

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B1)

(11)特許番号

特許第7464204号
(P7464204)

(45)発行日 令和6年4月9日(2024.4.9)

(24)登録日 令和6年4月1日(2024.4.1)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 C 25/24 (2006.01)

C 0 7 C 25/24

C S P

C 0 7 C 255/50 (2006.01)

C 0 7 C 255/50

C 0 7 C 331/28 (2006.01)

C 0 7 C 331/28

C 0 9 K 19/30 (2006.01)

C 0 9 K 19/30

C 0 9 K 19/34 (2006.01)

C 0 9 K 19/34

請求項の数 9 (全101頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2023-569680(P2023-569680)

(86)(22)出願日 令和5年8月17日(2023.8.17)

(86)国際出願番号 PCT/JP2023/029660

審査請求日 令和5年11月9日(2023.11.9)

(31)優先権主張番号 特願2022-203105(P2022-203105)

(32)優先日 令和4年12月20日(2022.12.20)

(33)優先権主張国・地域又は機関

日本国(JP)

早期審査対象出願

(73)特許権者 000002886

D I C 株式会社

東京都板橋区坂下3丁目3番58号

(74)代理人 100149445

弁理士 大野 孝幸

(74)代理人 100163290

弁理士 岩本 明洋

(74)代理人 100214673

弁理士 菅谷 英史

(74)代理人 100186646

弁理士 丹羽 雅裕

(72)発明者 林 正直

埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472

番地1 D I C 株式会社 埼玉工場内

(72)発明者 池内 貴哉

最終頁に続く

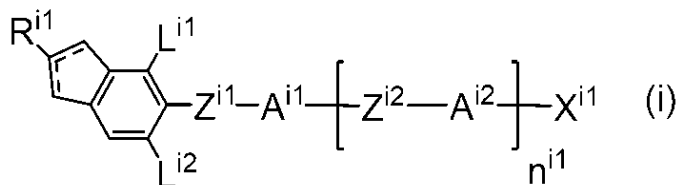
(54)【発明の名称】 化合物並びにこれを用いた液晶組成物、液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器
及びアンテナ

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(i)

【化1】



(一般式(i)中、

破線は二重結合の位置を表し、

 R^{i1} は、炭素原子数1～20のアルキル基を表し、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 及び／又は $-CS-$ で置換されていてもよく、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 、 $-NH-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 及び／又は $-C\equiv C-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよいが、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはない、

X^{i1} は、フッ素原子、シアノ基又はイソチオシアネート基を表し、

A^{i1} は、1, 4-フェニレン基（この基中に存在する1つの $-CH=$ 又は隣接していない2つ以上の $-CH=$ は $-N=$ に置き換えられても良い。）又はナフタレン-2, 6-ジイル基を表し、

A^{i2} は、1, 4-フェニレン基を表し、

前記 A^{i1} 及び A^{i2} 中の1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、置換基 S^{i1} によって置換されていてもよく、

置換基 S^{i1} は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基、炭素原子数1～20のアルキル基のいずれかを表し、

当該アルキル基における1つ又は2つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 及び/又は $-CO-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基における1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 及び/又は $-NH-CO-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基における1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよいが、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはない、

置換基 S^{i1} が複数ある場合は、それらは同一であってもよく、異なってもよく、

L^{i1} 及び L^{i2} は、それぞれ独立して、水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基又は炭素原子数1から20のアルキル基のいずれかを表し、

当該アルキル基における1つ又は2つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 及び/又は $-CS-$ で置換されていてもよく、

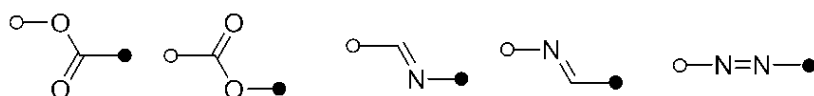
当該アルキル基における1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 及び/又は $-NH-CO-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基における1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよいが、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはない、

Z^{i1} 及び Z^{i2} は、それぞれ独立して、単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、式 $(Z^{i1/2}-5)$ で表される基、式 $(Z^{i1/2}-6)$ で表される基、式 $(Z^{i1/2}-11)$ で表される基、式 $(Z^{i1/2}-12)$ で表される基又は式 $(Z^{i1/2}-13)$ で表される基のいずれかを表し、

