[0142] 化合物を母液晶と混合した試料を用いる場合には、次のように測定した。化合物１５重量％と母液晶８５重量％とを混合して試料を調製した。この試料の測定値から、次の式で表される外挿法にしたがって、外挿値を計算し、この値を記載した。〈外挿値〉＝（１００×〈試料の測定値〉－〈母液晶の重量％〉×〈母液晶の測定値〉）／〈化合物の重量％〉

[0143] 化合物と母液晶との割合がこの割合であっても、結晶（または、スメクチック相）が２５℃で析出する場合には、化合物と母液晶との割合を１０重量％：９０重量％、５重量％：９５重量％、１重量％：９９重量％の順に変更をしていき、結晶（または、スメクチック相）が２５℃で析出しなくなった割合で試料の物性を測定した。なお、特に断りのない限り、化合物と母液晶との割合は、１５重量％：８５重量％である。

[0144] 母液晶としては、下記の母液晶（ｉ）を用いた。母液晶（ｉ）の成分の割合を重量％で示す。



[0145] 測定方法

物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；以下、ＪＥＩＴＡと略す）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、ＴＦＴを取り付けなかった。

[0146] （１）相構造

偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレート（メトラー社ＦＰ－５２型ホットステージ）に試料を置き、３℃／分の速度で加熱しながら相状態とその変化を偏光顕微鏡で観察し、相の種類を特定した。

[0147] （２）転移温度（℃）

測定には、パーキンエルマー社製の示差走査熱量計Ｄｉａｍｏｎｄ　ＤＳＣシステム、またはエスエスアイ・ナノテクノロジー社製の高感度示差走査熱量計Ｘ－ＤＳＣ７０００を用いた。３℃／分速度で昇降温し、試料の相変化に伴う吸熱ピーク、または発熱ピークの開始点を外挿により求め、転移温度を決定した。化合物が固体からスメクチック相、ネマチック相などの液晶相に転移する温度を「液晶相の下限温度」と略すことがある。化合物が液晶相から等方性液体に転移する温度を「透明点」と略すことがある。

[0148] 結晶はＣと表した。結晶の種類の区別がつく場合は、それぞれC_1またはC_2と表した。スメクチック相はＳ、ネマチック相はＮと表した。スメクチック相の中で、スメクチックＡ相、スメクチックＢ相、スメクチックＣ相、また

はスメクチックＦ相の区別がつく場合は、それぞれS_A、S_B、S_C、またはS_Fと表した。液体（アイソトロピック）はＩと表した。転移温度は、例えば、「Ｃ　５０．０　Ｎ　１００．０　Ｉ」のように表記した。これは、結晶からネマチック相への転移温度が５０．０℃であり、ネマチック相から液体への転移温度が１００．０℃であることを示す。

[0149] （３）低温相溶性

化合物の割合が、２０重量％、１５重量％、１０重量％、５重量％、３重量％、および１重量％となるように母液晶と化合物とを混合した試料を調製し、試料をガラス瓶に入れた。このガラス瓶を、－１０℃または－２０℃のフリーザー中に一定期間保管したあと、結晶またはスメクチック相が析出しているかどうか観察をした。

[0150] （４）ネマチック相の上限温度（T_{NI}またはＮＩ；℃）

偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレートに試料を置き、１℃／分の速度で加熱した。試料の一部がネマチック相から等方性液体に変化したときの温度を測定した。ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。試料が化合物と母液晶との混合物であるときは、T_{NI}の記号で示した。試料が化合物と成分Ｂなどとの混合物であるときは、ＮＩの記号で示した。

[0151] （５）ネマチック相の下限温度（T_C；℃）

ネマチック相を有する試料を０℃、－１０℃、－２０℃、－３０℃、および－４０℃のフリーザー中に１０日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が－２０℃ではネマチック相のままであり、－３０℃では結晶またはスメクチック相に変化したとき、T_Cを≦－２０℃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。

[0152] （６）粘度（バルク粘度；η；２０℃で測定；ｍＰａ・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。

[0153] （７）粘度（回転粘度；$\gamma 1$；２５℃で測定；ｍＰａ・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。ツイスト角が０°であり、そして２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が５μｍであるＴＮ素子に試料を入れた。この素子に１６Ｖから１９．５Ｖの範囲で０．５Ｖ毎に段階的に印加した。０．２秒の無印加のあと、ただ１つの矩形波（矩形パルス；０．２秒）と無印加（２秒）の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流（transient current）のピーク電流（peak current）とピーク時間（peak time）を測定した。これらの測定値とM. Imaiらの論文、４０頁の計算式（８）とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性の値は、この回転粘度を測定した素子を用い、下に記載した方法で求めた。

[0154] （８）光学的異方性（屈折率異方性；２５℃で測定；Δｎ）

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ベ屈折計により行なった。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率（ｎ∥）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⊥）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。光学的異方性（Δｎ）の値は、Δｎ＝ｎ∥－ｎ⊥、の式から計算した。

[0155] （９）短軸方向の誘電率（ε⊥）および誘電率異方性（Δε；２５℃で測定）

２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が９μｍであり、そしてツイスト角が８０度であるＴＮ素子に試料を入れた。この素子にサイン波（１０Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率（ε∥）を測定した。この素子にサイン波（０．５Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率（ε⊥）を測定した。誘電率異方性の値は、Δε＝ε∥－ε⊥、の式から計算した。

[0156] （１０）弾性定数（Ｋ；２５℃で測定；ｐＮ）

測定には横河・ヒューレットパッカード株式会社製のＨＰ４２８４Ａ型ＬＣＲメータを用いた。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が２０μｍ

である水平配向素子に試料を入れた。この素子に０ボルトから２０ボルト電荷を印加し、静電容量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ク」（日刊工業新聞社）、７５頁にある式（２．９８）、式（２．１０１）を用いてフィッティングし、式（２．９９）からK_{11}およびK_{33}の値を得た。次に１７１頁にある式（３．１８）に、先ほど求めたK_{11}およびK_{33}の値を用いてK_{22}を算出した。弾性定数Ｋは、このようにして求めたK_{11}、K_{22}、およびK_{33}の平均値で表した。

[0157] （１１）しきい値電圧（Ｖｔｈ；２５℃で測定；Ｖ）

測定には大塚電子株式会社製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が約０．４５/Δｎ(μｍ)であり、ツイスト角が８０度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）のＴＮ素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧（３２Ｈｚ、矩形波）は０Ｖから１０Ｖまで０．０２Ｖずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率１００％であり、この光量が最小であったときが透過率０％である電圧－透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が９０％になったときの電圧で表した。

[0158] （１２）電圧保持率（ＶＨＲ－１；２５℃で測定；％）

測定に用いたＴＮ素子はポリイミド配向膜を有し、そして２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）は５μｍである。この素子は試料を入れたあと紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子に２５℃でパルス電圧（５Ｖで６０マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で１６．７ミリ秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Ａを求めた。面積Ｂは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Ｂに対する面積Ａの百分率で表した。

[0159] （１３）電圧保持率（ＶＨＲ－２；８０℃で測定；％）

電圧保持率（ＶＨＲ－２）は、８０℃で測定した以外はＶＨＲ－１と同様

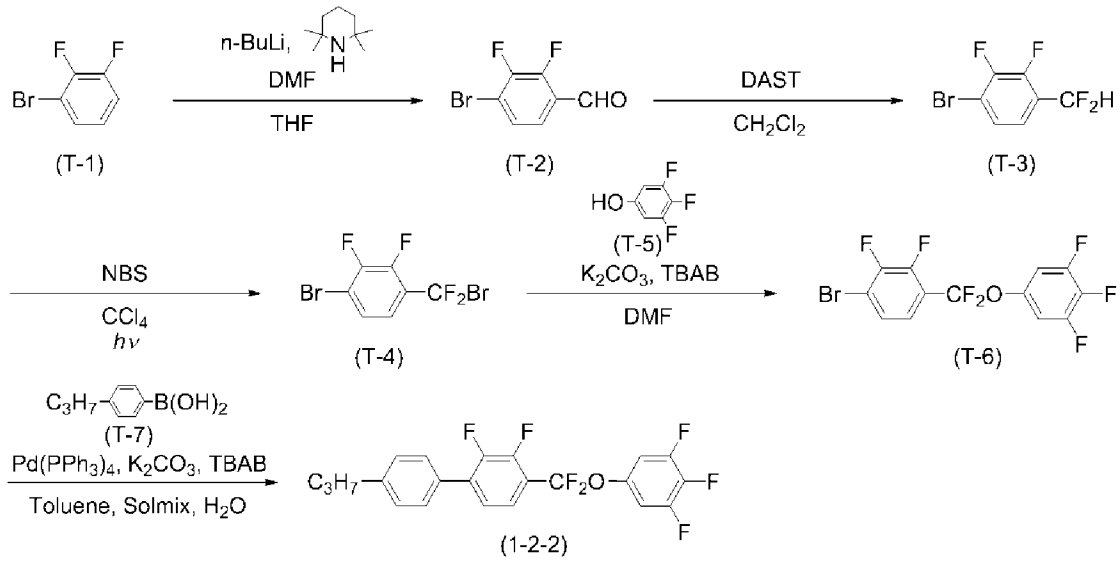
の方法で求めた。

[0160] 原料

ソルミックスＡ－１１（商品名）は、エタノール（８５．５％）、メタノール（１３．４％）とイソプロパノール（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。

［実施例１］

[0161] 化合物（Ｎｏ．１－２－２）の合成



[0162] 第１工程

窒素雰囲気下、２，２，６，６－テトラメチルピペリジン（４８．５ｍｌ）およびＴＨＦ（２５０ｍｌ）を反応器に入れて、０℃に冷却した。そこへｎ－ブチルリチウム（１．６０Ｍ；ｎ－ヘキサン溶液；１７８ｍｌ）をゆっくりと加え１時間撹拌した。次に－７０℃に冷却し、化合物（Ｔ－１）（５０．０ｇ）のＴＨＦ（５００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、１時間撹拌したのち、ＤＭＦ（Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド）（４０．１ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１２時間撹拌した。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水溶液に注ぎ込み、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（体積比、ヘキサン：酢酸エチル＝５：１）で精製した。さらにヘキサンと酢酸エチルとの混合溶媒（体

積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（Ｔ－２）（４６．９ｇ；８２％）を得た。

[0163] 第２工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－２）（１０．０ｇ）およびジクロロメタン（１００ｍｌ）を反応器に入れて、－１０℃に冷却した。そこへＤＡＳＴ（１２．０ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間撹拌した。反応混合物を氷水に注ぎ込み、炭酸水素ナトリウムを用いて中和したのち、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（ペンタン）で精製して、化合物（Ｔ－３）（９．２４ｇ；８４％）を得た。

[0164] 第３工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－３）（９．２４ｇ）、ＮＢＳ（８．１２ｇ）、および四塩化炭素（９０．０ｍｌ）を光反応装置（４００W高圧水銀灯）に入れて、４０℃で４８時間光照射を行った。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（ヘキサン）で精製して、化合物（Ｔ－４）（５．５１ｇ；４５％）を得た。

[0165] 第４工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－４）（５．５１ｇ）、化合物（Ｔ－５）（３．０４ｇ）、炭酸カリウム（７．１０ｇ）、ＴＢＡＢ（テトラブチルアンモニウムブロミド）（１．１０ｇ）、およびＤＭＦ（５５．０ｍｌ）を反応器に入れて、９０℃で２時間撹拌した。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（ヘプタン）で精製して、化合物（Ｔ－６）（５．５９ｇ；８４％）を得た。

[0166] 第５工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－６）（４．００ｇ）、化合物（Ｔ－７）（１．８６ｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０．１１９ｇ）、炭酸カリウム（２．８４ｇ）、ＴＢＡＢ（０．６６３ｇ）、トルエン（４０．０ｍｌ）、ソルミックス（登録商標）Ａ－１１（４０．０ｍｌ）、および水（４０．０ｍｌ）を反応器に入れて、５時間加熱還流を行った。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、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（ヘプタン）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（Ｎｏ．１－２－２）（３．７３ｇ；８５％）を得た。

[0167] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５１－７．４４（ｍ，３Ｈ）、７．３３－７．２６（ｍ，３Ｈ）、７．０３－６．９６（ｍ，２Ｈ）、２．６６（ｔ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，２Ｈ）、１．７５－１．６４（ｍ，２Ｈ）、０．９８（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

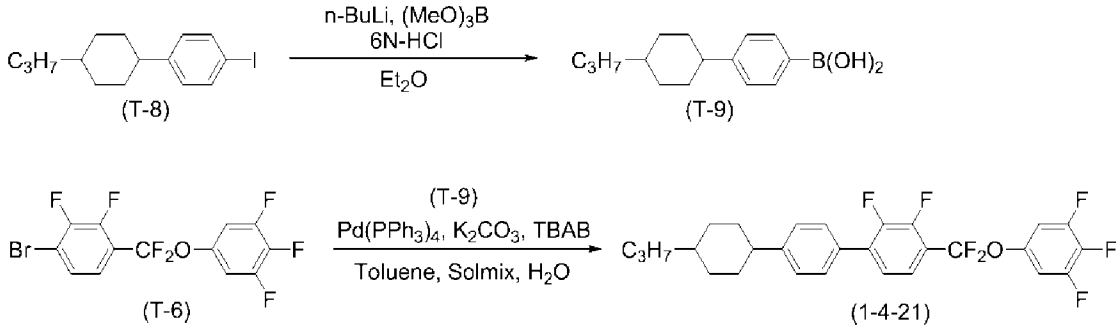
[0168] 化合物（Ｎｏ．１－２－２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５６．２　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝０．４℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１１７；誘電率異方性（Δε）＝２１．２；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝９．１；粘度（η）＝４０．９ｍＰａ・ｓ．

［実施例２］

[0169] 化合物（Ｎｏ．１－４－２１）の合成



[0170] 第１工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－８）（５０．０ｇ）、およびジエチルエーテル（８００ｍｌ）を反応器に入れ、－７０℃に冷却した。そこへｎ－ブチルリチウム（１．６３Ｍ；ｎ－ヘキサン溶液；１１２ｍｌ）をゆっくりと加え２時間撹拌した。次にホウ酸トリメチル（２２．８ｇ）のジエチルエーテル（５０．０ｍｌ）溶液をゆっくりと加え室温に戻しつつ１２時間撹拌した。次に－３０℃に冷却し、６Ｎ塩酸（１５０ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。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、ヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔ－９）（２９．２ｇ；７８％）を得た。

[0171] 第２工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－６）（４．００ｇ）、化合物（Ｔ－９）（２．５３ｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０．１１９ｇ）、炭酸カリウム（２．８４ｇ）、ＴＢＡＢ（０．６６３ｇ）、トルエン（４０．０ｍｌ）、ソルミックス（登録商標）Ａ－１１（４０．０ｍｌ）、および水（４０．０ｍｌ）を反応器に入れて、３時間加熱還流を行った。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、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（ヘプタン）で精製した。さらにＩＰＡと酢酸エチルとの混合溶媒（体積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（１－４－２１）（４．２３ｇ；８１％）を得た。

[0172] 化学シフトδ（ｐｐｍ；$CDCl_3$）：７．５１－７．４４（ｍ，３Ｈ）、７．３６－７．２４（ｍ，３Ｈ）、７．０３－６．９６（ｍ，２Ｈ）、２．５４（ｔｔ，Ｊ＝１２．１Ｈｚ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，１Ｈ）、１．９７－１．８６（ｍ，４Ｈ）、１．５５－１．４３（ｍ，２Ｈ）、１．４２－１．２７（ｍ，３Ｈ）、１．３７－１．２０（ｍ，２Ｈ）、１．１３－１．０２（ｍ，２Ｈ）、０．９３（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，３Ｈ）．

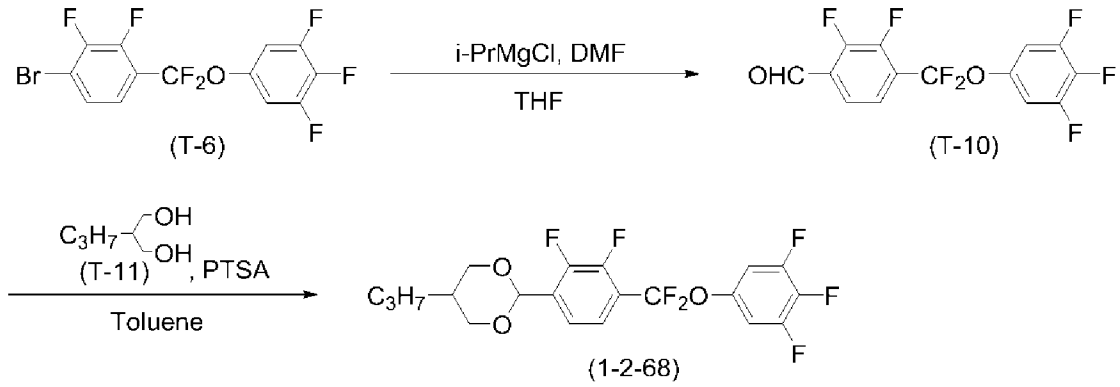
[0173] 化合物（Ｎｏ．１－４－２１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　７６．４　Ｎ　１６０　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝１１７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１５０；誘電率異方性（Δε）＝１７．９；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝５．８；粘度（η）＝６２．９ｍＰａ・ｓ．

[実施例３]

[0174] 化合物（Ｎｏ．１－２－６８）の合成



[0175] 第１工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－６）（２．５０ｇ）、およびＴＨＦ（５０．０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ塩化イソプロピルマグネシウム（２．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；３．８６ｍｌ）をゆっくりと加え１時間撹拌した。次にＤＭＦ（１．００ｍｌ）をゆっくりと加え室温に戻しつつ１２時間撹拌した。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水溶液に注ぎ込み、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（体積比、ヘプタン：トルエン＝１：１）で精製して、化合物（Ｔ－１０）（１．９６ｇ；９０％）を得た。

[0176] 第２工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－１０）（１．９６ｇ）、化合物（Ｔ－１１）（１．０３ｇ）、ＰＴＳＡ（パラトルエンスルホン酸一水和物）、およびトルエン（４０．０ｍｌ）を反応器に入れて、留出してくる水を除去しつつ、３時間加熱還流を行った。反応混合物を水で洗浄し、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（体積比、ヘプタン：トルエン＝１：１）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（１－２－６８）（０．６００ｇ；２４％）を得た。

[0177] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５３－７．４１（ｍ，２Ｈ）、７．００－６．９３（ｍ，２Ｈ）、５．７２（ｓ，１Ｈ）、４．２４（ｄｄ，Ｊ＝１１．８Ｈｚ，Ｊ＝４．７Ｈｚ，２Ｈ）、３．５７（ｔ，Ｊ＝１１．７Ｈｚ，２Ｈ）、２．２４－２．１４（ｍ，１Ｈ）、１．４０－１．３０（ｍ，２Ｈ）、１．１４－１．０７（ｍ，２Ｈ）、０．９４（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，３Ｈ）．

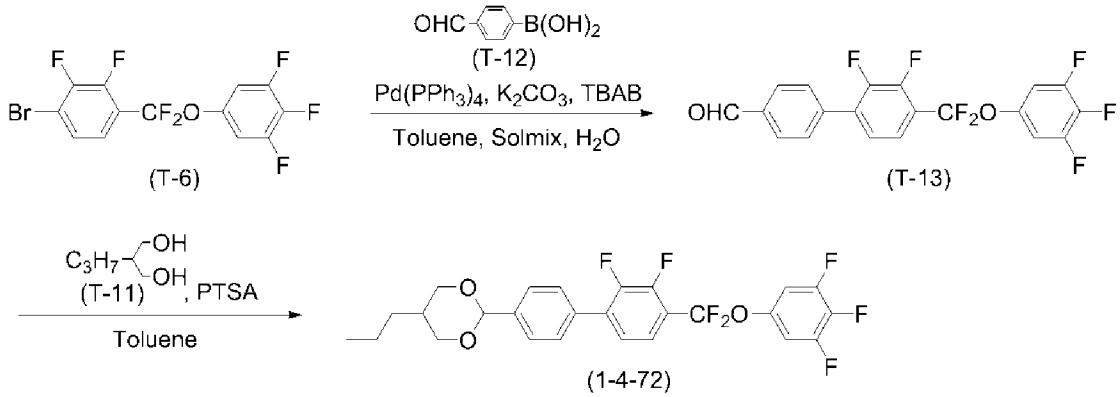
[0178] 化合物（Ｎｏ．１－２－６８）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５２．８　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝５．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．０７０；誘電率異方性（Δε）＝２８．６；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝８．５；粘度（η）＝５５．１ｍＰａ・ｓ．

[実施例４]

[0179] 化合物（Ｎｏ．１－４－７２）の合成



[0180] 第１工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－６）（３．００ｇ）、化合物（Ｔ－１２）（１．２７ｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０．０８９ｇ）、炭酸カリウム（２．１３ｇ）、ＴＢＡＢ（０．４９７ｇ）、トル

エン（３０．０ｍｌ）、ソルミックス（登録商標）Ａ－１１（３０．０ｍｌ）、および水（３０．０ｍｌ）を反応器に入れて、１２時間加熱還流を行った。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、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－１３）（２．９４ｇ；９２％）を得た。

[0181] 第２工程

化合物（Ｔ－１３）（２．９４ｇ）を原料として用い、実施例３の第２工程と同様の手法により、化合物（１－４－７２）（２．１９ｇ；６０％）を得た。

[0182] 化学シフトδ（ｐｐｍ；$CDCl_3$）：７．６４－７．５９（ｍ，２Ｈ）、７．５９－７．５３（ｍ，２Ｈ）、７．５０－７．４５（ｍ，１Ｈ）、７．３１－７．２５（ｍ，１Ｈ）、７．０４－６．９６（ｍ，２Ｈ）、５．４８（ｓ，１Ｈ）、４．２６（ｄｄ，Ｊ＝１１．７Ｈｚ，Ｊ＝４．６Ｈｚ，２Ｈ）、３．５７（ｔ，Ｊ＝１１．４Ｈｚ，２Ｈ）、２．２５－２．１２（ｍ，１Ｈ）、１．４１－１．３１（ｍ，２Ｈ）、１．１４－１．０８（ｍ，２Ｈ）、０．９４（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

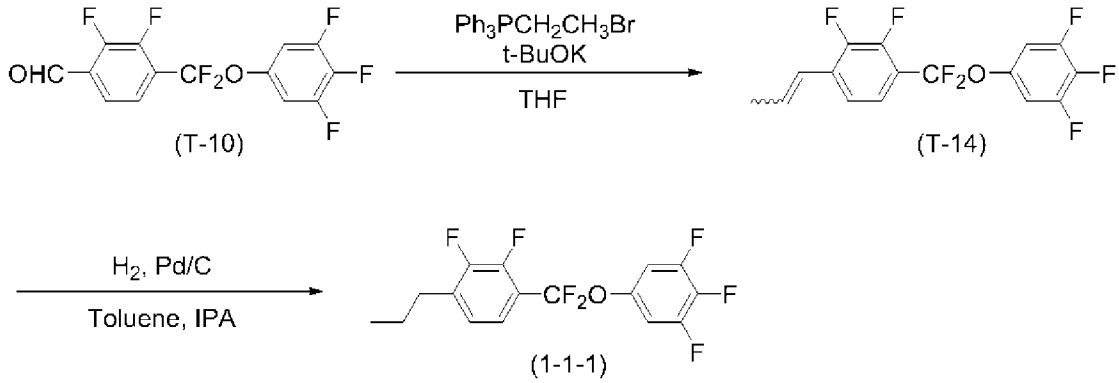
[0183] 化合物（Ｎｏ．１－４－７２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　９５．７　S_A　１２４　Ｎ　１５２　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝１２１℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１５７；誘電率異方性（Δε）＝２６．６；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．２；粘度（η）＝８４．４ｍＰａ・ｓ．

[実施例５]

[0184] 化合物（Ｎｏ．１－１－１）の合成



[0185] 第１工程

窒素雰囲気下、エチルトリフェニルホスホニウムブロミド（９．８８ｇ）およびＴＨＦ（５０．０ｍｌ）を反応器に入れて、－３０℃に冷却した。そこへカリウムｔ－ブトキシド（２．７６ｇ）をゆっくりと加え、３０分間撹拌した。次に化合物（Ｔ－１０）（６．９２ｇ）のＴＨＦ（５０．０ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。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（ヘプタン）で精製して、化合物（Ｔ－１４）（６．８１ｇ；９５％）を得た。

[0186] 第２工程

化合物（Ｔ－１４）（６．８１ｇ）、パラジウムカーボン触媒（５％Ｐｄ／ＣのＮＸタイプ（５０％湿潤品）；エヌ・イー・ケムキャット製；０．２０ｇ）、トルエン（２５．０ｍｌ）、およびＩＰＡ（２５．０ｍｌ）を反応器に入れ、水素雰囲気下で８時間撹拌した。濾過により触媒を除去したのち、減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（ヘプタン）で精製した。さらに蒸留により精製して、化合物（Ｎｏ．１－１－１）（３．８９ｇ；５４％）を得た。

[0187] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．３６－７．３０（ｍ，１Ｈ）、７．０６－７．００（ｍ，１Ｈ）、７．００－６．９１（ｍ，２Ｈ）、２．６９（ｔ，Ｊ＝７．７Ｈｚ，２Ｈ）、１．７２－１．６２（ｍ，２Ｈ）、０．９７（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

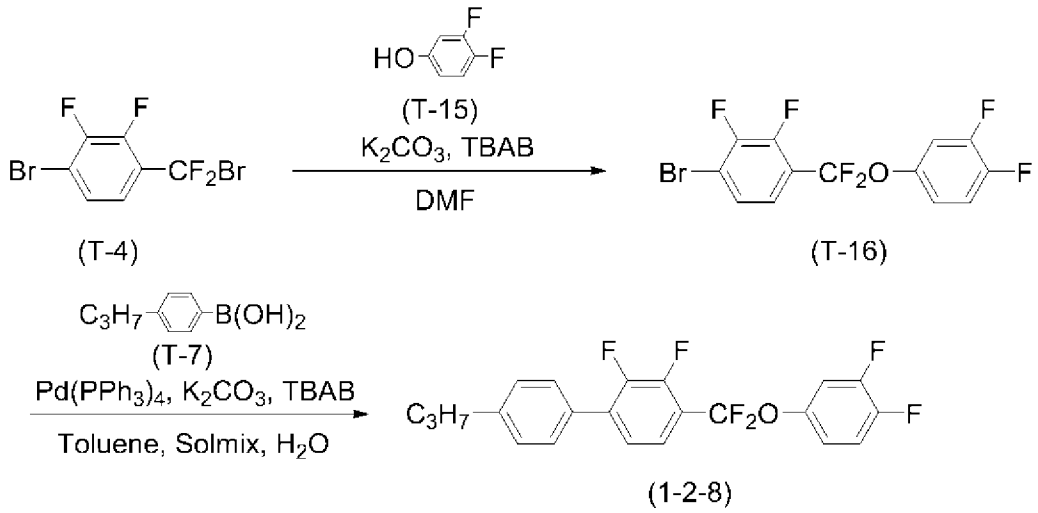
[0188] 化合物（Ｎｏ．１－１－１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ ＜－５０．０ Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝－１３３℃；光学的異方性（Δｎ）＝－０．０３６３；誘電率異方性（Δε）＝１３．２；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝１３．８；粘度（η）＝１７．２ｍＰａ・ｓ．

[実施例６]

[0189] 化合物（Ｎｏ．１－２－８）の合成



[0190] 第１工程

化合物（Ｔ－４）（３．００ｇ）および化合物（Ｔ－１５）（１．４６ｇ）を原料として用い、実施例１の第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔ－１６）（３．００ｇ；８７％）を得た。

[0191] 第２工程

化合物（Ｔ－１６）（１．７０ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－２－８）（１．３２ｇ；７０％）を得た。

[0192] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５２－７．４５（ｍ，３Ｈ）、７．３３－７．２６（ｍ，３Ｈ）、７．２２－７．１４（ｍ，２Ｈ）、７．０９－７．０３（ｍ，１Ｈ）、２．６５（ｔ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，２Ｈ）、１．７５－１．６４（ｍ，２Ｈ）、０．９８（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

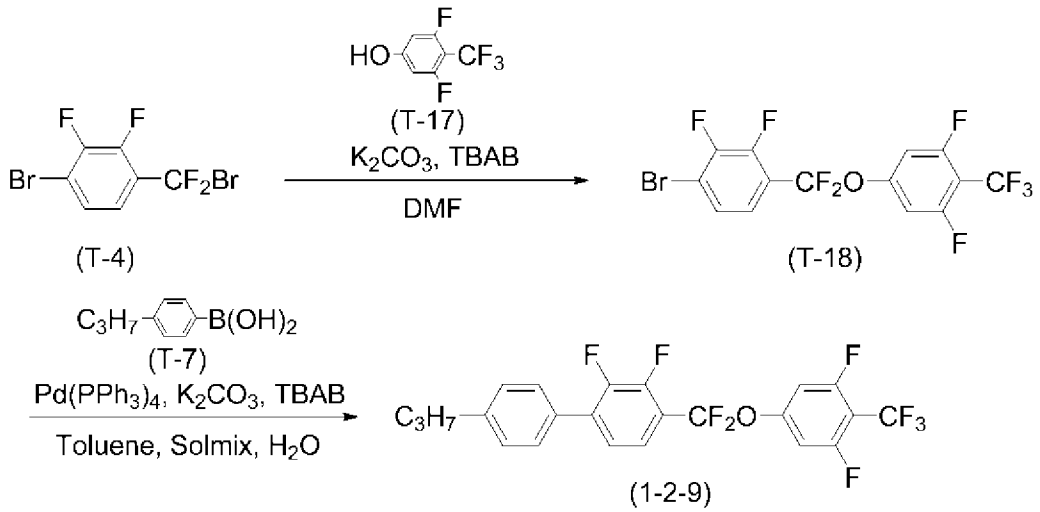
[0193] 化合物（Ｎｏ．１－２－８）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　３９．２　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝１３．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１３０；誘電率異方性（Δε）＝１３．４；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝８．５；粘度（η）＝３６．７ｍＰａ・ｓ．

[実施例７]

[0194] 化合物（Ｎｏ．１－２－９）の合成



[0195] 第１工程

化合物（Ｔ－４）（２０．０ｇ）および化合物（Ｔ－１７）（１４．８ｇ）を原料として用い、実施例１の第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔ－１８）（２１．７ｇ；８０％）を得た。

[0196] 第２工程

化合物（Ｔ－１８）（４．００ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－２－９）（３．６８ｇ；８４％）を得た。

[0197] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５２－７．４５（ｍ，３Ｈ）、７．３５－７．２８（ｍ，３Ｈ）、７．０４－６．９７（ｍ，２Ｈ）、２．６６（ｔ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，２Ｈ）、１．７６－１．６５（ｍ，２Ｈ）、０．９８（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

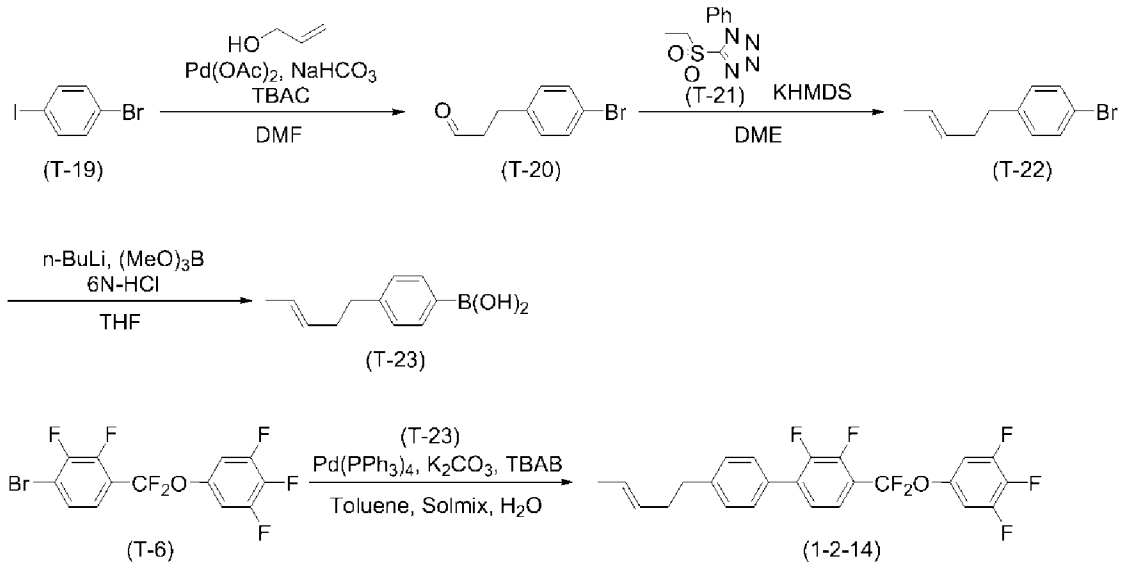
[0198] 化合物（Ｎｏ．１－２－９）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６０．４　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝－１．６℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１２４；誘電率異方性（Δε）＝３０．９；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝９．２；粘度（η）＝４９．５ｍＰａ・ｓ．

[実施例８]

[0199] 化合物（Ｎｏ．１－２－１４）の合成



[0200] 第１工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－１９）（５０．０ｇ）、アリルアルコール（２４．２ｍｌ）、酢酸パラジウム（０．７９４ｇ）、炭酸水素ナトリウム（４４．５ｇ）、およびＴＢＡＣ（テトラブチルアンモニウムクロリド）（５４．０ｇ）を反応器に入れて、４０℃で８時間撹拌した。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－２０）（２６．１ｇ；６９％）を得た。

[0201] 第２工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－２０）（２６．１ｇ）、化合物（Ｔ－２１）（３７．９ｇ）、およびＤＭＥ（エチレングリコールジメチルエーテル）（４００ｍｌ）を反応器に入れて、－７０℃に冷却した。そこへＫＨＭＤＳ（ヘキサメチルジシラザンカリウム）（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；１８４ｍｌ

）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ８時間撹拌した。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（ヘプタン）で精製して、化合物（Ｔ－２２）（２２．５ｇ；８２％）を得た。

[0202] 第３工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－２２）（１０．０ｇ）およびＴＨＦ（１５０ｍｌ）を反応器に入れ、－７０℃に冷却した。そこへｎ－ブチルリチウム（１．６０Ｍ；ｎ－ヘキサン溶液；３３．３ｍｌ）をゆっくりと加え１時間撹拌した。次にホウ酸トリメチル（７．０５ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１２時間撹拌した。次に－３０℃に冷却し、６Ｎ塩酸（４４．０ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。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、ヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔ－２３）（２．２０ｇ；２６％）を得た。

[0203] 第４工程

化合物（Ｔ－６）（４．０９ｇ）および化合物（Ｔ－２３）（２．２０ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－２－１４）（２．２３ｇ；４７％）を得た。

[0204] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５１－７．４４（ｍ，３Ｈ）、７．３４－７．２６（ｍ，３Ｈ）、７．０４－６．９６（ｍ，２Ｈ）、５．５５－５．４５（ｍ，２Ｈ）、２．７３（ｔ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、２．３８－２．３０（ｍ，２Ｈ）、１．７１－１．６２（ｍ，３Ｈ）．

[0205] 化合物（Ｎｏ．１－２－１４）の物性は、次のとおりであった。

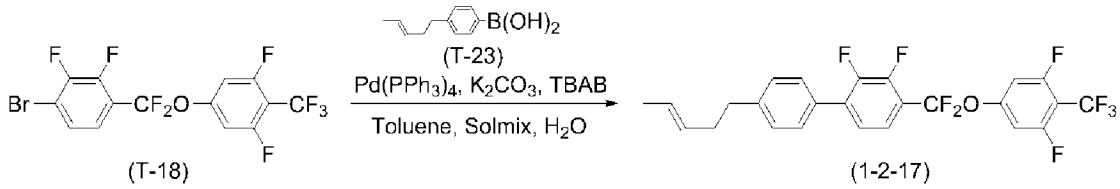
転移温度：Ｃ　４３．７　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝２９．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１４４；誘電率異方性（Δε）＝２２．６；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．８；粘度（

η）＝３７．６ｍＰａ・ｓ．

[実施例９]

[0206] 化合物（Ｎｏ．１－２－１７）の合成



[0207] 第１工程

化合物（Ｔ－１８）（４．６２ｇ）および化合物（Ｔ－２３）（２．２０ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－２－１７）（３．５０ｇ；６６％）を得た。

[0208] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５２－７．４５（ｍ，３Ｈ）、７．３５－７．２８（ｍ，３Ｈ）、７．０４－６．９６（ｍ，２Ｈ）、５．５５－５．４５（ｍ，２Ｈ）、２．７３（ｔ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、２．３８－２．３０（ｍ，２Ｈ）、１．７１－１．６２（ｍ，３Ｈ）．

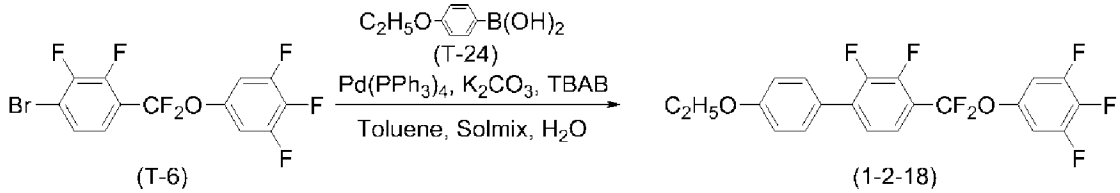
[0209] 化合物（Ｎｏ．１－２－１７）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　４９．２　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝２６．４℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１４４；誘電率異方性（Δε）＝３１．９；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．８；粘度（η）＝５０．９ｍＰａ・ｓ．

[実施例１０]

[0210] 化合物（Ｎｏ．１－２－１８）の合成



[0211] 第１工程

化合物（Ｔ－６）（５．００ｇ）および化合物（Ｔ－２４）（２．３５ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１

－２－１８）（４．５８ｇ；８３％）を得た。

[0212] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５２－７．４２（ｍ，３Ｈ）、７．３０－７．２４（ｍ，１Ｈ）、７．０３－６．９６（ｍ，４Ｈ）、４．１０（ｑ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，２Ｈ）、１．４６（ｔ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，３Ｈ）．

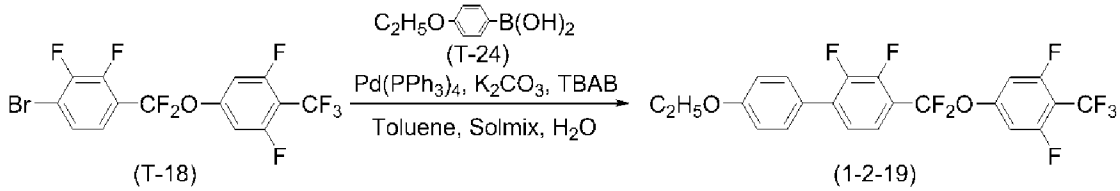
[0213] 化合物（Ｎｏ．１－２－１８）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　８２．８　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝３７．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１４０；誘電率異方性（Δε）＝２５．７；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝９．２；粘度（η）＝５２．６ｍＰａ・ｓ．

[実施例１１]

[0214] 化合物（Ｎｏ．１－２－１９）の合成



[0215] 第１工程

化合物（Ｔ－１８）（５．００ｇ）および化合物（Ｔ－２４）（２．０８ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－２－１９）（４．６０ｇ；８４％）を得た。

[0216] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５４－７．４３（ｍ，３Ｈ）、７．３４－７．２５（ｍ，１Ｈ）、７．０７－６．９６（ｍ，４Ｈ）、４．１０（ｑ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，２Ｈ）、１．４６（ｔ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，３Ｈ）．

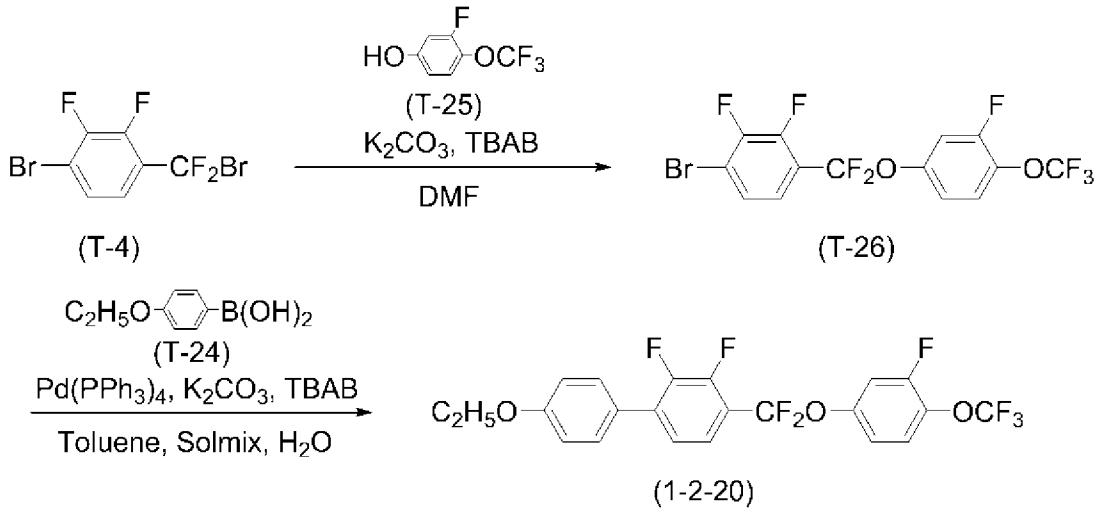
[0217] 化合物（Ｎｏ．１－２－１９）の物性は、次のとおりであった。なお、上限温度、光学的異方性、誘電率異方性、短軸方向の誘電率、および粘度の測定には、化合物と母液晶との割合が５重量％：９５重量％である試料を用いた。

転移温度：Ｃ　９６．３　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝３９．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１５７；誘電率異方性（Δε）＝３４．１；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝８．５；粘度（η）＝５７．４ｍＰａ・ｓ．

[実施例１２]

[0218] 化合物（Ｎｏ．１－２－２０）の合成



[0219] 第１工程

化合物（Ｔ－４）（６．００ｇ）および化合物（Ｔ－２５）（４．３９ｇ）を原料として用い、実施例１の第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔ－２６）（５．９４ｇ；７３％）を得た。