【化2】



$(Z^{i1/2}-5)$

$(Z^{i1/2}-6)$

$(Z^{i1/2}-11)$

$(Z^{i1/2}-12)$

$(Z^{i1/2}-13)$

（式 $(Z^{i1/2}-5)$ 、式 $(Z^{i1/2}-6)$ 、式 $(Z^{i1/2}-11)$ 、式 $(Z^{i1/2}-12)$ 又は式 $(Z^{i1/2}-13)$ 中、

10

20

30

40

50

白点はインデン構造、 A^{i1} 又は A^{i2} への結合手を表し、
黒点は A^{i1} 又は A^{i2} への結合手を表す。)

n^{i1} は、0～3の整数を表すが、

A^{i2} 又は Z^{i2} が複数存在する場合は、それらはそれぞれ同一であってもよく、異なってもよい。)

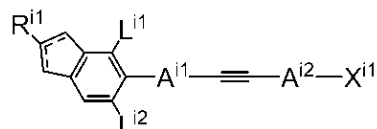
で表される化合物。

【請求項2】

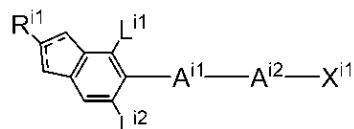
前記一般式(i)で表される化合物が、下記一般式(i-1)、(i-2)、(i-3)、(i-4)、(i-5)、(i-6)、(i-8)、(i-9)、(i-10)及び(i-11)

10

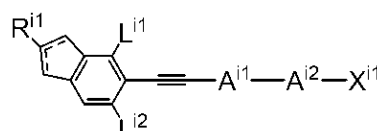
【化3】



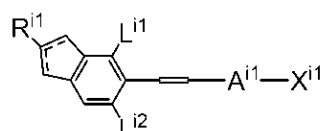
(i-1)



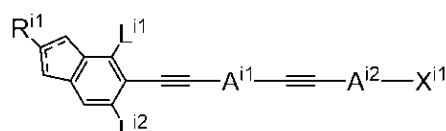
(i-4)



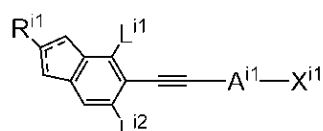
(i-2)



(i-5)



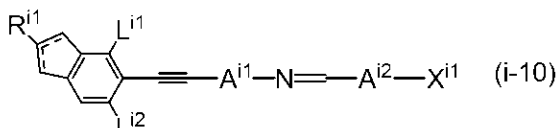
(i-3)



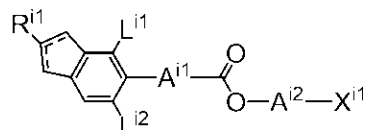
(i-6)

20

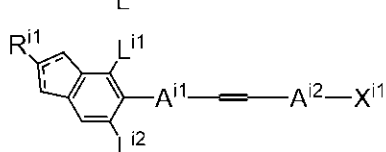
【化4】



(i-10)

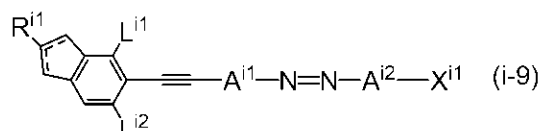


(i-8)



(i-11)

30



(i-9)

(一般式(i-1)、(i-2)、(i-3)、(i-4)、(i-5)、(i-6)、(i-8)、(i-9)、(i-10)及び(i-11)中、

破線、 R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 及び X^{i1} は、上記一般式(i)中の R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 及び X^{i1} とそれぞれ同じ意味を表す。)

40

で表される化合物からなる群から選ばれる請求項1に記載の液晶組成物。

【請求項3】

請求項1又は2に記載の化合物を1種又は2種以上含む液晶組成物。

【請求項4】

請求項3に記載の液晶組成物を用いた、液晶表示素子。

【請求項5】

請求項3に記載の液晶組成物を用いた、センサ。

【請求項6】

請求項3に記載の液晶組成物を用いた、液晶レンズ。

50

【請求項 7】

請求項 3 に記載の液晶組成物を用いた、光通信機器。

【請求項 8】

請求項 3 に記載の液晶組成物を用いた、アンテナ。

【請求項 9】

請求項 8 に記載のアンテナであって、
複数のスロットを備えた第 1 基板と、
前記第 1 基板と対向し、給電部が設けられた第 2 基板と、
前記第 1 基板と前記第 2 基板との間に設けられた第 1 誘電体層と、
前記複数のスロットに対応して配置される複数のパッチ電極と、
前記パッチ電極が設けられた第 3 基板と、
前記第 1 基板と前記第 3 基板との間に設けられた液晶層とを備え、
前記液晶層が、請求項 3 に記載の液晶組成物を含有するアンテナ。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、化合物並びにこれを用いた液晶組成物、液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器及びアンテナに関する。