[0220] 第２工程

化合物（Ｔ－２６）（２．１７ｇ）および化合物（Ｔ－２４）（０．９１０ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－２－２０）（１．８８ｇ；７９％）を得た。

[0221] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５４－７．４５（ｍ，３Ｈ）、７．３６－７．３０（ｍ，１Ｈ）、７．３０－７．２５（ｍ，１Ｈ）、７．２４－７．１８（ｍ，１Ｈ）、７．１５－７．１０（ｍ，１Ｈ）、７．０３－６．９７（ｍ，２Ｈ）、４．１０（ｑ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，２Ｈ）、１．４６（ｔ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，３Ｈ）．

[0222] 化合物（Ｎｏ．１－２－２０）の物性は、次のとおりであった。なお、上限温度、光学的異方性、誘電率異方性、短軸方向の誘電率、および粘度の測

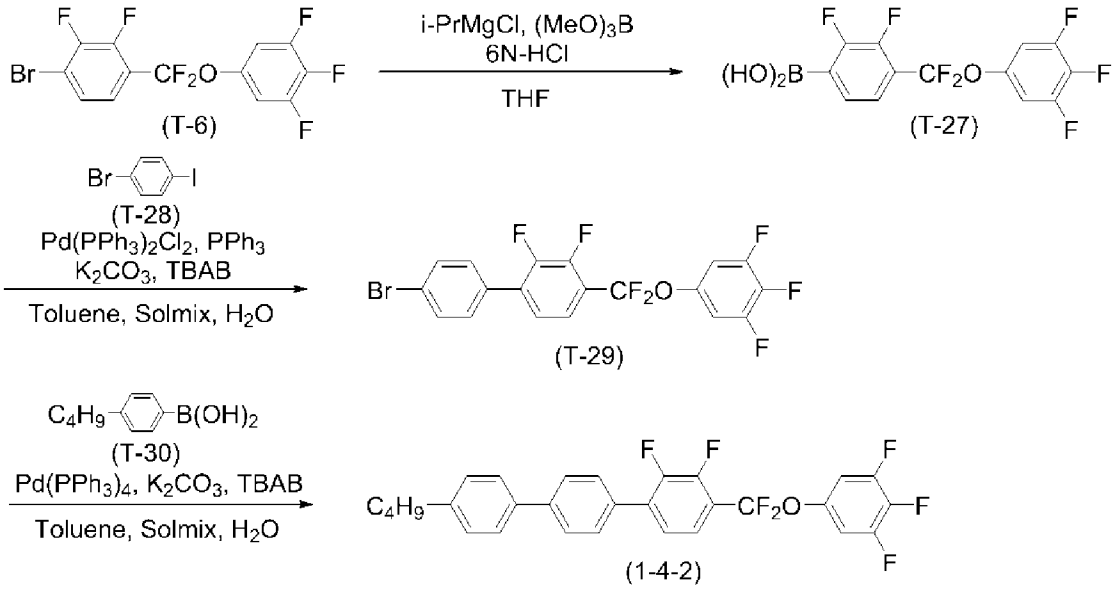
定には、化合物と母液晶との割合が１０重量％：９０重量％である試料を用いた。

転移温度：Ｃ　８５．１　Ｎ　９３．３　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝５５．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１５７；誘電率異方性（Δε）＝２１．１；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．５；粘度（η）＝４６．４ｍＰａ・ｓ．

[実施例１３]

[0223] 化合物（Ｎｏ．１－４－２）の合成



[0224] 第１工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－６）（１５．０ｇ）、およびＴＨＦ（１５０ｍｌ）を反応器に入れ、－１０℃に冷却した。そこへ塩化イソプロピルマグネシウム（２．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；２３．１ｍｌ）をゆっくりと加え１時間撹拌した。次にホウ酸トリメチル（６．１２ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１２時間撹拌した。次に－３０℃に冷却し、６Ｎ塩酸（４０．０ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。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、ヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔ－２７）（１２．０ｇ；８

８％）を得た。

[0225] 第２工程

窒素雰囲気下、ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０．２９５ｇ）、トリフェニルホスフィン（０．２２０ｇ）、およびソルミックス（登録商標）Ａ－１１（４０．０ｍｌ）を反応器に入れて、１時間加熱還流を行った。次に化合物（Ｔ－２７）（５．００ｇ）、化合物（Ｔ－２８）（３．９６ｇ）、炭酸カリウム（５．８０ｇ）、ＴＢＡＢ（０．９０２ｇ）、トルエン（４０．０ｍｌ）、および水（４０．０ｍｌ）を加え、１０時間加熱還流を行った。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、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（ヘプタン）で精製した。さらにヘプタンとソルミックス（登録商標）Ａ－１１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－２９）（４．００ｇ；６１％）を得た。

[0226] 第３工程

化合物（Ｔ－２９）（４．００ｇ）および化合物（Ｔ－３０）（１．６５ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－４－２）（３．６０ｇ；９０％）を得た。

[0227] 化学シフトδ（ｐｐｍ；$CDCl_3$）：７．７４－７．６９（ｍ，２Ｈ）、７．６５－７．６０（ｍ，２Ｈ）、７．５９－７．５４（ｍ，２Ｈ）、７．５３－７．４７（ｍ，１Ｈ）、７．３８－７．３２（ｍ，１Ｈ）、７．３２－７．２７（ｍ，２Ｈ）、７．０５－６．９２（ｍ，２Ｈ）、２．６７（ｔ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，２Ｈ）、１．７０－１．６１（ｍ，２Ｈ）、１．４６－１．３５（ｍ，２Ｈ）、０．９６（ｔ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，３Ｈ）．

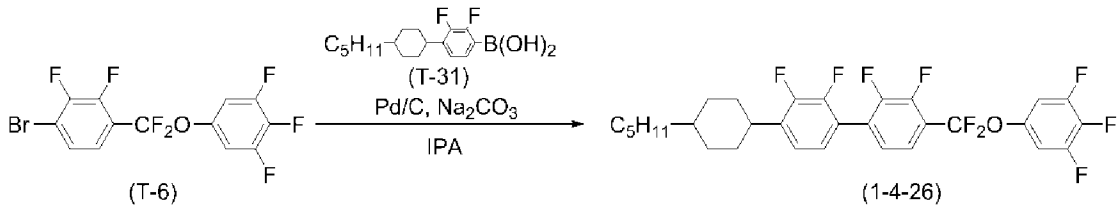
[0228] 化合物（Ｎｏ．１－４－２）の物性は、次のとおりであった。なお、上限温度、光学的異方性、誘電率異方性、短軸方向の誘電率、および粘度の測定には、化合物と母液晶との割合が１０重量％：９０重量％である試料を用いた。

転移温度：Ｃ　９８．８　S_A　１５２　Ｎ　１６６　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝１１６℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１９７；誘電率異方性（Δε）＝１９．９；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝６．５；粘度（η）＝６７．９ｍＰａ・ｓ．

[実施例１４]

[0229] 化合物（Ｎｏ．１－４－２６）の合成



[0230] 第１工程

窒素雰囲気下、ＷＯ２００９／１５０９６６Ａ１に記載された手法に従い合成した化合物（Ｔ－３１）（１．９９ｇ）、化合物（Ｔ－６）（２．５０ｇ）、パラジウムカーボン触媒（５％Ｐｄ／ＣのＮＸタイプ（５０％湿潤品）；エヌ・イー・ケムキャット製；０．０５４７ｇ）、炭酸ナトリウム（２．７２ｇ）、およびＩＰＡ（２５．０ｍｌ）を反応器に入れて、５時間加熱還流を行った。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、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（ヘプタン）で精製した。さらにＩＰＡと酢酸エチルとの混合溶媒（体積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（１－４－２６）（２．０８ｇ；５６％）を得た。

[0231] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５４－７．４８（ｍ，１Ｈ）、７．３１－７．２３（ｍ，１Ｈ）、７．１３－７．０５（ｍ，２Ｈ）、７．０４－６．９６（ｍ，２Ｈ）、２．９０（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝２．９Ｈｚ，１Ｈ）、１．９７－１．８５（ｍ，４Ｈ）、１．５７－１．４５（ｍ，３Ｈ）、１．４０－１．２０（ｍ，９Ｈ）、１．１８－１．０５（ｍ，２Ｈ）、０．９０（ｔ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，３Ｈ）．

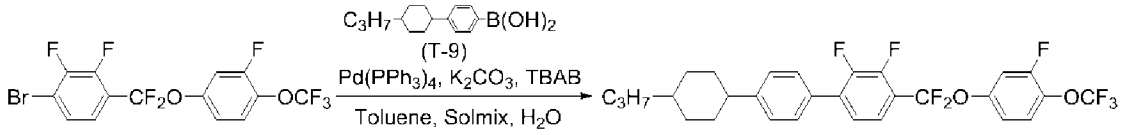
[0232] 化合物（Ｎｏ．１－４－２６）の物性は、次のとおりであった。なお、上限温度、光学的異方性、誘電率異方性、短軸方向の誘電率、および粘度の測定には、化合物と母液晶との割合が１０重量％：９０重量％である試料を用いた。

転移温度：Ｃ　９３．９　Ｎ　１３７　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝８３．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１３７；誘電率異方性（Δε）＝１５．１；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝８．５；粘度（η）＝８５．０ｍＰａ・ｓ．

[実施例１５]

[0233] 化合物（Ｎｏ．１－４－２８）の合成



(T-26) (1-4-28)

[0234] 第１工程

化合物（Ｔ－２６）（３．５０ｇ）および化合物（Ｔ－９）（１．９７ｇ）を原料として用い、実施例２の第２工程と同様の手法により、化合物（１－４－２８）（３．０２ｇ；６８％）を得た。

[0235] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５２－７．４５（ｍ，３Ｈ）、７．３５－７．２６（ｍ，４Ｈ）、７．２４－７．１９（ｍ，１Ｈ）、７．１５－７．１０（ｍ，１Ｈ）、２．５４（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，１Ｈ）、１．９８－１．８６（ｍ，４Ｈ）、１．５５－１．４４（ｍ，２Ｈ）、１．４１－１．２７（ｍ，３Ｈ）、１．２６－１．１９（ｍ，２Ｈ）、１．１４－１．０２（ｍ，２Ｈ）、０．９１（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

[0236] 化合物（Ｎｏ．１－４－２８）の物性は、次のとおりであった。

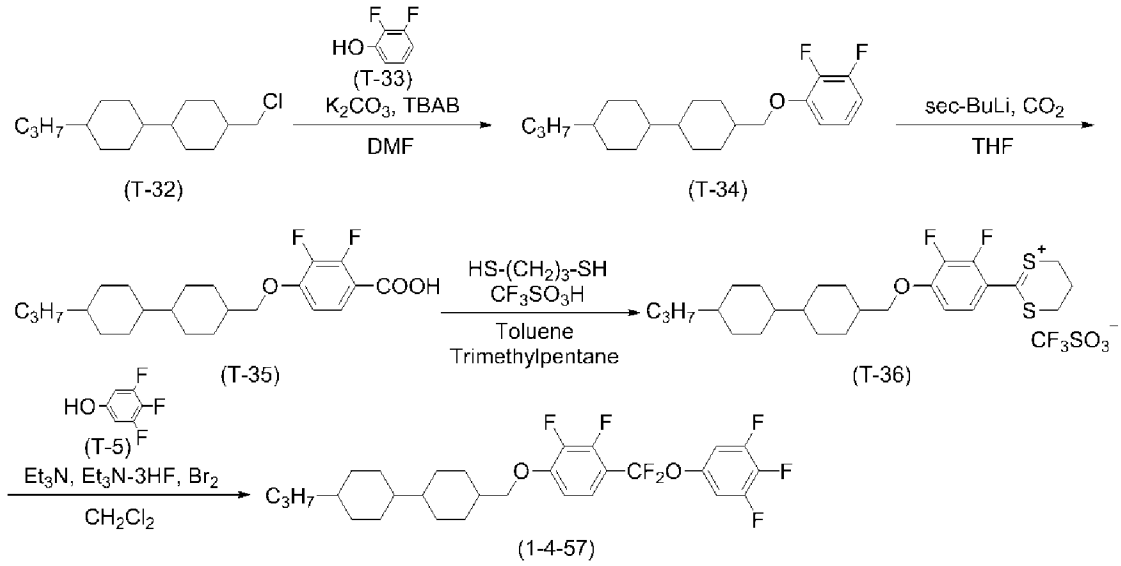
転移温度：Ｃ　５９．４　S_A　１２６　Ｎ　１６２　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝１２６℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１５０；誘電率異方性（Δε）＝１３．９；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝５．８；粘度（η

）＝５８．９ｍＰａ・ｓ．

[実施例１６]

[0237] 化合物（Ｎｏ．１－４－５７）の合成



[0238] 第１工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－３２）（２０．０ｇ）、化合物（Ｔ－３３）（１２．２ｇ）、炭酸カリウム（２１．５ｇ）、ＴＢＡＢ（５．０２ｇ）、およびＤＭＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れて、９０℃で１２時間撹拌した。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（ヘプタン）で精製した。さらにヘプタンとソルミックス（登録商標）Ａ－１１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－３４）（２２．６ｇ；８３％）を得た。

[0239] 第２工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－３４）（２２．６ｇ）およびＴＨＦ（４５０ｍｌ）を反応器に入れ、－７０℃に冷却した。そこへｓｅｃ－ブチルリチウム（１．０１Ｍ；シクロヘキサン、ｎ－ヘキサン溶液；７２．３ｍｌ）をゆっくりと加え１時間撹拌した。次にドライアイス（５．６８ｇ）をゆっくりと加え室温に戻しつつ８時間撹拌した。反応混合物を１Ｎ塩酸に注ぎ込み、

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、トルエンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔ－３５）（２３．３ｇ；９２％）を得た。

[0240] 第３工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－３５）（２３．３ｇ）、トルエン（５０．０ｍｌ）、および２，２，４－トリメチルペンタン（５０．０ｍｌ）を反応器に入れて、６０℃に加熱した。そこへプロパンジチオール（６．５２ｍｌ）を加え１時間撹拌したのち、トリフルオロメタンスルホン酸（１１．５ｍｌ）をゆっくりと加え１時間撹拌した。続いて留出してくる水を除去しつつ、さらに２時間加熱還流を行った。反応混合物を室温まで冷却したのち、減圧下で濃縮し、残渣をｔ－ブチルメチルエーテルからの再結晶により精製して、化合物（Ｔ－３６）（２５．７ｇ；７１％）を得た。

[0241] 第４工程

窒素雰囲気下、化合物（Ｔ－５）（２．８８ｇ）、トリエチルアミン（２．９４ｍｌ）、およびジクロロメタン（８０．０ｍｌ）を反応器に入れて、－７０℃に冷却した。そこへ化合物（Ｔ－３６）（１０．０ｇ）のジクロロメタン（１２０ｍｌ）溶液をゆっくりと加え１時間撹拌した。次にフッ化水素トリエチルアミン錯体（７．９３ｍｌ）をゆっくりと加え３０分間撹拌した。続いて臭素（４．１８ｍｌ）をゆっくりと加えさらに１時間撹拌した。反応混合物を氷水に注ぎ込み、炭酸水素ナトリウムを用いて中和したのち、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（ヘプタン）で精製した。さらにヘプタンとソルミックス（登録商標）Ａ－１１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（１－４－５７）（６．６９ｇ；７６％）を得た。

[0242] 化学シフトδ（ｐｐｍ；$CDCl_3$）：７．３５－７．２９（ｍ，１Ｈ）、７．００－６．９１（ｍ，２Ｈ）、６．７９－６．７２（ｍ，１Ｈ）、３．８６（ｄ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，２Ｈ）、１．９８－１．８７（ｍ，２Ｈ）、１

．８５－１．７６（ｍ，７Ｈ）、１．３５－１．２４（ｍ，２Ｈ）、１．２０－１．１１（ｍ，３Ｈ）、１．１１－０．９２（ｍ，８Ｈ）、０．９２－０．８１（ｍ，５Ｈ）．

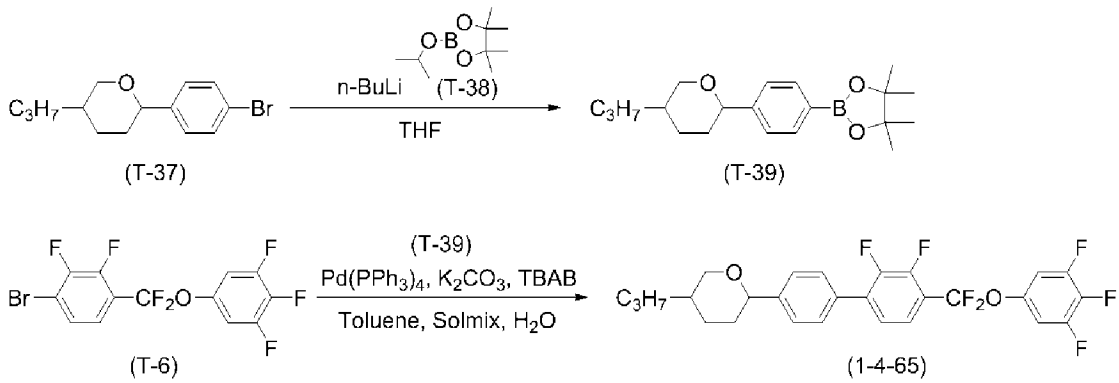
[0243] 化合物（Ｎｏ．１－４－５７）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　８３．８　Ｎ　１５０　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝１１０℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１０４；誘電率異方性（Δε）＝７．４；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝９．２；粘度（η）＝８０．４ｍＰａ・ｓ．

[実施例１７]

[0244] 化合物（Ｎｏ．１－４－６５）の合成



[0245] 第１工程

窒素雰囲気下、P. Kirsch et al., European Journal of Organic Chemistry. 2006, 15, 3326.に記載された手法に従い合成した化合物（Ｔ－３７）（２０．０ｇ）およびＴＨＦ（３５０ｍｌ）を反応器に入れ、－７０℃に冷却した。そこへｎ－ブチルリチウム（１．５８Ｍ；ｎ－ヘキサン溶液；５３．６ｍｌ）をゆっくりと加え１時間撹拌した。次に化合物（Ｔ－３８）（１７．１ｇ）のＴＨＦ（５０．０ｍｌ）溶液をゆっくりと加え室温に戻しつつ３時間撹拌した。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（体積比、トルエン：酢酸エチル＝１０：１）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

－３９）（１７．５ｇ；７５％）を得た。

[0246] 第２工程

化合物（Ｔ－６）（３．５０ｇ）および化合物（Ｔ－３９）（２．９７ｇ）を原料として用い、実施例２の第２工程と同様の手法により、化合物（１－４－６５）（３．８３ｇ；８３％）を得た。

[0247] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５５－７．５０（ｍ，２Ｈ）、７．５０－７．４４（ｍ，３Ｈ）、７．３１－７．２５（ｍ，１Ｈ）、７．０３－６．９６（ｍ，２Ｈ）、４．３４（ｄｄ，Ｊ＝１１．４Ｈｚ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．１２（ｄｄｄ，Ｊ＝１１．２Ｈｚ，Ｊ＝４．２Ｈｚ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ）、３．２４（ｔ，Ｊ＝１１．１Ｈｚ，１Ｈ）、２．０６－１．９８（ｍ，１Ｈ）、１．９６－１．８８（ｍ，１Ｈ）、１．７５－１．５８（ｍ，２Ｈ）、１．４６－１．２４（ｍ，３Ｈ）、１．２４－１．０８（ｍ，２Ｈ）、０．９３（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

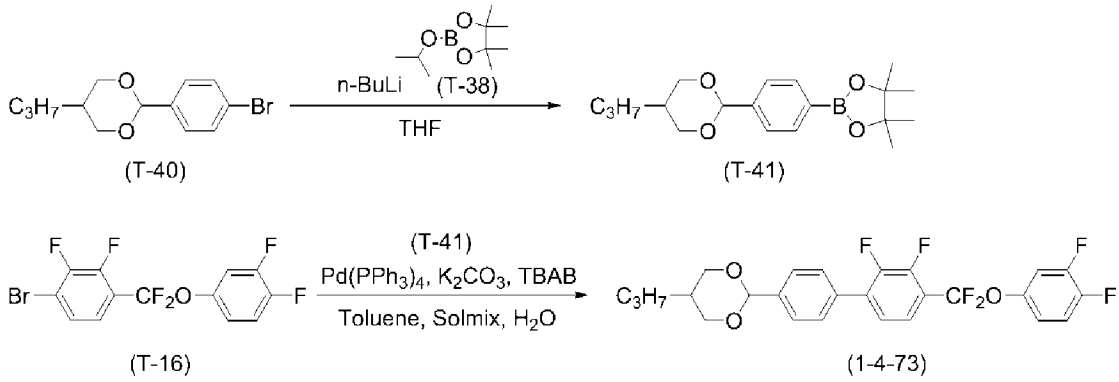
[0248] 化合物（Ｎｏ．１－４－６５）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６９．８　Ｓ$_A$　９６．５　Ｎ　１４４　Ｉ．

上限温度（Ｔ$_{NI}$）＝１１２℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１５０；誘電率異方性（Δε）＝２１．４；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．２；粘度（η）＝７４．２ｍＰａ・ｓ．

[実施例１８]

[0249] 化合物（Ｎｏ．１－４－７３）の合成



[0250] 第１工程

ＵＳ５６８３６２３Ａ１に記載された手法に従い合成した化合物（Ｔ－４

０）（２０．０ｇ）を原料として用い、実施例１７の第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔ－４１）（１７．４ｇ；７５％）を得た。

[0251] 第２工程

化合物（Ｔ－１６）（１．３０ｇ）および化合物（Ｔ－４１）（１．２２ｇ）を原料として用い、実施例２の第２工程と同様の手法により、化合物（１－４－７３）（１．４０ｇ；８１％）を得た。

[0252] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．６４－７．５９（ｍ，２Ｈ）、７．５８－７．５３（ｍ，２Ｈ）、７．５２－７．４５（ｍ，１Ｈ）、７．３０－７．２５（ｍ，１Ｈ）、７．２２－７．１４（ｍ，２Ｈ）、７．０９－７．０３（ｍ，１Ｈ）、５．４８（ｓ，１Ｈ）、４．２６（ｄｄ，Ｊ＝１１．７Ｈｚ，Ｊ＝４．７Ｈｚ，２Ｈ）、３．５７（ｔ，Ｊ＝１１．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．２４－２．１２（ｍ，１Ｈ）、１．４１－１．３１（ｍ，２Ｈ）、１．１５－１．０８（ｍ，２Ｈ）、０．９４（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

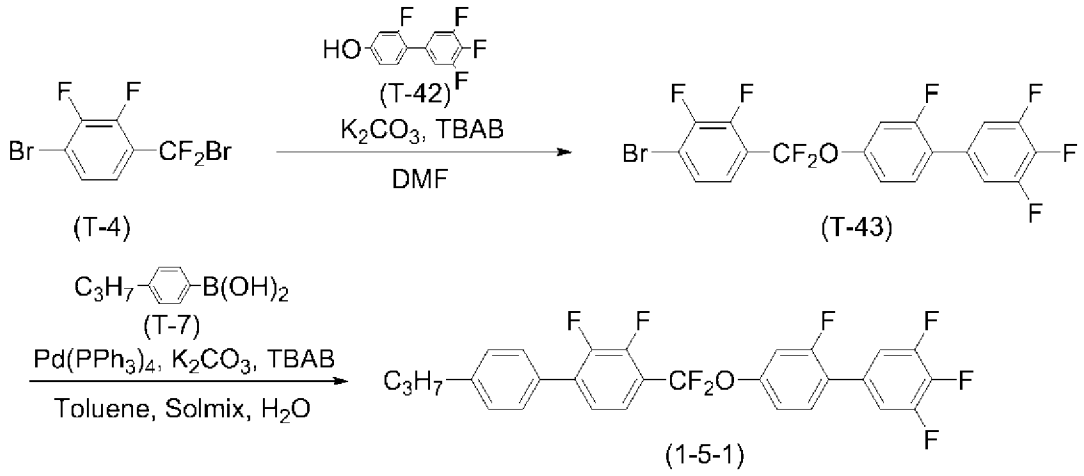
[0253] 化合物（Ｎｏ．１－４－７３）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　９２．６　Ｎ　１７６　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝１３３℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１６４；誘電率異方性（Δε）＝１６．８；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．２；粘度（η）＝８０．７ｍＰａ・ｓ．

[実施例１９]

[0254] 化合物（Ｎｏ．１－５－１）の合成



[0255] 第１工程

ＷＯ２００８／１０５２８６Ａ１に記載された手法に従い合成した化合物（Ｔ－４２）（６．３２ｇ）および化合物（Ｔ－４）（１０．０ｇ）を原料として用い、実施例１の第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔ－４３）（８．９３ｇ；８５％）を得た。

[0256] 第２工程

化合物（Ｔ－４３）（４．５０ｇ）を原料として用い、実施例１の第５工程と同様の手法により、化合物（１－５－１）（３．９７ｇ；８２％）を得た。

[0257] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５４－７．４６（ｍ，３Ｈ）、７．４２－７．３６（ｍ，１Ｈ）、７．３３－７．２８（ｍ，３Ｈ）、７．２２－７．１５（ｍ，４Ｈ）、２．６６（ｔ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，２Ｈ）、１．７５－１．６６（ｍ，２Ｈ）、０．９９（ｔ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，３Ｈ）．

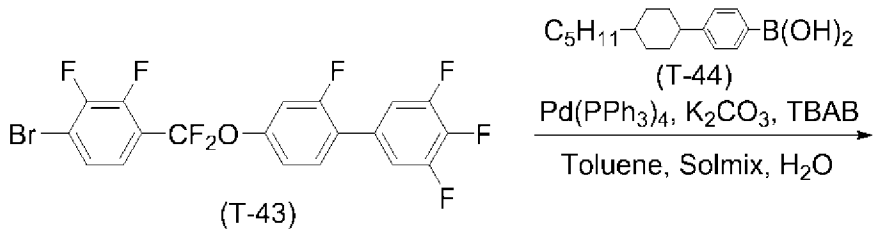
[0258] 化合物（Ｎｏ．１－５－１）の物性は、次のとおりであった。なお、上限温度、光学的異方性、誘電率異方性、短軸方向の誘電率、および粘度の測定には、化合物と母液晶との割合が１０重量％：９０重量％である試料を用いた。

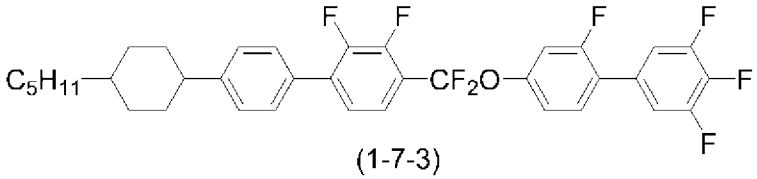
転移温度：Ｃ　１１２　Ｎ　１２０　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝７８．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１７７；誘電率異方性（Δε）＝２４．９；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．５；粘度（η）＝６８．２ｍＰａ・ｓ．

[実施例２０]

[0259] 化合物（Ｎｏ．１－７－３）の合成





[0260] 第１工程

化合物（Ｔ－４３）（１．１９ｇ）および化合物（Ｔ－４４）（０．７４３ｇ）を原料として用い、実施例２の第２工程と同様の手法により、化合物（１－７－３）（１．１６ｇ；７４％）を得た。

[0261] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．５４－７．４６（ｍ，３Ｈ）、７．４２－７．３６（ｍ，１Ｈ）、７．３６－７．２７（ｍ，３Ｈ）、７．２３－７．１４（ｍ，４Ｈ）、２．５４（ｔｔ，Ｊ＝１２．１Ｈｚ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，１Ｈ）、１．９８－１．８６（ｍ，４Ｈ）、１．５７－１．４４（ｍ，２Ｈ）、１．３９－１．２０（ｍ，９Ｈ）、１．１４－１．０２（ｍ，２Ｈ）、０．９０（ｔ，Ｊ＝７．１Ｈｚ，３Ｈ）．

[0262] 化合物（Ｎｏ．１－７－３）の物性は、次のとおりであった。なお、上限温度、光学的異方性、誘電率異方性、短軸方向の誘電率、および粘度の測定には、化合物と母液晶との割合が５重量％：９５重量％である試料を用いた。

転移温度：Ｃ　１０８　Ｎ　２５７　Ｉ．

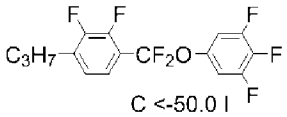
上限温度（T_{NI}）＝１６８℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１７７；誘電率異方性（Δε）＝１９．９；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝４．５；粘度（η）＝８５．２ｍＰａ・ｓ．

[0263] 既に記載した化合物（１）の合成法および実施例１～２０に記載した合成手順に従って以下に示す化合物（Ｎｏ．１－１－１）～（Ｎｏ．１－１－１

４）、化合物（Ｎｏ．１－２－１）～（Ｎｏ．１－２－８９）、化合物（Ｎｏ．１－３－１）～（Ｎｏ．１－３－３７）、化合物（Ｎｏ．１－４－１）～（Ｎｏ．１－４－９０）、化合物（Ｎｏ．１－５－１）～（Ｎｏ．１－５－３０）、化合物（Ｎｏ．１－６－１）～（Ｎｏ．１－６－１０）、化合物（Ｎｏ．１－７－１）～（Ｎｏ．１－７－６）、および化合物（Ｎｏ．１－８－１）～（Ｎｏ．１－８－４）を合成できる。

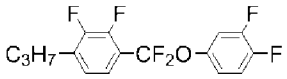
[0264]

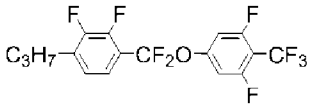
No.

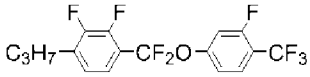
1-1-1 

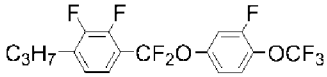
C <-50.0 I

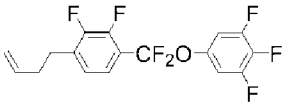
T_{NI} = -133 °C, Δn = -0.0363, Δε = 13.2, ε (⊥) = 13.8

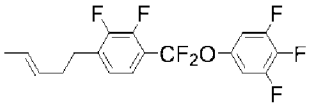
1-1-2 

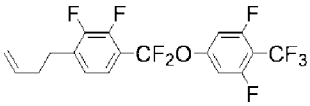
1-1-3 

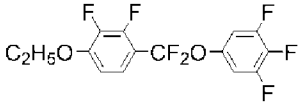
1-1-4 

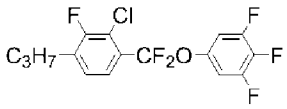
1-1-5 

1-1-6 

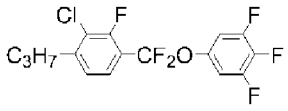
1-1-7 

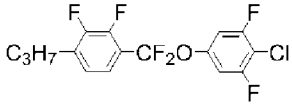
1-1-8 

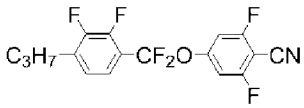
1-1-9 

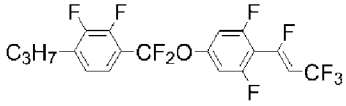
1-1-10 

No.

1-1-11 

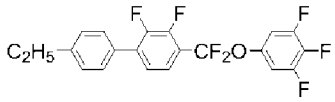
1-1-12 

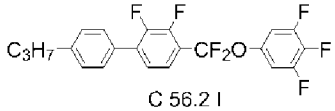
1-1-13 

1-1-14 

[0265]

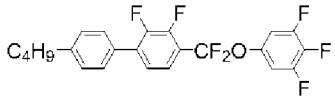
No.

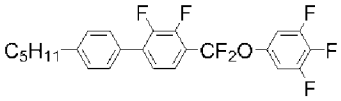
1-2-1 

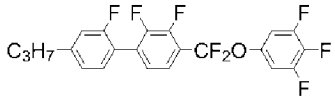
1-2-2 

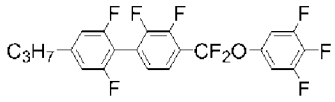
C 56.2 I

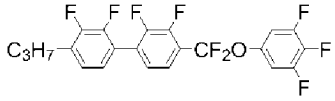
T_{NI} = 0.4 °C, Δn = 0.117, Δε = 21.2, ε (⊥) = 9.1

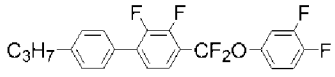
1-2-3 

1-2-4 

1-2-5 

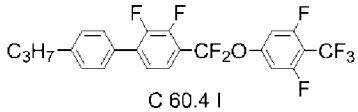
1-2-6 

1-2-7 

1-2-8 

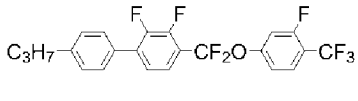
C 39.2 (N 5.8) I

T_{NI} = 13.7 °C, Δn = 0.130, Δε = 13.4, ε (⊥) = 8.5

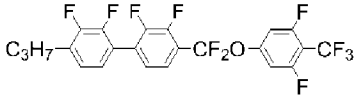
1-2-9 

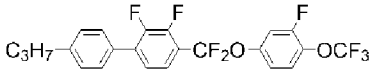
C 60.4 I

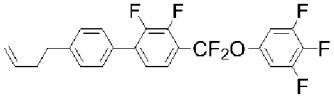
T_{NI} = -1.6 °C, Δn = 0.124, Δε = 30.9, ε (⊥) = 9.2

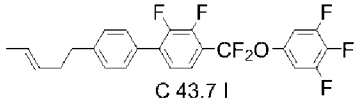
1-2-10 

No.

1-2-11 

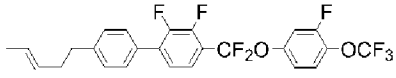
1-2-12 

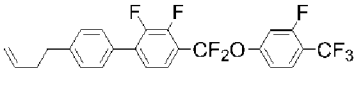
1-2-13 

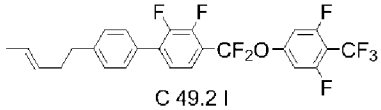
1-2-14 

C 43.7 I

T_{NI} = 29.7 °C, Δn = 0.144, Δε = 22.6, ε (⊥) = 7.8

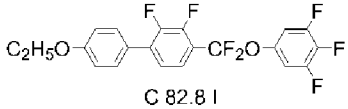
1-2-15 

1-2-16 

1-2-17 

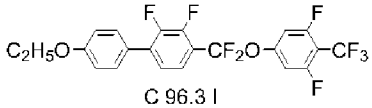
C 49.2 I

T_{NI} = 26.4 °C, Δn = 0.144, Δε = 31.9, ε (⊥) = 7.8

1-2-18 

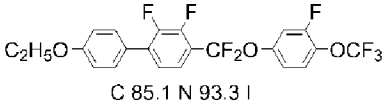
C 82.8 I

T_{NI} = 37.7 °C, Δn = 0.140, Δε = 25.7, ε (⊥) = 9.2

1-2-19 

C 96.3 I

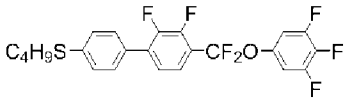
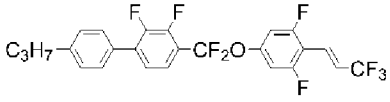
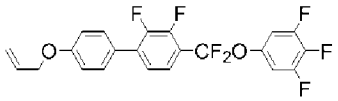
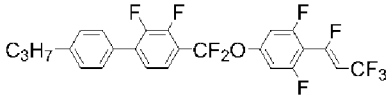
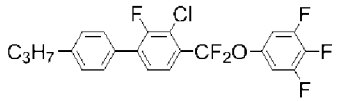
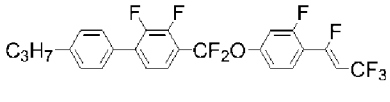
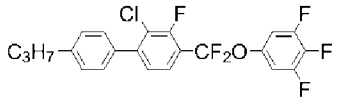
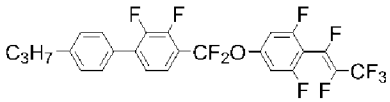
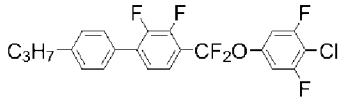
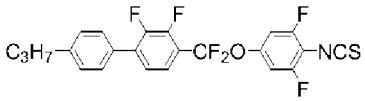
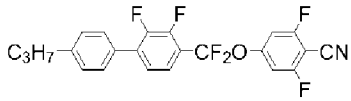
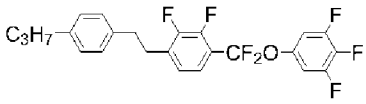
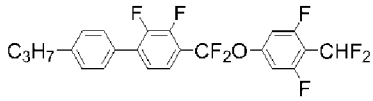
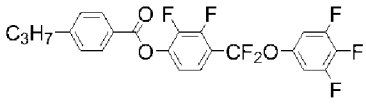
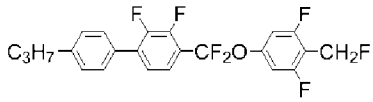
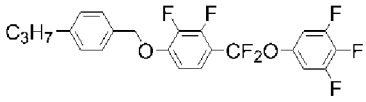
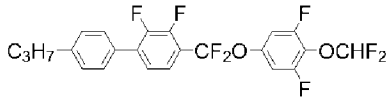
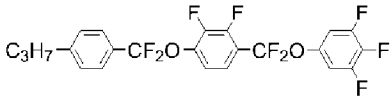
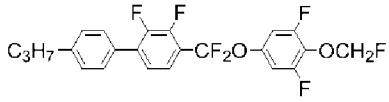
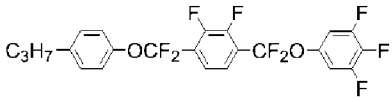
T_{NI} = 39.7 °C, Δn = 0.157, Δε = 34.1, ε (⊥) = 8.5

1-2-20 

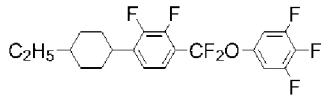
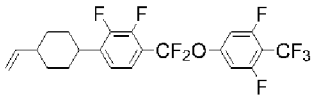
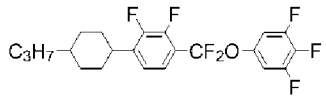
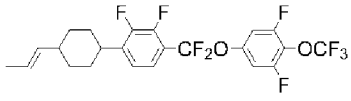
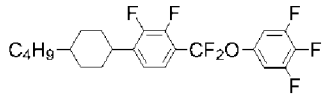
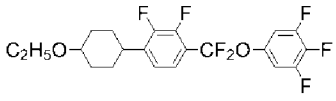
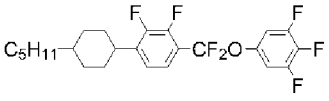
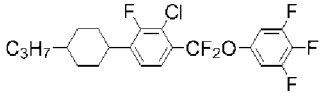
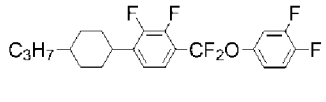
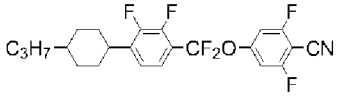
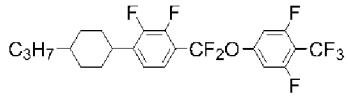
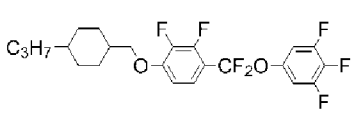
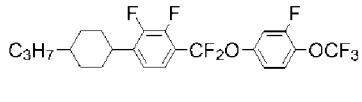
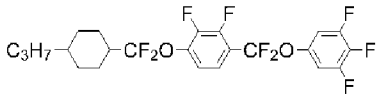
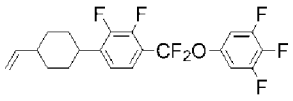
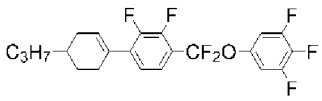
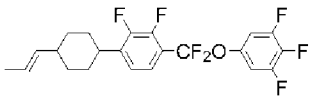
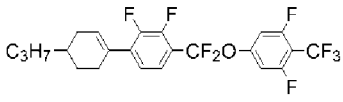
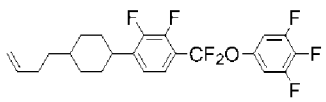
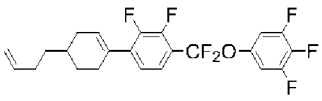
C 85.1 N 93.3 I

T_{NI} = 55.7 °C, Δn = 0.157, Δε = 21.1, ε (⊥) = 7.5

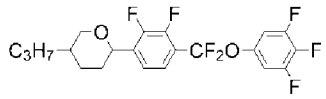
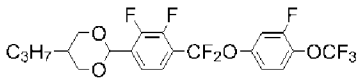
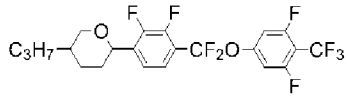
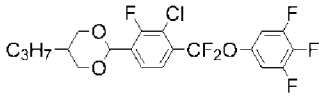
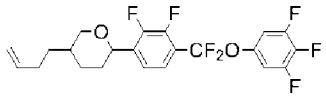
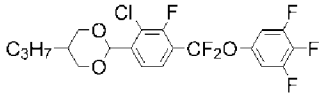
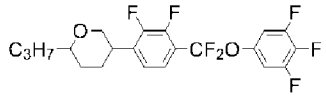
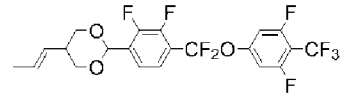
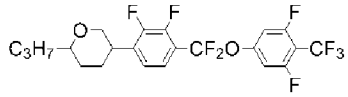
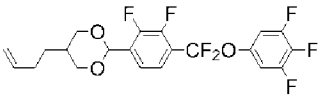
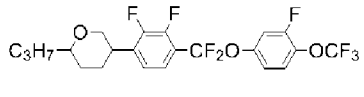
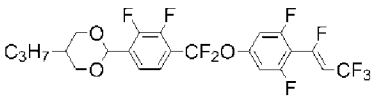
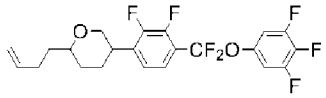
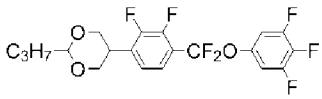
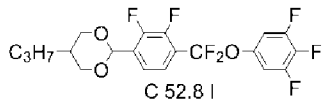
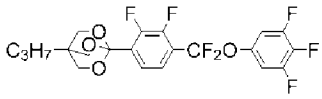
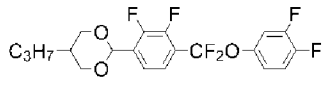
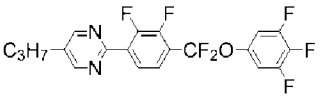
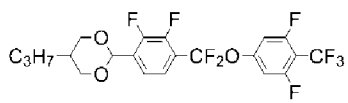
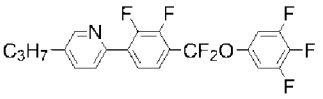
[0266]

No.		No.	
1-2-21		1-2-31	
1-2-22		1-2-32	
1-2-23		1-2-33	
1-2-24		1-2-34	
1-2-25		1-2-35	
1-2-26		1-2-36	
1-2-27		1-2-37	
1-2-28		1-2-38	
1-2-29		1-2-39	
1-2-30		1-2-40	

[0267]

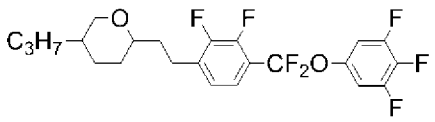
No.		No.	
1-2-41		1-2-51	
1-2-42		1-2-52	
1-2-43		1-2-53	
1-2-44		1-2-54	
1-2-45		1-2-55	
1-2-46		1-2-56	
1-2-47		1-2-57	
1-2-48		1-2-58	
1-2-49		1-2-59	
1-2-50		1-2-60	

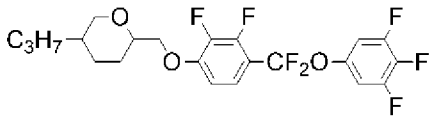
[0268]

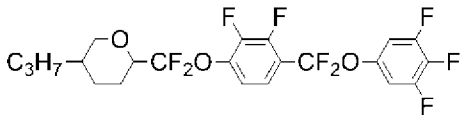
No.		No.	
1-2-61		1-2-71	
1-2-62		1-2-72	
1-2-63		1-2-73	
1-2-64		1-2-74	
1-2-65		1-2-75	
1-2-66		1-2-76	
1-2-67		1-2-77	
1-2-68	 C 52.8 I	1-2-78	
	T_{NI} = 5.7 °C, Δn = 0.070, Δε = 28.6, ε (⊥) = 8.5		
1-2-69		1-2-79	
1-2-70		1-2-80	

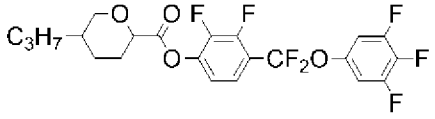
[0269]

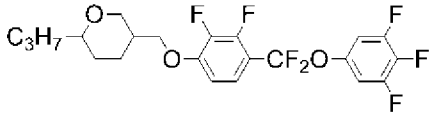
No.