【背景技術】

【0002】

ディスプレイ用途に多く用いられている液晶の新規用途として、自動車等の移動体と通信衛星との間で、電波の送受信を行う液晶を用いたアンテナが注目されている。従来、衛星通信は、パラボラアンテナを用いているが、自動車等の移動体で用いる場合、随時パラボラアンテナを衛星方向へ向けなければならず、大きな可動部が必要であった。しかし液晶を用いたアンテナは、パネル内部の液晶が動作することにより電波の送受信方向を変える事が出来るため、アンテナ自体を動かす必要が無くアンテナの形状も平面にすることが出来る。また、グローバルな大容量かつ高速通信を実現するため、多数の低軌道衛星による低軌道衛星コンステレーションの検討が進んでいる。地上からでは常に移動しているように見える低軌道衛星を追従するには、電波の送受信方向を容易に変えることができる液晶アンテナは有用である。

一般に、自動車等の自動運転には、高精度 3D マップ情報の大量データダウンロードが必要である。しかし、液晶を用いたアンテナであれば、当該アンテナを自動車に組み込むことにより、通信衛星から大量データダウンロードが、機械的な可動部が無くても可能となる。衛星通信で用いられる周波数帯は、約 13GHz 帯であり、今までの液晶ディスプレイ用途で使用している周波数と大きく異なる。そのため、液晶への要求物性も大きく異なり、アンテナ用の液晶に要求される Δn は例えば 0.4 程度、動作温度範囲は例えば -20 ~ 120℃ となる。

また、自動車等の移動体の自動運転用センサとして、液晶を用いた赤外線レーザー画像認識・測距装置も注目されている。この用途の液晶に要求される Δn は例えば 0.3 ~ 0.6、動作温度範囲は例えば 10 ~ 100℃ となる。

更に、0.2 以上の高い Δn を示す液晶組成物を構成する液晶性化合物は相溶性が低いものが多いことが知られている。したがって、相溶性の高い液晶性化合物を選択することも重要である。

これに対して、アンテナ用の液晶の技術としては、例えば、特許文献 1 が挙げられる。

また、非特許文献 1 では、高周波デバイスの構成成分として液晶材料の使用が提唱されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【文献】特開 2016-37607 号公報

【非特許文献】

【0004】

【文献】ドルフィ（D. D o l f i）, 「エレクトロニクスレター（E l e c t r o n i c s L e t t e r s）」, （英国）, 1993年, 29巻, 10号, p. 926-928

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

本発明は、 Δn が大きく、 $\Delta \epsilon_r$ が大きく、低温又は室温における保存性が良好な液晶組成物を提供することができる化合物並びにこれを用いた液晶組成物、液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器及びアンテナを提供することを課題とする。

10

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明者らは、鋭意検討した結果、インデン構造とイソチオシアネート基（-NCS）をはじめとする所定の側鎖構造を有する一般式（i）で表される化合物が、上記課題を解決できることを見出し、本発明を完成するに至った。

上記課題を解決する本発明の構成の一例としては、以下の通りである。

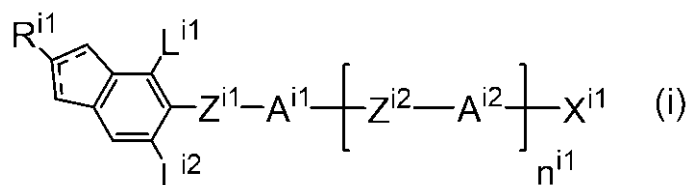
【0007】

項1. 下記一般式（i）

【0008】

【化1】

20



（一般式（i）中、

R^{i1} は、水素原子又は炭素原子数1～20のアルキル基を表し、

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $\text{---CH}_2\text{---}$ は、それぞれ独立して、 ---O--- 、 ---S--- 、 ---CO--- 及び／又は ---CS--- で置換されていてもよく、