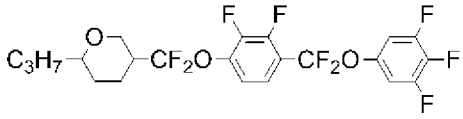
1-2-81 

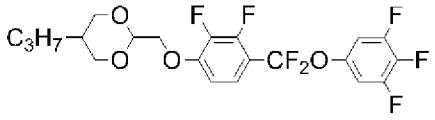
1-2-82 

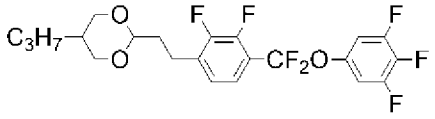
1-2-83 

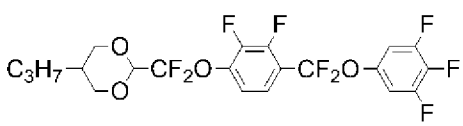
1-2-84 

1-2-85 

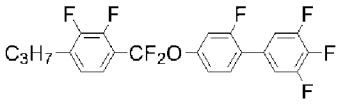
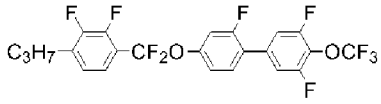
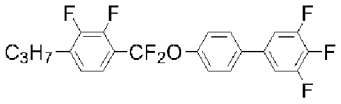
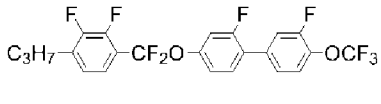
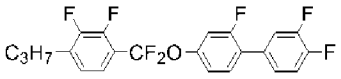
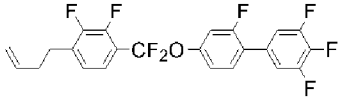
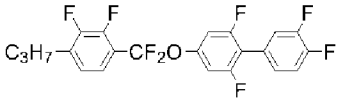
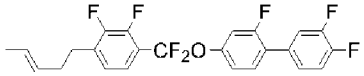
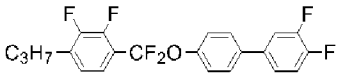
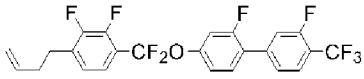
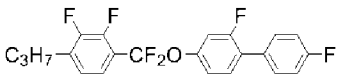
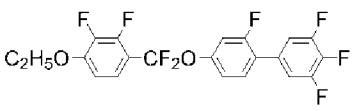
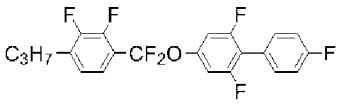
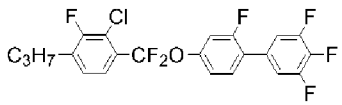
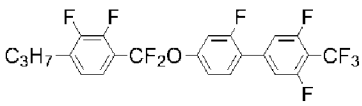
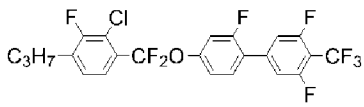
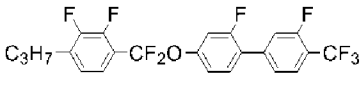
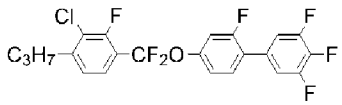
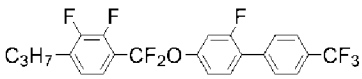
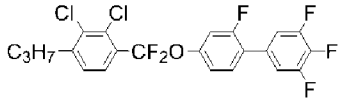
1-2-86 

1-2-87 

1-2-88 

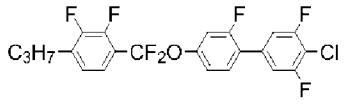
1-2-89 

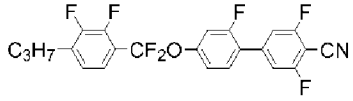
[0270]

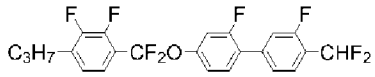
No.		No.	
1-3-1		1-3-11	
1-3-2		1-3-12	
1-3-3		1-3-13	
1-3-4		1-3-14	
1-3-5		1-3-15	
1-3-6		1-3-16	
1-3-7		1-3-17	
1-3-8		1-3-18	
1-3-9		1-3-19	
1-3-10		1-3-20	

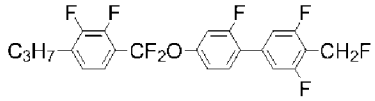
[0271]

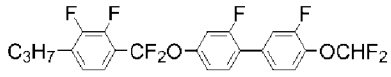
No.

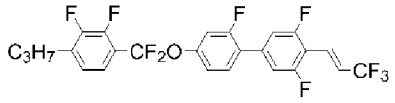
1-3-21 

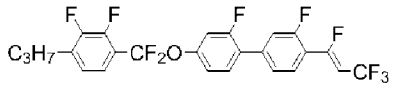
1-3-22 

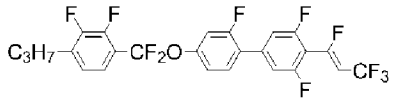
1-3-23 

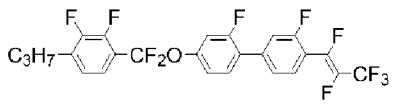
1-3-24 

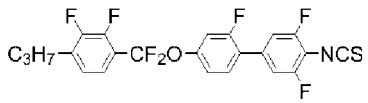
1-3-25 

1-3-26 

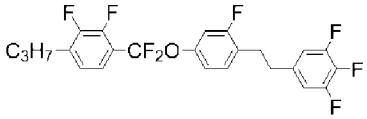
1-3-27 

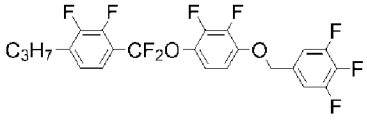
1-3-28 

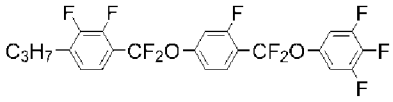
1-3-29 

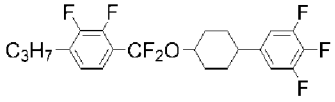
1-3-30 

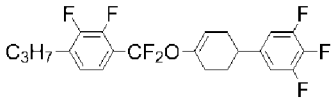
No.

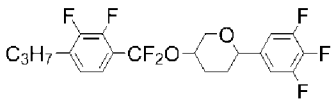
1-3-31 

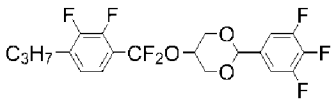
1-3-32 

1-3-33 

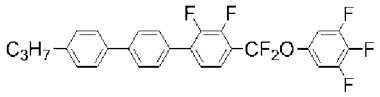
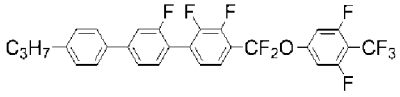
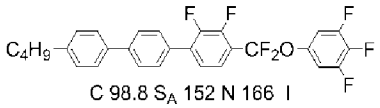
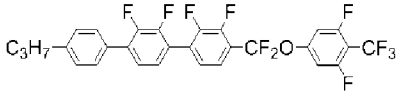
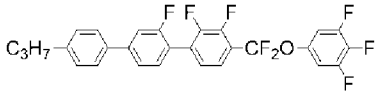
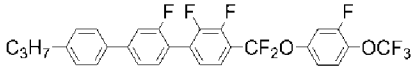
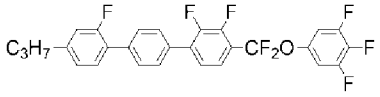
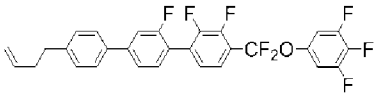
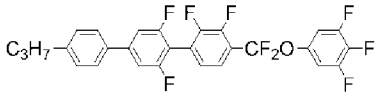
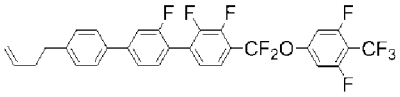
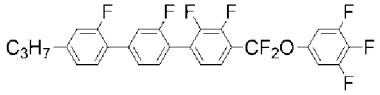
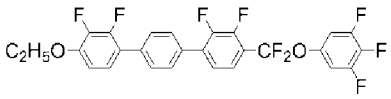
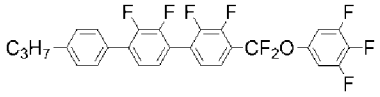
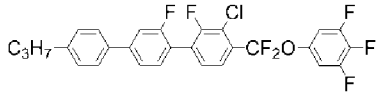
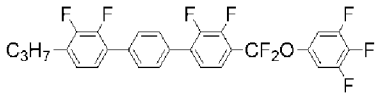
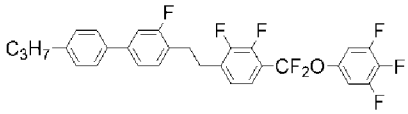
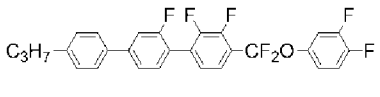
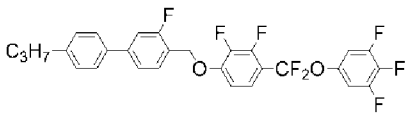
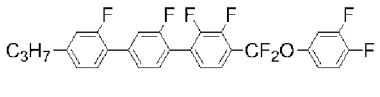
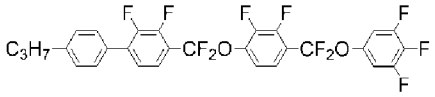
1-3-34 

1-3-35 

1-3-36 

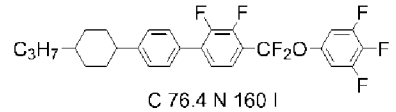
1-3-37 

[0272]

No.		No.	
1-4-1		1-4-11	
1-4-2	 C 98.8 S_A 152 N 166 I T_{NI} = 116 °C, Δn = 0.197, Δε = 19.9, ε (⊥) = 6.5	1-4-12	
1-4-3		1-4-13	
1-4-4		1-4-14	
1-4-5		1-4-15	
1-4-6		1-4-16	
1-4-7		1-4-17	
1-4-8		1-4-18	
1-4-9		1-4-19	
1-4-10		1-4-20	

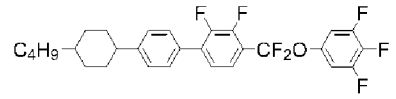
[0273]

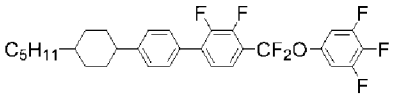
No.

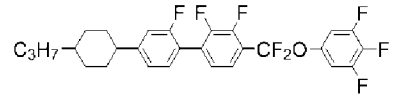
1-4-21 

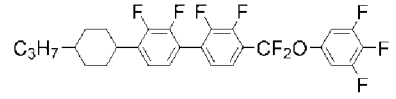
C 76.4 N 160 I

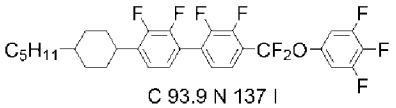
T_{NI} = 117 ℃, Δn = 0.150, Δε = 17.9, ε (⊥) = 5.8

1-4-22 

1-4-23 

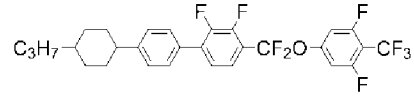
1-4-24 

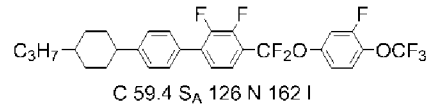
1-4-25 

1-4-26 

C 93.9 N 137 I

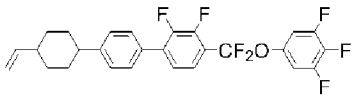
T_{NI} = 83.7 ℃, Δn = 0.137, Δε = 15.1, ε (⊥) = 8.5

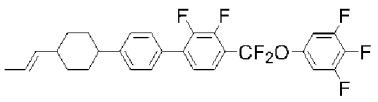
1-4-27 

1-4-28 

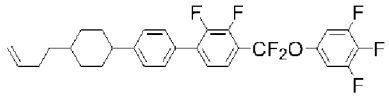
C 59.4 S_A 126 N 162 I

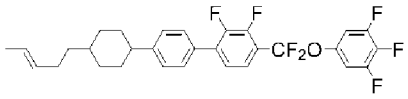
T_{NI} = 126 ℃, Δn = 0.150, Δε = 13.9, ε (⊥) = 5.8

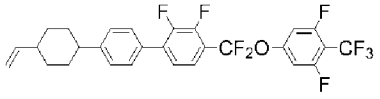
1-4-29 

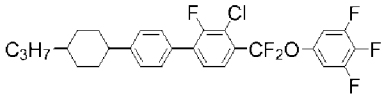
1-4-30 

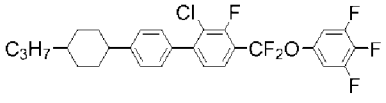
No.

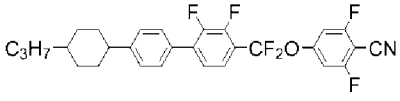
1-4-31 

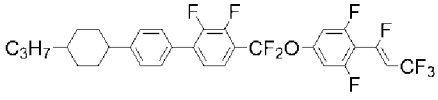
1-4-32 

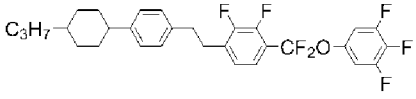
1-4-33 

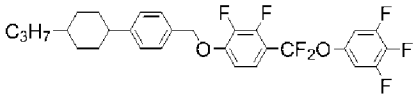
1-4-34 

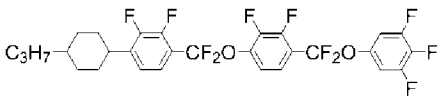
1-4-35 

1-4-36 

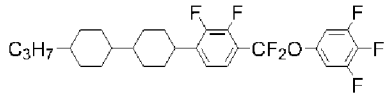
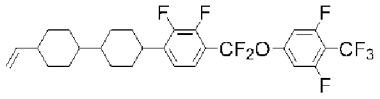
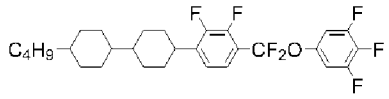
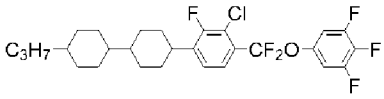
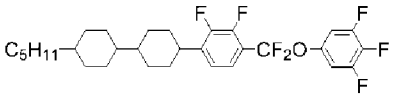
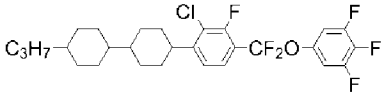
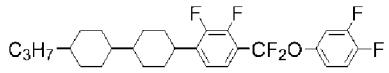
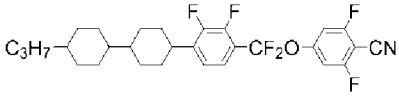
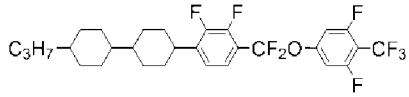
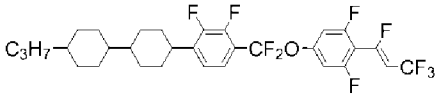
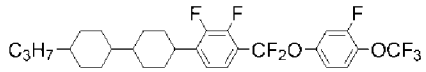
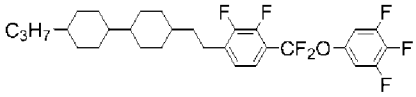
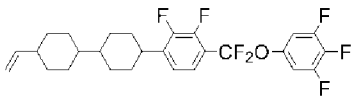
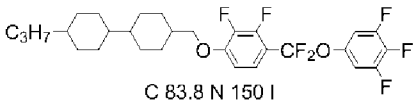
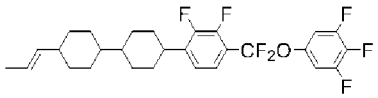
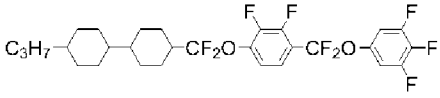
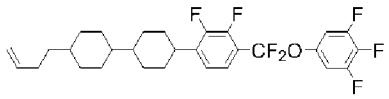
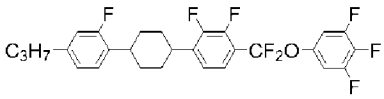
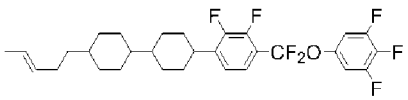
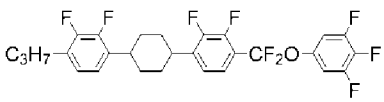
1-4-37 

1-4-38 

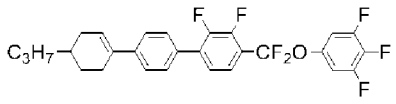
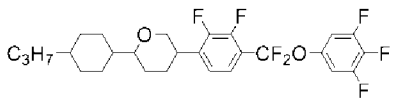
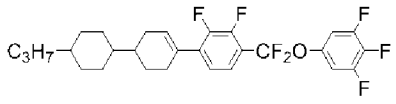
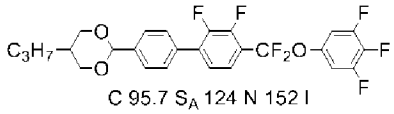
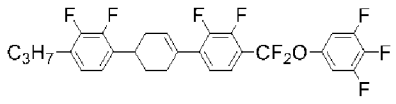
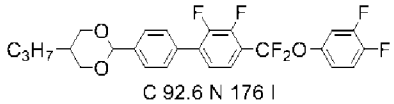
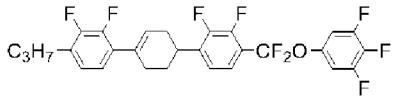
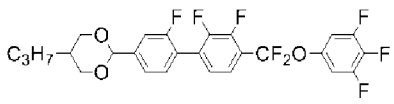
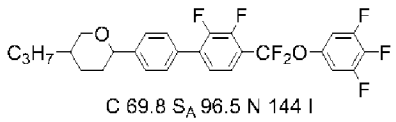
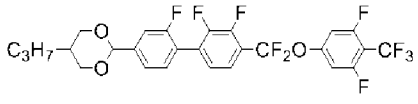
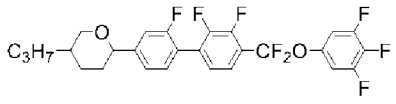
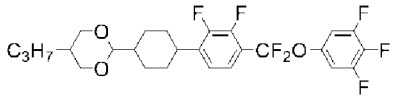
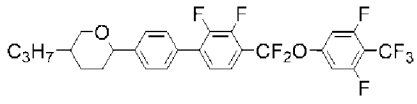
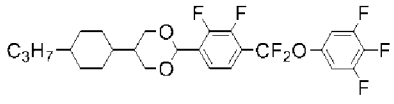
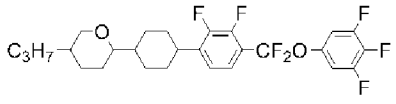
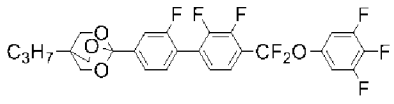
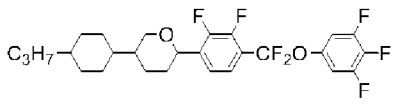
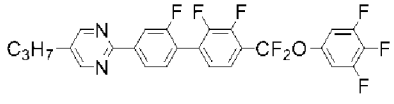
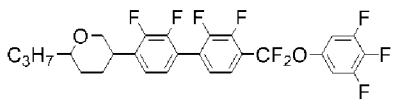
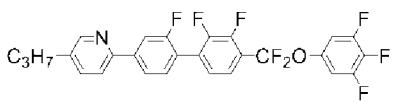
1-4-39 

1-4-40 

[0274]

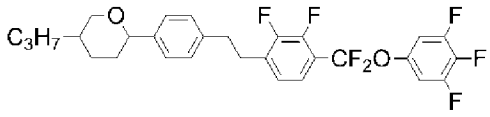
No.		No.	
1-4-41		1-4-51	
1-4-42		1-4-52	
1-4-43		1-4-53	
1-4-44		1-4-54	
1-4-45		1-4-55	
1-4-46		1-4-56	
1-4-47		1-4-57	 C 83.8 N 150 I T_{NI} = 110 °C, Δn = 0.104, Δε = 7.43, ε (⊥) = 9.2
1-4-48		1-4-58	
1-4-49		1-4-59	
1-4-50		1-4-60	

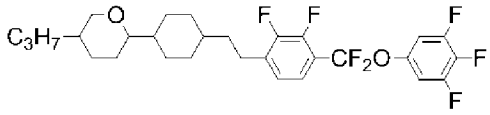
[0275]

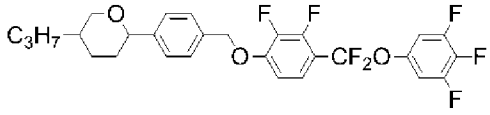
No.		No.	
1-4-61		1-4-71	
1-4-62		1-4-72	 C 95.7 S_A 124 N 152 I T_{NI} = 121 °C, Δn = 0.157, Δε = 26.6, ε (⊥) = 7.2
1-4-63		1-4-73	 C 92.6 N 176 I T_{NI} = 133 °C, Δn = 0.164, Δε = 16.8, ε (⊥) = 7.2
1-4-64		1-4-74	
1-4-65	 C 69.8 S_A 96.5 N 144 I T_{NI} = 112 °C, Δn = 0.150, Δε = 21.4, ε (⊥) = 7.2	1-4-75	
1-4-66		1-4-76	
1-4-67		1-4-77	
1-4-68		1-4-78	
1-4-69		1-4-79	
1-4-70		1-4-80	

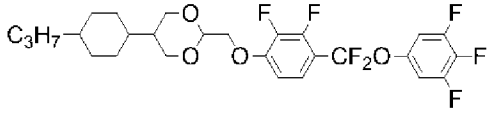
[0276]

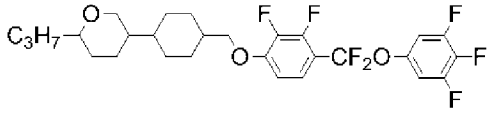
No.

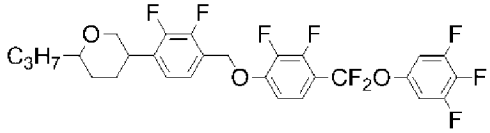
1-4-81 

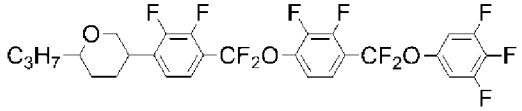
1-4-82 

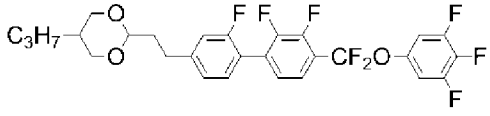
1-4-83 

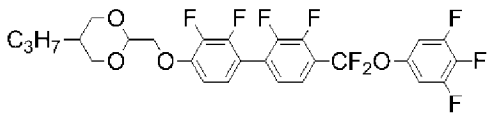
1-4-84 

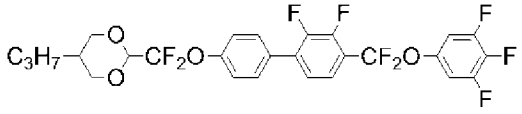
1-4-85 

1-4-86 

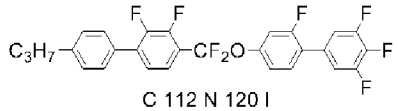
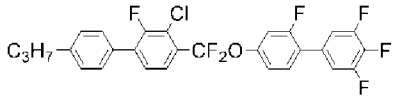
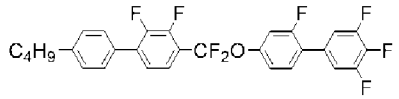
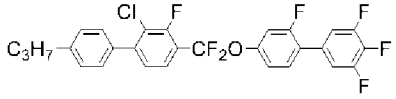
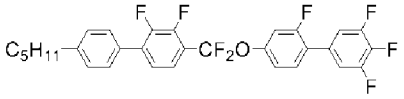
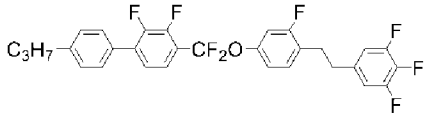
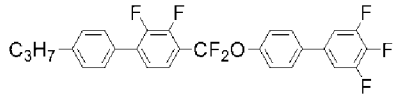
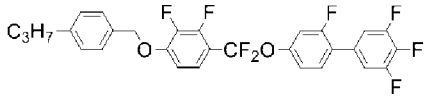
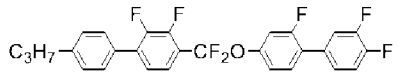
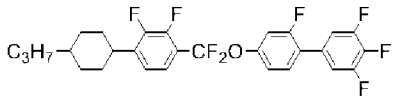
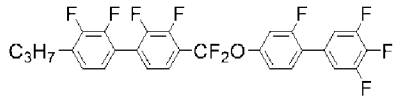
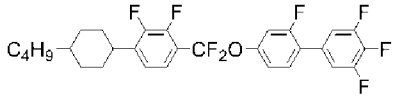
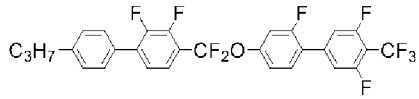
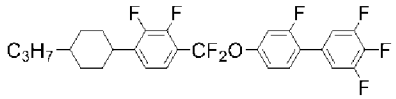
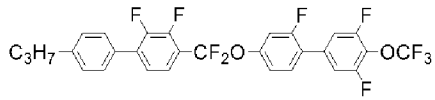
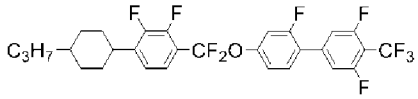
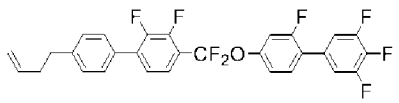
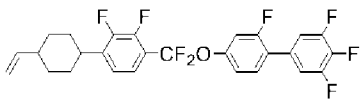
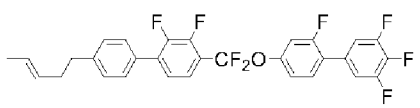
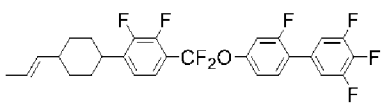
1-4-87 

1-4-88 

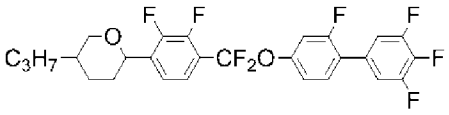
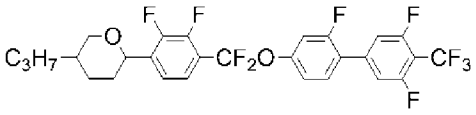
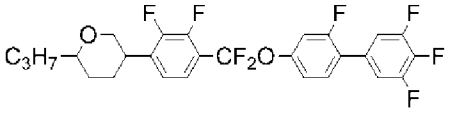
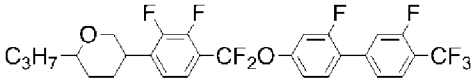
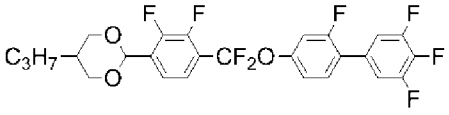
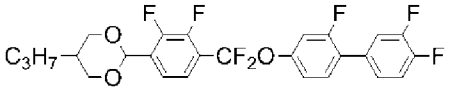
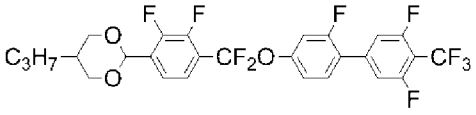
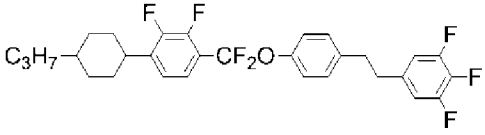
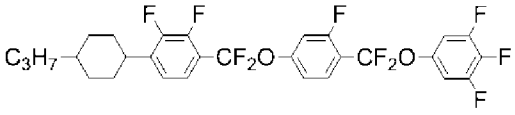
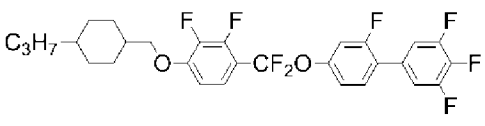
1-4-89 

1-4-90 

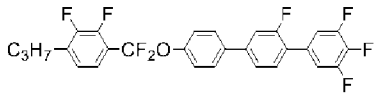
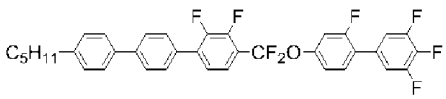
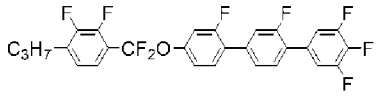
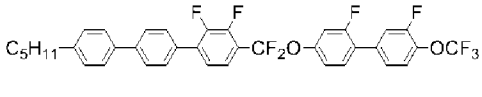
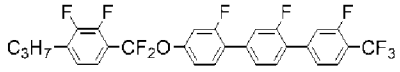
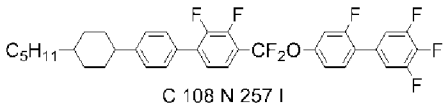
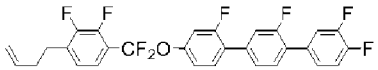
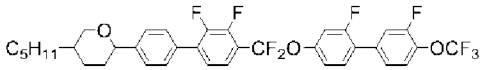
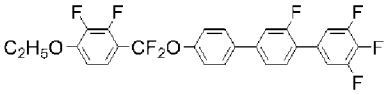
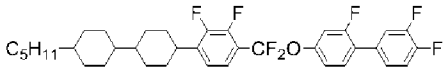
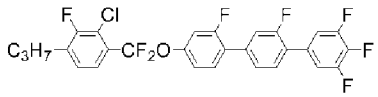
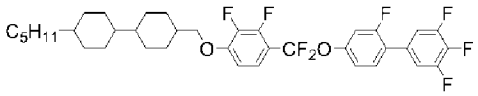
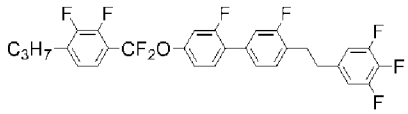
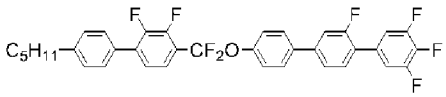
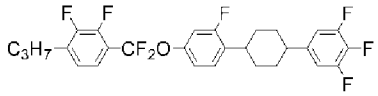
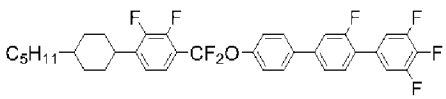
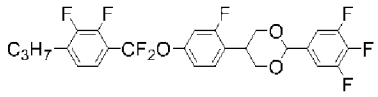
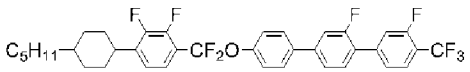
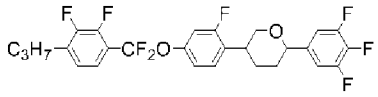
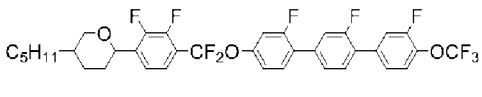
[0277]

No.		No.	
1-5-1	 C 112 N 120 I T_{NI} = 78.7 ℃, Δn = 0.177, Δε = 24.9, ε (⊥) = 7.5	1-5-11	
1-5-2		1-5-12	
1-5-3		1-5-13	
1-5-4		1-5-14	
1-5-5		1-5-15	
1-5-6		1-5-16	
1-5-7		1-5-17	
1-5-8		1-5-18	
1-5-9		1-5-19	
1-5-10		1-5-20	

[0278]

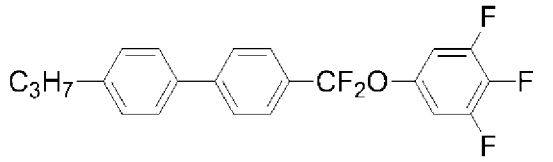
No.	
1-5-21	
1-5-22	
1-5-23	
1-5-24	
1-5-25	
1-5-26	
1-5-27	
1-5-28	
1-5-29	
1-5-30	

[0279]

No.		No.	
1-6-1		1-7-1	
1-6-2		1-7-2	
1-6-3		1-7-3	 C 108 N 257 I T_{NI} = 168 °C, Δn = 0.177, Δε = 19.9, ε (⊥) = 4.5
1-6-4		1-7-4	
1-6-5		1-7-5	
1-6-6		1-7-6	
1-6-7		1-8-1	
1-6-8		1-8-2	
1-6-9		1-8-3	
1-6-10		1-8-4	

[0280] ［比較例１］

比較化合物として、化合物（Ｓ－１）を合成した。この化合物は、特開２００２－３２７１７５号公報に記載されており、本発明の化合物に類似しているからである。

[0281] 

(S-1)

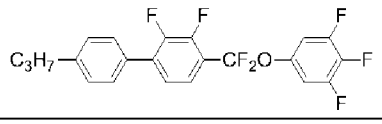
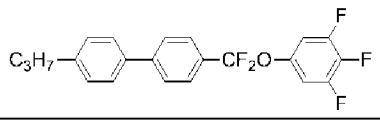
[0282] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．７５（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，２Ｈ）、７．６８（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，２Ｈ）、７．５３（ｄ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，２Ｈ）、７．２９（ｄ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，２Ｈ）、７．０２－６．９４（ｍ，２Ｈ）、２．６５（ｔ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，２Ｈ）、１．７５－１．６５（ｍ，２Ｈ）、０．９８（ｔ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，３Ｈ）．

[0283] 比較化合物（Ｓ－１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　８０．３　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝３５．０℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１４４；誘電率異方性（Δε）＝１９．６；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝５．２；粘度（η）＝１９．６ｍＰａ・ｓ．

[0284] 表1．化合物（No．１－２－２）と比較化合物（Ｓ－１）の物性

	化合物（No．１－２－２）	比較化合物（Ｓ－１）
		
転移温度（T_{NI}）	Ｃ 56．２ Ｉ	Ｃ 80．３ Ｉ
上限温度（T_{NI}）	0．４℃	35．０℃
光学的異方性（Δn）	0．117	0．144
誘電率異方性（Δε）	21．２	19．６
短軸方向の誘電率（ε⊥）	9．１	5．２
粘度（η）	40．9mPa･s	19．6mPa･s

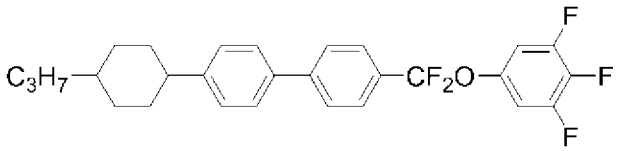
[0285] 実施例１で得られた化合物（Ｎｏ．１－２－２）と比較化合物（Ｓ－１）の物性を表１にまとめた。表１から、化合物（Ｎｏ．１－２－２）は、比較化合物（Ｓ－１）と比較して、誘電率異方性はほぼ同等であるにも関わらず、短軸方向の誘電率が大きい点で優れていることが分かった。

[0286] また実施例３～実施例１２に示した３環化合物（Ｎｏ．１－２－６８）、化合物（Ｎｏ．１－２－８）、化合物（Ｎｏ．１－２－９）、化合物（Ｎｏ．１－２－１４）、化合物（Ｎｏ．１－２－１７）、化合物（Ｎｏ．１－２

－１８）、化合物（Ｎｏ．１－２－１９）、および化合物（Ｎｏ．１－２－２０）は全て、比較化合物（Ｓ－１）と比較して短軸方向の誘電率が大きい。従って本発明の化合物の方が、ＦＦＳモードの液晶表示素子に用いられる液晶組成物の透過率を向上させることが出来る、優れた化合物であることが分かった。

[0287] ［比較例２］

比較化合物として、化合物（Ｓ－２）を合成した。この化合物は、特開平１０－２５１１８６号公報に記載されており、本発明の化合物に類似しているからである。

[0288] 

(S-2)

[0289] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．７３（ｄ，Ｊ＝８．３Ｈｚ，２Ｈ）、７．６８（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，２Ｈ）、７．５４（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、７．３２（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、７．０２－６．９３（ｍ，２Ｈ）、２．５２（ｔｔ，Ｊ＝１２．０Ｈｚ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，１Ｈ）、１．９７－１．８４（ｍ，４Ｈ）、１．５５－１．４３（ｍ，２Ｈ）、１．４１－１．２７（ｍ，３Ｈ）、１．２７－１．２０（ｍ，２Ｈ）、１．１４－１．０２（ｍ，２Ｈ）、０．９１（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，３Ｈ）．

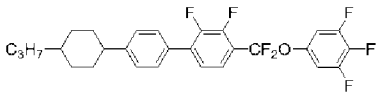
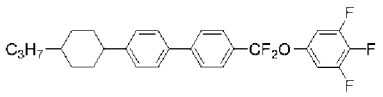
[0290] 比較化合物（Ｓ－２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６７．１　Ｓ$_A$　９３．８　Ｎ　１８８　Ｉ．

上限温度（Ｔ$_{NI}$）＝１５６℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．１７０；誘電率異方性（Δε）＝１９．２；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝３．８；粘度（η）＝５５．２ｍＰａ・ｓ．

[0291]

表2. 化合物(No. 1－4－21)と比較化合物(S－2)の物性

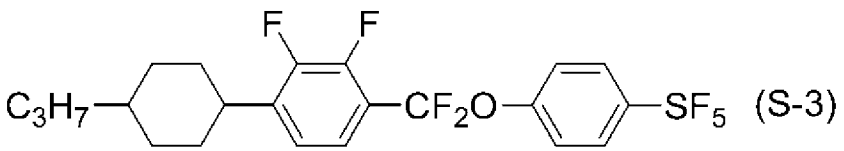
	化合物(No. 1－4－21)	比較化合物(S－2)
		
転移温度(T_{NI})	C 76.4 N 160 I	C 67.1 S_A 93.8 N 188 I
上限温度(T_{NI})	117℃	156℃
光学的異方性(Δn)	0.150	0.170
誘電率異方性(Δε)	17.9	19.2
短軸方向の誘電率(ε⊥)	5.8	3.8
粘度(η)	62.9mPa･s	55.2mPa･s

[0292] 実施例２で得られた化合物（Ｎｏ．１－４－２１）と比較化合物（Ｓ－２）の物性を表２にまとめた。表２から、化合物（Ｎｏ．１－４－２１）は、比較化合物（Ｓ－２）と比較して、誘電率異方性はほぼ同等であるにも関わらず、短軸方向の誘電率が大きい点で優れていることが分かった。

[0293] また実施例４および実施例１３～実施例１９に示した４環化合物（Ｎｏ．１－４－７２）、化合物（Ｎｏ．１－４－２）、化合物（Ｎｏ．１－４－２６）、化合物（Ｎｏ．１－４－２８）、化合物（Ｎｏ．１－４－５７）、化合物（Ｎｏ．１－４－６５）、化合物（Ｎｏ．１－４－７３）、および化合物（Ｎｏ．１－５－１）は全て、比較化合物（Ｓ－２）と比較して短軸方向の誘電率が大きい。従って本発明の化合物の方が、ＦＦＳモードの液晶表示素子に用いられる液晶組成物の透過率を向上させることが出来る、優れた化合物であることが分かった。

[0294] ［比較例３］

比較化合物として、化合物（Ｓ－３）を合成した。この化合物は、特開２００２－８０４５２号公報に記載されており、本発明の化合物に類似しているからである。

[0295] 