30

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $\text{---CH}_2\text{---CH}_2\text{---}$ は、それぞれ独立して、 ---CO---O--- 、 ---O---CO--- 、 ---CO---S--- 、 ---S---CO--- 、 ---CO---NH--- 、 ---NH---CO--- 、 ---CH=CH--- 、 ---CF=CF--- 及び／又は $\text{---C}\equiv\text{C---}$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよいが、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはなく、

X^{i1} は、水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、チオイソシアノ基、イソチオシアネート基、イソシアネート基又は炭素原子数1～20のアルキル基を表し、

40

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $\text{---CH}_2\text{---}$ は、それぞれ独立して、 ---O--- 、 ---S--- 、 ---CO--- 及び／又は ---CS--- で置換されていてもよく、

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $\text{---CH}_2\text{---CH}_2\text{---}$ は、それぞれ独立して、 ---CO---O--- 、 ---O---CO--- 、 ---CO---S--- 、 ---S---CO--- 、 ---CO---NH--- 、 ---NH---CO--- 、 ---CH=CH--- 、 ---CF=CF--- 及び／又は $\text{---C}\equiv\text{C---}$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよいが、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはなく、

A^{i1} 及び A^{i2} は、それぞれ独立して、炭素原子数3～16の炭化水素環又は炭素原子数3～16の複素環のいずれかを表し、

50

前記 A^{i1} 及び A^{i2} 中の 1 つ又は 2 つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、置換基 S^{i1} によって置換されていてもよく、

置換基 S^{i1} は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基、炭素原子数 1 ～ 20 のアルキル基のいずれかを表し、

当該アルキル基における 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 及び $/$ 又は $-CO-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基における 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 及び $/$ 又は $-NH-CO-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基における 1 つ又は 2 つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよいが、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはなく、

置換基 S^{i1} が複数ある場合は、それらは同一であってもよく、異なってもよく、

L^{i1} 及び L^{i2} は、それぞれ独立して、水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基又は炭素原子数 1 から 20 のアルキル基のいずれかを表し、

当該アルキル基における 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 及び $/$ 又は $-CS-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基における 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 及び $/$ 又は $-NH-CO-$ で置換されていてもよく、

当該アルキル基における 1 つ又は 2 つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよいが、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはなく、

Z^{i1} 及び Z^{i2} は、それぞれ独立して、単結合、炭素原子数 1 ～ 20 のアルキレン基のいずれかを表し、

当該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-CF_2-$ 及び $/$ 又は $-CO-$ で置換されていてもよく、

当該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CH_2-CH(CH_3)-$ 、 $-CH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=C(CH_3)-$ 、 $-C(CH_3)=CH-$ 、 $-CH=N-$ 、 $-N=CH-$ 、 $-N=N-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CO-O-$ 及び $/$ 又は $-O-CO-$ で置換されてもよく、

酸素原子と酸素原子が直接結合することはなく、

n^{i1} は、0 ～ 3 の整数を表すが、

A^{i2} 又は Z^{i2} が複数存在する場合は、それらはそれぞれ同一であってもよく、異なってもよい。）

で表される化合物。

【0009】

項 2．前記一般式 (i) で表される化合物が、下記一般式 (i-1) ～ (i-11)

【0010】

10

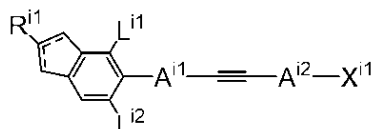
20

30

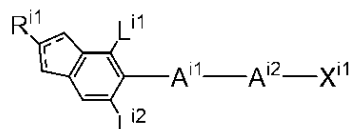
40

50

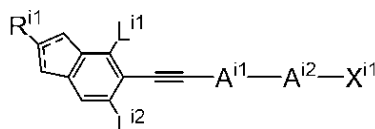
【化 2】



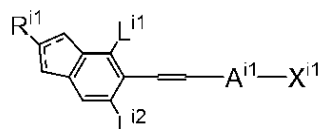
(i-1)



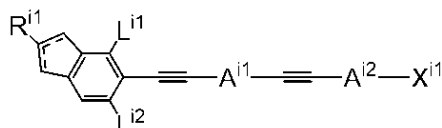
(i-4)



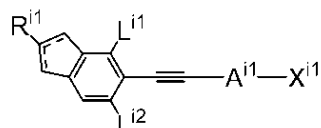
(i-2)



(i-5)



(i-3)

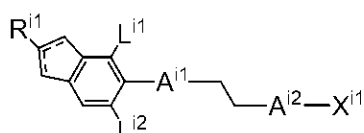


(i-6)