(S-3)

[0296] 化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：７．８１－７．７５（ｍ，２Ｈ）、

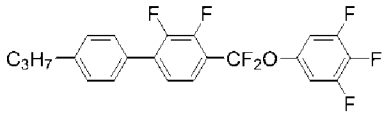
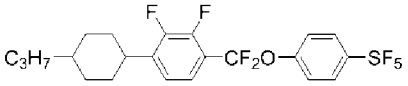
７．４２－７．３３（ｍ，３Ｈ）、７．１１－７．０４（ｍ，１Ｈ）、２．８９（ｔｔ，Ｊ＝１２．４Ｈｚ，Ｊ＝２．９Ｈｚ，１Ｈ）、１．９３－１．８４（ｍ，４Ｈ）、１．５５－１．４３（ｍ，２Ｈ）、１．４１－１．２７（ｍ，３Ｈ）、１．２７－１．１９（ｍ，２Ｈ）、１．１６－１．０３（ｍ，２Ｈ）、０．９１（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．

[0297] 比較化合物（Ｓ－３）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５３．８　Ｉ．

上限温度（T_{NI}）＝３．７℃；光学的異方性（Δｎ）＝０．０７０３；誘電率異方性（Δε）＝１６．４；短軸方向の誘電率（ε⊥）＝７．２；粘度（η）＝７１．８ｍＰａ・ｓ．

[0298] 表3. 化合物(No. 1－2－2)と比較化合物(S－3)の物性

	化合物(No. 1－2－2)	比較化合物(S－3)
		
転移温度(T_{NI})	C 56.2 I	C 53.8 I
上限温度(T_{NI})	0.4℃	3.7℃
光学的異方性(Δn)	0.117	0.0703
誘電率異方性(Δε)	21.2	16.4
短軸方向の誘電率(ε⊥)	9.1	7.2
粘度(η)	40.9mPa･s	71.8mPa･s

[0299] 実施例１で得られた化合物（Ｎｏ．１－２－２）と比較化合物（Ｓ－３）の物性を表３にまとめた。表３から、化合物（Ｎｏ．１－２－２）は、比較化合物（Ｓ－３）と比較して、上限温度はほぼ同等であるにも関わらず、誘電率異方性が大きく、短軸方向の誘電率が大きく、粘度が小さい点で優れていることが分かった。

[0300] また実施例３～実施例１２に示した３環化合物（Ｎｏ．１－２－６８）、化合物（Ｎｏ．１－２－８）、化合物（Ｎｏ．１－２－９）、化合物（Ｎｏ．１－２－１４）、化合物（Ｎｏ．１－２－１７）、化合物（Ｎｏ．１－２－１８）、化合物（Ｎｏ．１－２－１９）、および化合物（Ｎｏ．１－２－２０）は全て、比較化合物（Ｓ－３）と比較して短軸方向の誘電率が大きく

、粘度が小さい。従って本発明の化合物の方が、ＦＦＳモードの液晶表示素子に用いられる液晶組成物の透過率を向上させつつ、素子の応答時間を短くするることが出来る、優れた化合物であることが分かった。

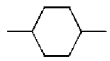
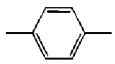
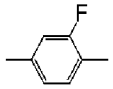
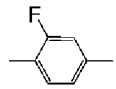
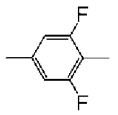
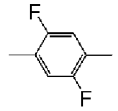
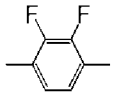
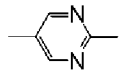
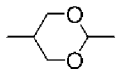
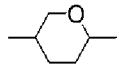
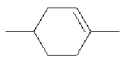
[0301] １－２．組成物（１）の実施例

実施例により本発明の液晶組成物（１）を詳細に説明する。実施例における化合物は、下記の表４の定義に基づいて記号により表した。表４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。実施例において記号の後にあるかっこ内の番号は化合物の番号に対応する。（－）の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合（百分率）は、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）である。最後に、組成物の物性値をまとめた。物性は、先に記載した方法にしたがって測定し、測定値を（外挿することなく）そのまま記載した。

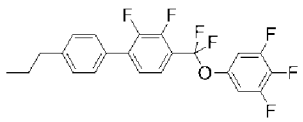
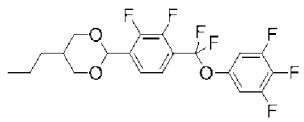
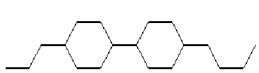
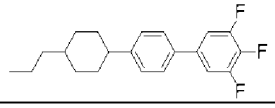
[0302]

表4．記号を用いた化合物の表記法

R-(A_1)-Z_1-・・・・・-Z_n-(A_n)-R'

1）左末端基 R-	記号	4）環構造 -A_n-	記号
C_nH_{2n+1}-	n-		H
$C_nH_{2n+1}O$-	nO-		B
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}$-	mOn-		B(F)
CH_2=CH-	V-		B(2F)
C_nH_{2n+1}-CH=CH-	nV-		B(F,F)
CH_2=CH-C_nH_{2n}-	Vn-		B(2F,5F)
C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-	mVn-		B(2F,3F)
CF_2=CH-	VFF-		Py
CF_2=CH-C_nH_{2n}-	VFFn-		G
2）右末端基 -R'	記号		dh
-C_nH_{2n+1}	-n		ch
-OC_nH_{2n+1}	-On		
-$COOCH_3$	-EMe		
-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		
-F	-F		
-Cl	-CL		
-OCF_3	-OCF3		
-OCF_2H	-OCF2H		
-CF_3	-CF3		
-OCH=CH-CF_3	-OVCF3		
-C≡N	-C		
3）結合基 -Z_n-	記号		
-C_nH_{2n}-	n		
-COO-	E		
-CH=CH-	V		
-CH_2O-	1O		
-OCH_2-	O1		
-CF_2O-	X		
-C≡C-	T		

5）表記例

例1 3－BB(2F, 3F)XB(F, F)－F	例2 3－GB(2F, 3F)XB(F, F)－F
	
例3 3－HH－4	例4 3－HBB(F, F)－F
	

[0303] ［実施例２１］

３－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ　（１－２－２）　１７％

３－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５）	８％
５－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５）	８％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	２１％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	２０％
３－Ｈ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２７）	１０％
５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	３％
５－ＨＨＥＢＢ－Ｆ	（４－１７）	２％
３－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－１５）	３％
１０１－ＨＢＢＨ－４	（１５－１）	４％
１０１－ＨＢＢＨ－５	（１５－１）	４％

ＮＩ＝８３．２℃；Δｎ＝０．１２３；Δε＝１１．０；η＝３６．９ｍＰａ・ｓ．

上記組成物１００部に化合物（Ｏｐ－０５）を０．２５部添加したときのピッチは６１．７μｍであった。

[0304] ［実施例２２］

３－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ		
	（１－４－２１）	４％
５－ＨＢ－ＣＬ	（２－２）	１６％
３－ＨＨ－４	（１３－１）	１２％
３－ＨＨ－５	（１３－１）	４％
３－ＨＨＢ－ＣＬ	（３－１）	３％
４－ＨＨＢ－ＣＬ	（３－１）	４％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	１０％
４－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	９％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	９％
７－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	８％
５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２３）	４％
１０１－ＨＢＢＨ－５	（１５－１）	３％

３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	２％
４－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	３％
５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	３％
３－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－１５）	３％
４－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－１５）	３％

[0305] ［実施例２３］

３－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（１－４－４１）	４％
３－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（１－２－２）	５％
５－ＨＢ－Ｆ	（２－２）	１２％
６－ＨＢ－Ｆ	（２－２）	９％
７－ＨＢ－Ｆ	（２－２）	７％
２－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（３－１）	７％
３－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（３－１）	７％
４－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（３－１）	７％
５－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（３－１）	５％
３－ＨＨ２Ｂ－ＯＣＦ３	（３－４）	４％
５－ＨＨ２Ｂ－ＯＣＦ３	（３－４）	４％
３－ＨＨ２Ｂ（Ｆ）－Ｆ	（３－５）	３％
３－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２３）	１０％
５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２３）	１０％
５－ＨＢＢＨ－３	（１５－１）	３％
３－ＨＢ（Ｆ）ＢＨ－３	（１５－２）	３％

[0306] ［実施例２４］

３－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（１－４－２１）	３％
５－ＨＢ－ＣＬ	（２－２）	１１％
３－ＨＨ－４	（１３－１）	８％

３－ＨＨＢ－１	（１４－１）	５％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３）	８％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	２０％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	１５％
３－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１２）	１０％
５－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１２）	３％
２－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３９）	３％
３－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３９）	５％
５－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３９）	３％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	６％

[0307] ［実施例２５］

３－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－２－９）	４％
３－ＧＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（１－２－６８）	３％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	３３％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	３２％
３－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５）	１０％
４－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５）	１０％
５－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５）	８％

ＮＩ＝７７．６℃；Δｎ＝０．１０３；Δε＝９．３；η＝２２．８ｍＰａ・ｓ．

[0308] ［実施例２６］

３－ＧＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（１－４－７２）	９％
２－ＨＢ－Ｃ	（５－１）	５％
３－ＨＢ－Ｃ	（５－１）	１０％
３－ＨＢ－Ｏ２	（１３－５）	１２％
２－ＢＴＢ－１	（１３－１０）	３％
３－ＨＨＢ－Ｆ	（３－１）	４％

３－ＨＨＢ－１	（１４－１）	８％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（１４－１）	５％
３－ＨＨＢ－３	（１４－１）	１０％
３－ＨＨＥＢ－Ｆ	（３－１０）	４％
５－ＨＨＥＢ－Ｆ	（３－１０）	４％
２－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３）	５％

ＮＩ＝１０４．１℃；Δｎ＝０．１０５；Δε＝６．６；η＝２４．７ｍＰａ・ｓ．

[0309] ［実施例２７］

３－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ）－Ｆ	（１－２－８）	８％
５－ＨＢ－ＣＬ	（２－２）	１２％
３－ＨＨ－４	（１３－１）	８％
３－ＨＨ－５	（１３－１）	４％
３－ＨＨＢ－Ｆ	（３－１）	４％
３－ＨＨＢ－ＣＬ	（３－１）	３％
４－ＨＨＢ－ＣＬ	（３－１）	４％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	１０％
４－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	９％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	９％
７－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	８％
５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２３）	４％
１０１－ＨＢＢＨ－５	（１５－１）	３％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	２％
４－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	３％
５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	３％

３－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－１５） ３％

４－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－１５） ３％

ＮＩ＝１１３．５℃；Δｎ＝０．０９７；Δε＝４．６；η＝２３．１ｍＰａ・ｓ．

[0310] ［実施例２８］

３－ｄｈＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ

（１－４－６５） ７％

３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－３） ９％

３－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－１５） ８％

４－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－１５） ８％

５－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－１５） ８％

３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－２４） １９％

５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－２４） １８％

３－Ｈ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－２７） ７％

５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－６） ３％

５－ＨＨＥＢＢ－Ｆ （４－１７） ２％

３－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－１５） ３％

１Ｏ１－ＨＢＢＨ－４ （１５－１） ４％

１Ｏ１－ＨＢＢＨ－５ （１５－１） ４％

ＮＩ＝１０１．９℃；Δｎ＝０．１１８；Δε＝９．７；η＝３７．６ｍＰａ・ｓ．

[0311] ［実施例２９］

３－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ）－ＯＣＦ３

（１－４－２８） ５％

５－ＨＢ－Ｆ （２－２） １２％

６－ＨＢ－Ｆ （２－２） ９％

７－ＨＢ－Ｆ （２－２） ７％

２－ＨＨＢ－ＯＣＦ３ （３－１） ７％

３－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（３－１）	７％
４－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（３－１）	７％
５－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（３－１）	５％
３－ＨＨ２Ｂ－ＯＣＦ３	（３－４）	４％
５－ＨＨ２Ｂ－ＯＣＦ３	（３－４）	４％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＯＣＦ２Ｈ	（３－３）	４％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＯＣＦ３	（３－３）	５％
３－ＨＨ２Ｂ（Ｆ）－Ｆ	（３－５）	３％
３－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２３）	８％
５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２３）	７％
５－ＨＢＢＨ－３	（１５－１）	３％
３－ＨＢ（Ｆ）ＢＨ－３	（１５－２）	３％

ＮＩ＝８７．２℃；Δｎ＝０．０９３；Δε＝４．８；η＝１６．３ｍＰａ・ｓ．

[0312] ［実施例３０］

２Ｏ－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（１－２－１８）	９％
５－ＨＢ－ＣＬ	（２－２）	１１％
３－ＨＨ－４	（１３－１）	８％
３－ＨＨＢ－１	（１４－１）	５％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３）	８％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	１６％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	１１％
３－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１２）	９％
４－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１２）	３％
５－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１２）	３％
２－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３９）	３％
３－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３９）	５％
５－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３９）	３％

３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－６） ６％

ＮＩ＝７８．４℃；Δｎ＝０．１０５；Δε＝１０．０；η＝２３．６ｍＰａ・ｓ．

[0313] ［実施例３１］

３－Ｂ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （１－１－１） ３％

３－ＨＢ－ＣＬ （２－２） ３％

５－ＨＢ－ＣＬ （２－２） ４％

３－ＨＨＢ－ＯＣＦ３ （３－１） ５％

３－Ｈ２ＨＢ－ＯＣＦ３ （３－１３） ５％

５－Ｈ４ＨＢ－ＯＣＦ３ （３－１９） １５％

Ｖ－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２） ５％

３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２） ９％

５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２） ７％

３－Ｈ４ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３ （３－２１） ８％

５－Ｈ４ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３ （３－２１） １０％

５－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－１５） ５％

５－Ｈ４ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－２１） ７％

２－Ｈ２ＢＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２６） ５％

３－Ｈ２ＢＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２６） ４％

３－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－３９） ５％

ＮＩ＝６７．９℃；Δｎ＝０．０９１；Δε＝８．５；η＝２６．１ｍＰａ・ｓ．

[0314] ［実施例３２］

２Ｏ－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３

（１－２－１９） ６％

５－ＨＢ－ＣＬ （２－２） １４％

７－ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （２－４） ３％

３－ＨＨ－４ （１３－１） ９％

３－ＨＨ－５	（１３－１）	５％
３－ＨＢ－Ｏ２	（１３－５）	１３％
３－ＨＨＢ－１	（１４－１）	８％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（１４－１）	５％
２－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－３）	６％
３－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５）	５％
４－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５）	５％

ＮＩ＝７２．３℃；Δｎ＝０．０８０；Δε＝４．６；η＝１７．４ｍＰａ・ｓ．

[0315] ［実施例３３］

２Ｏ－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ）－ＯＣＦ３		
	（１－２－２０）	７％
５－ＨＢ－ＣＬ	（２－２）	３％
７－ＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（２－３）	７％
３－ＨＨ－４	（１３－１）	９％
３－ＨＨ－ＥＭｅ	（１３－２）	１９％
３－ＨＨＥＢ－Ｆ	（３－１０）	７％
５－ＨＨＥＢ－Ｆ	（３－１０）	７％
３－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１２）	９％
４－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１２）	５％
４－ＨＧＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１０３）	５％
５－ＨＧＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１０３）	６％
２－Ｈ２ＧＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１０６）	４％
３－Ｈ２ＧＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１０６）	５％
５－ＧＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１０９）	７％

ＮＩ＝７６．４℃；Δｎ＝０．０７０；Δε＝６．９；η＝２１．６ｍＰａ・ｓ．

[0316] ［実施例３４］

３－ＨｃｈＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ		
	（１－４－６２）	８％
３－ＨＨ－４	（１３－１）	４％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	３０％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２４）	２９％
３－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２７）	９％
４－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２７）	９％
５－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２７）	８％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（４－６）	３％

[0317] ［実施例３５］

１Ｖ２－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ		
	（１－２－１４）	７％
２－ＨＢ－Ｃ	（５－１）	５％
３－ＨＢ－Ｃ	（５－１）	１１％
３－ＨＢ－Ｏ２	（１３－５）	１２％
２－ＢＴＢ－１	（１３－１０）	３％
３－ＨＨＢ－Ｆ	（３－１）	４％
３－ＨＨＢ－１	（１４－１）	８％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（１４－１）	５％
３－ＨＨＢ－３	（１４－１）	１１％
３－ＨＨＥＢ－Ｆ	（３－１０）	４％
５－ＨＨＥＢ－Ｆ	（３－１０）	４％
２－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２）	７％

３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （３－３） ５％

ＮＩ＝９７．１℃；Δｎ＝０．１０３；Δε＝５．９；η＝２０．１ｍＰａ・ｓ．

[0318] ［実施例３６］

１Ｖ２－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３

（１－２－１７） ７％

５－ＨＢ－ＣＬ （２－２） １２％

３－ＨＨ－４ （１３－１） ９％

３－ＨＨ－５ （１３－１） ４％

３－ＨＨＢ－Ｆ （３－１） ４％

３－ＨＨＢ－ＣＬ （３－１） ３％

４－ＨＨＢ－ＣＬ （３－１） ４％

３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２） １０％

４－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２） ９％

５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２） ９％

７－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２） ８％

５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ （３－２３） ４％

１０１－ＨＢＢＨ－５ （１５－１） ３％

３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－６） ２％

４－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－６） ３％

５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－６） ３％

３－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－１５） ３％

４－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ （４－１５） ３％

ＮＩ＝１１４．９℃；Δｎ＝０．０９７；Δε＝５．８；η＝２３．６ｍＰａ・ｓ．

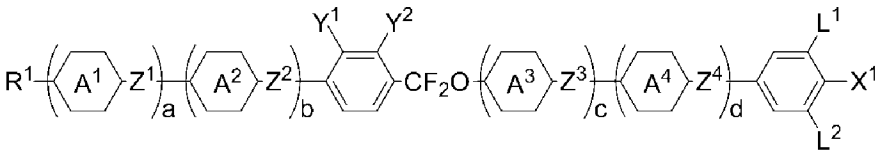
産業上の利用可能性

[0319] 本発明の液晶性化合物は、熱、光などに対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異

方性、短軸方向の大きな誘電率、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性などの物性の少なくとも１つを充足する。本発明の液晶組成物は、この化合物を含有し、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、短軸方向の大きな誘電率、適切な弾性定数などの物性の少なくとも１つを充足する。この組成物は、少なくとも２つの物性に関して適切なバランスを有する。本発明の液晶表示素子は、この組成物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、および長い寿命を有する。したがって、パソコン、テレビなどに用いる液晶表示素子に広く利用できる。

請求の範囲

[請求項1] 式（１）で表される化合物。



(1)

式（１）において、

Ｒ[1]は、炭素数１～１５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－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環Ａ[1]、環Ａ[2]、環Ａ[3]、および環Ａ[4]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、２，６，７－トリオキサビシクロ[２．２．２]オクタン－１，４－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；

Ｚ[1]、Ｚ[2]、Ｚ[3]、およびＺ[4]は独立して、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ$_2$Ｏ－、－ＯＣＦ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；

Ｘ[1]は、ハロゲン、－Ｃ≡Ｎ、－Ｎ＝Ｃ＝Ｓ、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシであり；

L^1およびL^2は独立して、水素またはフッ素であり；

Y^1およびY^2は独立して、フッ素または塩素であり；

ａ、ｂ、ｃ、およびｄは独立して、０または１であり、ａ、ｂ、ｃ、およびｄの和は、０、１、２、または３であり、

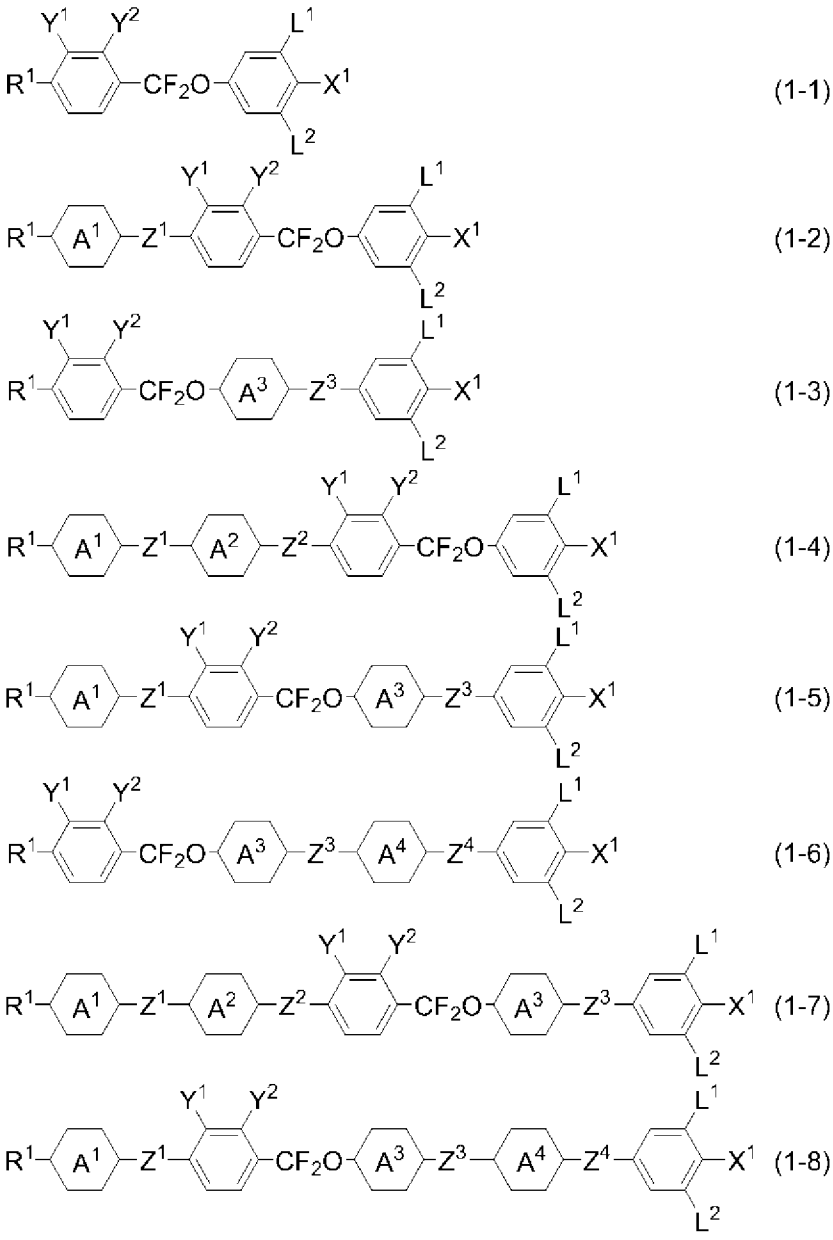
X^1が、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～１０のアルキル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～１０のアルケニル、１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１～９のアルコキシ、または１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２～９のアルケニルオキシであるときは、L^1はフッ素である。

[請求項2] 請求項１に記載の式（１）において、R^1が、炭素数１～１５のアルキル、炭素数２～１５のアルケニル、炭素数１～１４のアルコキシ、または炭素数２～１４のアルケニルオキシであり；X^1が、フッ素、塩素、－Ｃ≡Ｎ、－Ｎ＝Ｃ＝Ｓ、$-CH_2F$、$-CHF_2$、$-CF_3$、$-(CH_2)_2-F$、$-CH_2CF_3$、$-CF_2CF_3$、$-(CH_2)_3-F$、$-(CH_2)_2-CF_3$、$-(CF_2)_3-F$、$-(CH_2)_4-F$、$-(CH_2)_3-CF_3$、$-(CF_2)_4-F$、$-(CF_2)_5-F$、$-(CF_2)_6-F$、$-(CF_2)_7-F$、$-OCH_2F$、$-OCHF_2$、$-OCF_3$、$-O-(CH_2)_2-F$、$-OCH_2CF_3$、$-OCF_2CF_3$、$-O-(CH_2)_3-F$、$-O-(CH_2)_2-CF_3$、$-O-(CF_2)_3-F$、$-O(CH_2)_4-F$、$-O-(CH_2)_3-CF_3$、$-O-(CF_2)_4-F$、$-O-(CF_2)_5-F$、$-O-(CF_2)_6-F$、$-CH=CHF$、$-CH=CF_2$、$-CF=CHF$、$-CF=CF_2$、$-CH=CHCH_2F$、$-CH=CHCF_3$、$-CF=CHCF_3$、$-CF=CFCF_3$、$-(CH_2)_2-CH=CF_2$、$-(CH_2)_2-CF=CF_2$、$-(CH_2)_2-CH=CHCF_3$、$-(CH_2)_2-CF=CHCF_3$、または$-(CH_2)_2-CF=CFCF_3$である請求項１に記載の化合物。

[請求項3] 請求項１に記載の式（１）において、R^1が、炭素数１～１０のアル

キル、炭素数２～１０のアルケニル、炭素数１～９のアルコキシ、または炭素数２～９のアルケニルオキシであり；X^1が、フッ素、塩素、－Ｃ≡Ｎ、－ＣＦ$_3$、－ＣＨＦ$_2$、－ＯＣＦ$_3$、－ＯＣＨＦ$_2$、－ＣＨ＝ＣＨＣＦ$_3$、－ＣＦ＝ＣＨＣＦ$_3$、または－ＣＦ＝ＣＦＣＦ$_3$である請求項１に記載の化合物。

[請求項4] 式（１－１）～（１－８）のいずれか１つで表される、請求項１に記載の化合物。



式（１－１）～（１－８）において、

R^1は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

環A^1、環A^2、環A^3、および環A^4は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり；

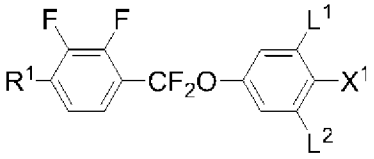
Z^1、Z^2、Z^3、およびZ^4は独立して、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＯＯ－、－CF_2O－、－CH_2O－、または－OCH_2－であり；

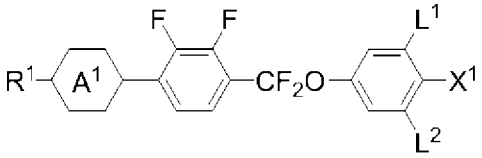
X^1は、フッ素、－CF_3、または－OCF_3であり；

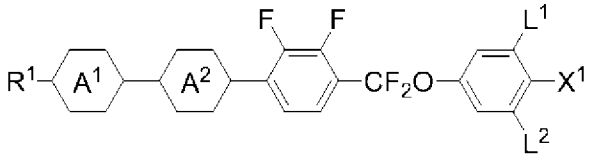
L^1およびL^2は独立して、水素またはフッ素であり；

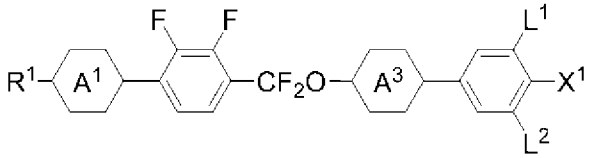
Y^1およびY^2は独立して、フッ素または塩素である。

[請求項5] 式（１－９）～（１－１２）のいずれか１つで表される、請求項１に記載の化合物。


(1-9)


(1-10)


(1-11)


(1-12)

式（１－９）～（１－１２）において、

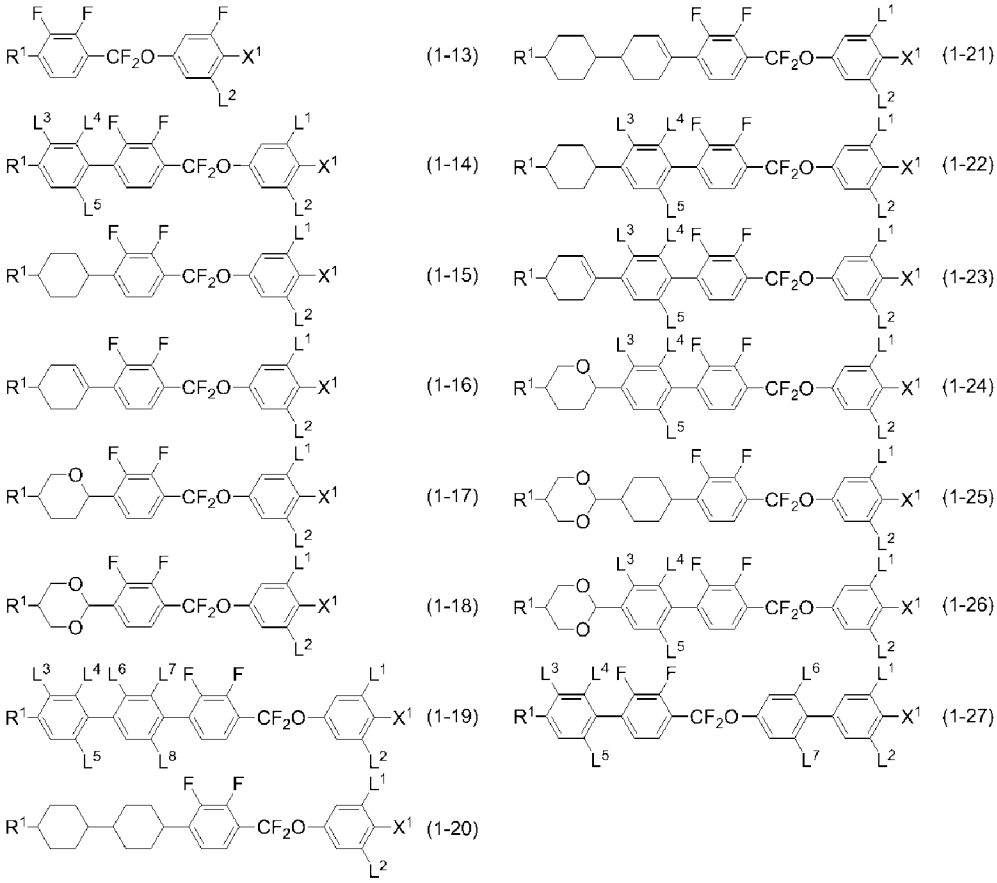
R^1は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

環Ａ[1]、環Ａ[2]、および環Ａ[3]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり；

Ｘ[1]は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；

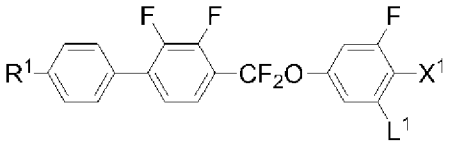
Ｌ[1]およびＬ[2]は独立して、水素またはフッ素である。

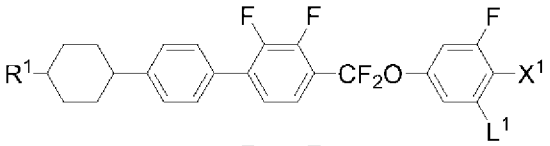
[請求項6] 式（１－１３）～（１－２７）のいずれか１つで表される、請求項１に記載の化合物。

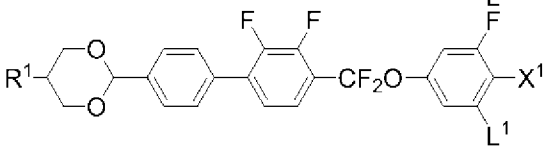


式（１－１３）～（１－２７）において、Ｒ[1]は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；Ｘ[1]は、フッ素、－ＣＦ$_3$、または－ＯＣＦ$_3$であり；Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、およびＬ[8]は独立して、水素またはフッ素である。

[請求項7] 式（１－２８）～（１－３０）のいずれか１つで表される、請求項１に記載の化合物。


(1-28)

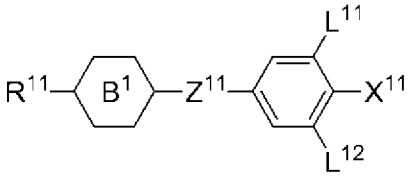

(1-29)

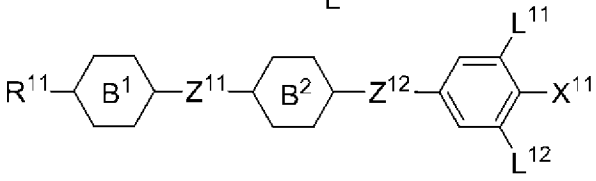

(1-30)

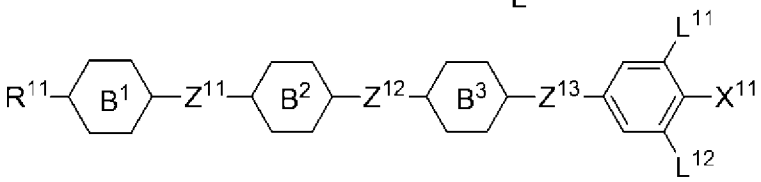
式（１－２８）～（１－３０）において、R^1は炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；X^1は、フッ素、－CF_3、または－OCF_3であり；L^1は、水素またはフッ素である。

[請求項8] 請求項１～請求項７のいずれか１項に記載の化合物の少なくとも１つを含有する液晶組成物。

[請求項9] 式（２）～（４）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、請求項８に記載の液晶組成物。


(2)


(3)


(4)

式（２）～（４）において、

R^{11}は、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアル

ケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく；

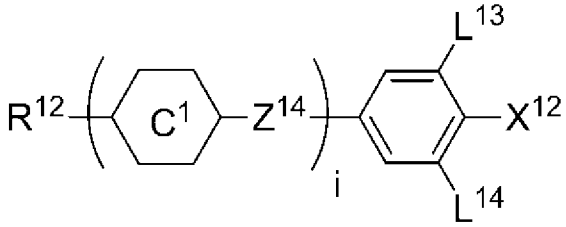
X^{11}は、フッ素、塩素、－OCF_3、－$OCHF_2$、－CF_3、－CHF_2、－CH_2F、－OCF_2CHF_2、または－OCF_2CHFCF_3であり；

環B^1、環B^2、および環B^3は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

Z^{11}、Z^{12}およびZ^{13}は独立して、単結合、－CH_2CH_2－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、または－（CH_2）$_4$－であり；

L^{11}およびL^{12}は独立して、水素またはフッ素である。

[請求項10] 式（５）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、請求項８または請求項９に記載の液晶組成物。



(5)

式（５）において、

R^{12}は、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく；

X^{12}は、－Ｃ≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎであり；

環C^1は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－

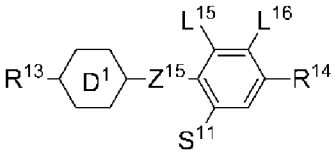
フルオロ－１，４－フェニレン、２，６－ジフルオロ－１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

Z^{14}は、単結合、－CH_2CH_2－、－C≡C－、－COO－、－CF_2O－、－OCF_2－、または－CH_2O－であり；

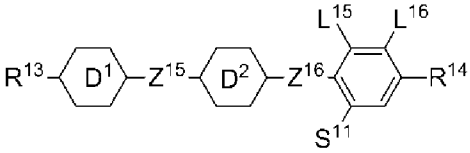
L^{13}およびL^{14}は独立して水素またはフッ素であり；

ｉは、１、２、３、または４である。

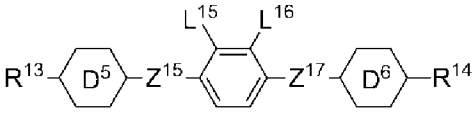
[請求項11] 式（６）～（１２）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、請求項８～請求項１０のいずれか１項に記載の液晶組成物。



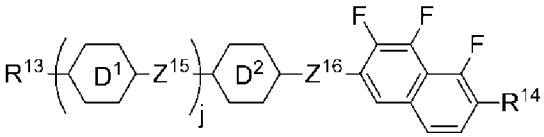
(6)



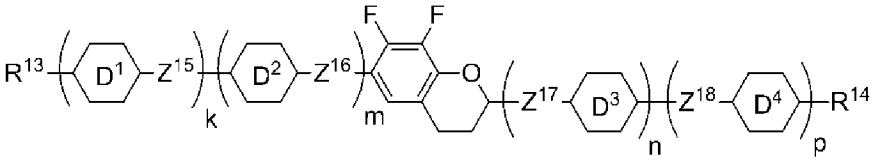
(7)



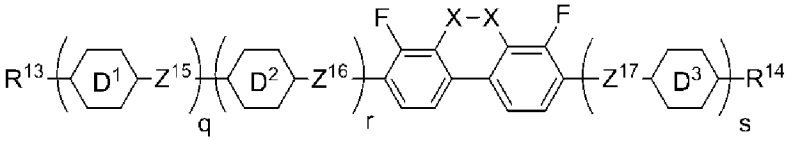
(8)



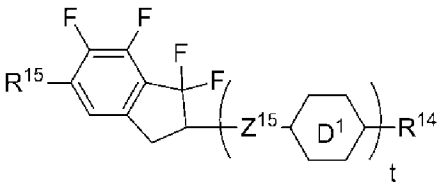
(9)



(10)



(11)



(12)

式（６）～（１２）において、

R^{13}およびR^{14}は独立して、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく；

R^{15}は、水素、フッ素、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、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；

S^{11}は水素またはメチルであり；

Ｘは、－CF_2－、－Ｏ－、または－ＣＨＦ－であり；

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

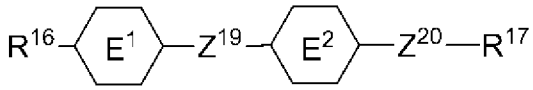
環D^5、および環D^6は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン，テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、またはデカヒドロナフタレン－２，６－ジイルであり；

Z^{15}、Z^{16}、Z^{17}、およびZ^{18}は独立して、単結合、－CH_2CH_2－、－ＣＯＯ－、－CH_2O－、－OCF_2－、または－$OCF_2CH_2CH_2$－であり；

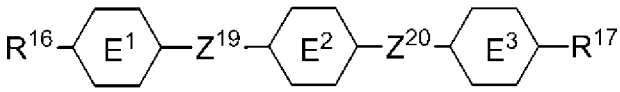
L^{15}およびL^{16}は独立して、フッ素または塩素であり；

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

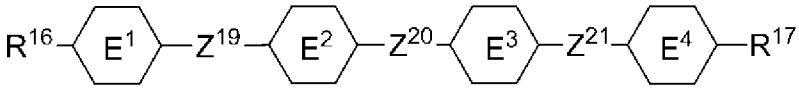
[請求項12] 式（１３）～（１５）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物をさらに含有する、請求項８～請求項１１のいずれか１項に記載の液晶組成物。



(13)



(14)



(15)

式（１３）～（１５）において、

R^{16}およびR^{17}は独立して、炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、このアルキルまたはアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

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

Z^{19}、Z^{20}、およびZ^{21}は独立して、単結合、－CH_2CH_2－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、または－ＣＯＯ－である。

[請求項13] 重合可能な化合物、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、および消泡剤の少なくとも１つをさらに含有する、請求項８～請求項１２に記載の液晶組成物。

[請求項14] 請求項８～請求項１３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。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2014/051691

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
See extra sheet.

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)
C07C43/225, C07C43/29, C07C69/773, C07D213/34, C07D239/26, C07D309/06, C07D319/06, C07D493/08, C09K19/12, C09K19/18, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/42, G02F1/13

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2014
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2014 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2014

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
CAplus/REGISTRY(STN), JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamIII), JSTChina(JDreamIII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X,Y	JP 2001-139511 A (Chisso Corp.), 22 May 2001 (22.05.2001), claims; paragraphs [0055] to [0112], compounds 28, 194 & EP 1081123 A2 & KR 10-2001-0021472 A & US 6548126 B1	1-14
Y	WO 2012/020643 A1 (JNC Corp.), 16 February 2012 (16.02.2012), claims & EP 2617701 A1 & TW 201211216 A & US 2013/0126783 A1	1-14

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

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

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
04 April, 2014 (04.04.14)	15 April, 2014 (15.04.14)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2014/051691

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X,Y A	WO 2008/090780 A1 (Chisso Corp.), 31 July 2008 (31.07.2008), claims; paragraph [0257], no.2.137, 2.139 & CN 101616883 A & EP 2123623 A1 & KR 10-2009-0101952 A & TW 200844216 A & US 2010/0073621 A1	1-3,8-14 4-7

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2014/051691

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

C07C43/225(2006.01)i, *C07C43/29*(2006.01)i, *C07C69/773*(2006.01)i, *C07D213/34*(2006.01)i, *C07D239/26*(2006.01)i, *C07D309/06*(2006.01)i, *C07D319/06*(2006.01)i, *C07D493/08*(2006.01)i, *C09K19/12*(2006.01)i, *C09K19/18*(2006.01)i, *C09K19/30*(2006.01)i, *C09K19/32*(2006.01)i, *C09K19/34*(2006.01)i, *C09K19/42*(2006.01)i, *G02F1/13*(2006.01)i

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

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１４／０５１６９１

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　特別ページ参照

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C07C43/225, C07C43/29, C07C69/773, C07D213/34, C07D239/26, C07D309/06, C07D319/06, C07D493/08, C09K19/12, C09K19/18, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/42, G02F1/13

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０１４年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１４年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１４年

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

CAplus/REGISTRY(STN), JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamIII), JSTChina(JDreamIII)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X, Y	JP 2001-139511 A (チッソ株式会社) 2001.05.22, 特許請求の範囲, [0055]-[0112]化合物 28,194 & EP 1081123 A2 & KR 10-2001-0021472 A & US 6548126 B1	1-14
Y	WO 2012/020643 A1 (JNC 株式会社) 2012.02.16, 請求の範囲 & EP 2617701 A1 & TW 201211216 A & US 2013/0126783 A1	1-14

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

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

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
０４．０４．２０１４	１５．０４．２０１４

国際調査機関の名称及びあて先
日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ）
郵便番号１００－８９１５
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

特許庁審査官（権限のある職員）　４Ｈ　４５１２
小久保　敦規
電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３４４３

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X, Y	WO 2008/090780 A1（チッソ株式会社）2008.07.31,	1-3, 8-14
---	請求の範囲, [0257] No.2.137, 2.139	---
A	& CN 101616883 A & EP 2123623 A1 & KR 10-2009-0101952 A	4-7
	& TW 200844216 A & US 2010/0073621 A1	

発明の属する分野の分類
C07C43/225(2006.01)i, C07C43/29(2006.01)i, C07C69/773(2006.01)i,
C07D213/34(2006.01)i, C07D239/26(2006.01)i, C07D309/06(2006.01)i,
C07D319/06(2006.01)i, C07D493/08(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i,
C09K19/18(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/32(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i,
C09K19/42(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i