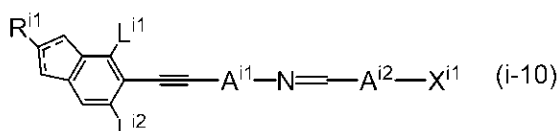
10

【 0 0 1 1 】

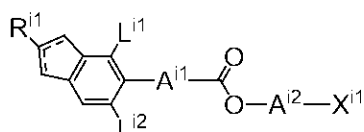
【化 3】



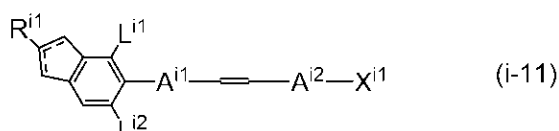
(i-7)



(i-10)

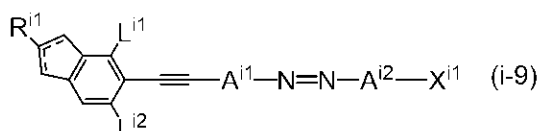


(i-8)



(i-11)

20



(i-9)

(一般式 (i-1) ~ (i-11) 中、

R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 及び X^{i1} は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 及び X^{i1} とそれぞれ同じ意味を表す。) 30

で表される化合物からなる群から選ばれる項 1 に記載の液晶組成物。

【 0 0 1 2 】

項 3. 前記 X^{i1} が、フッ素原子、シアノ基、イソチオシアネート基 ($-NCS$)、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルキル基又は炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルコキシ基を表す項 1 又は 2 に記載の化合物。

【 0 0 1 3 】

項 4. 項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物を 1 種又は 2 種以上含む液晶組成物。

【 0 0 1 4 】

項 5. 項 4 に記載の液晶組成物を用いた、液晶表示素子。 40

【 0 0 1 5 】

項 6. 項 4 に記載の液晶組成物を用いた、センサ。

【 0 0 1 6 】

項 7. 項 4 に記載の液晶組成物を用いた、液晶レンズ。

【 0 0 1 7 】

項 8. 項 4 に記載の液晶組成物を用いた、光通信機器。

【 0 0 1 8 】

項 9. 項 4 に記載の液晶組成物を用いた、アンテナ。

【 0 0 1 9 】

項 10. 項 9 に記載のアンテナであって、 50

複数のスロットを備えた第1基板と、
前記第1基板と対向し、給電部が設けられた第2基板と、
前記第1基板と前記第2基板との間に設けられた第1誘電体層と、
前記複数のスロットに対応して配置される複数のパッチ電極と、
前記パッチ電極が設けられた第3基板と、
前記第1基板と前記第3基板との間に設けられた液晶層とを備え、
前記液晶層が、項4に記載の液晶組成物を含有するアンテナ。

【発明の効果】

【0020】

本発明によれば、インデン構造とイソチオシアネート基(−NCS)基をはじめとする所定の側鎖構造を有する一般式(i)で表される化合物を用いることにより、 Δn が大きく、 $\Delta \epsilon_r$ が大きく、低温又は室温における保存性が良好な液晶組成物を得ることができ、当該液晶組成物は、液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器及びアンテナに有用である。

【発明を実施するための形態】

【0021】

(一般式(i)で表される化合物)

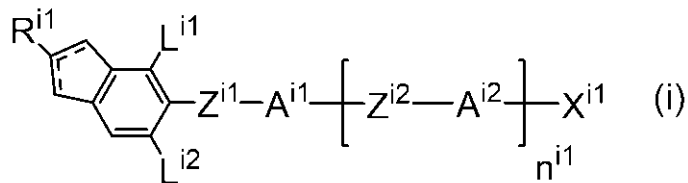
本発明に係る化合物は、インデン構造とイソチオシアネート基(−NCS)基をはじめとする所定の側鎖構造を有する下記一般式(i)で表される化合物である。

【0022】

また、本発明に係る液晶組成物は、インデン構造とイソチオシアネート基(−NCS)基をはじめとする所定の側鎖構造を有する一般式(i)で表される化合物の1種又は2種以上含む。

【0023】

【化4】



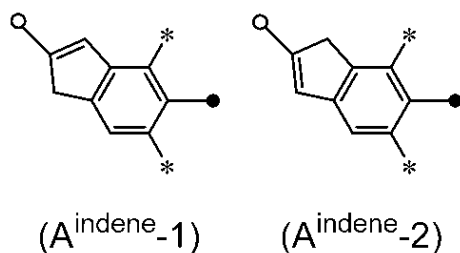
【0024】

一般式(i)中、破線は二重結合の位置を表す。

インデン構造としては、具体的には、下記一般式(A_{indene}-1)～(A_{indene}-2)で表される基である。

【0025】

【化5】



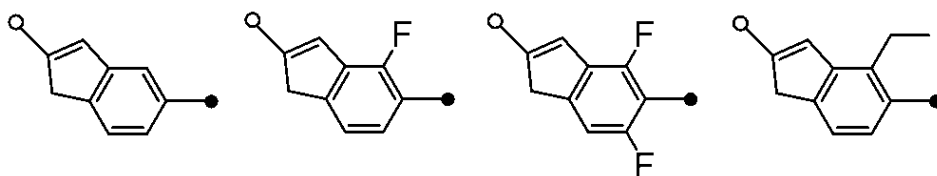
【0026】

一般式(A_{indene}-1)～(A_{indene}-2)中、*はLⁱ¹及びLⁱ²への結合手を表し、白点はRⁱ¹への結合手を表し、黒点はZⁱ¹への結合手を表す。

また、一般式(A_{indene}-1)で表される基としては、下記構造式(A_{indene}-1-1)～(A_{indene}-1-4)で表される基が好ましい。

【0027】

【化6】

(A^{indene}-1-1) (A^{indene}-1-2) (A^{indene}-1-3) (A^{indene}-1-4)

10

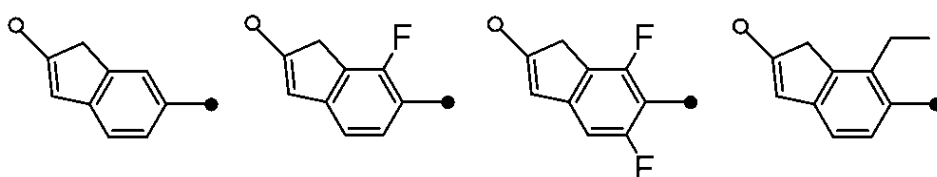
【0028】

構造式 (A^{indene}-1-1) ~ (A^{indene}-1-4) 中、白点は Rⁱ¹ への結合手を表し、黒点は Zⁱ¹ への結合手を表す。

また、一般式 (A^{indene}-2) で表される基としては、下記構造式 (A^{indene}-2-1) ~ (A^{indene}-2-4) で表される基が好ましい。

【0029】

【化7】

(A^{indene}-2-1) (A^{indene}-2-2) (A^{indene}-2-3) (A^{indene}-2-4)

20

【0030】

構造式 (A^{indene}-2-1) ~ (A^{indene}-2-4) 中、白点は Rⁱ¹ への結合手を表し、黒点は Zⁱ¹ への結合手を表す。

一般式 (i) で表される化合物は、インデン構造を有することから分子間相互作用が弱めつつも π 共役結合が広がり、Δn を高める。

一般式 (i) 中、Rⁱ¹ は、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 20 のアルキル基を表す。

当該アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキル基であり、直鎖状のアルキル基であることが好ましい。

当該アルキル基における炭素原子数は、好ましくは 2 ~ 10、好ましくは 2 ~ 6 である。

当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の -CH₂- は、それぞれ独立して、-O-、-S-、-CO- 及び / 又は -CS- で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の -CH₂-CH₂- は、それぞれ独立して、-CO-O-、-O-CO-、-CO-S-、-S-CO-、-CO-NH-、-NH-CO-、-CH=CH-、-CF=CF- 及び / 又は -C≡C- で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。但し、当該アルキル基が所定の基により置換される場合には、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び / 又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

例えば、Rⁱ¹ は、当該アルキル基中の 1 つの -CH₂- が -O- に置換されることにより、炭素原子数 1 ~ 19 のアルコキシ基を表すことができる。

当該アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルコキシ基であり、直鎖状のアルコ

30

40

50

キシ基であることが好ましい。

当該アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、 R^{i1} は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-S-$ に置換されることにより、炭素原子数1～19のアルキルスルファニル基（アルキルチオ基）を表すことができる。

当該アルキルスルファニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキルスルファニル基であり、直鎖状のアルキルスルファニル基であることが好ましい。

当該アルキルスルファニル基における炭素原子数は、好ましくは1～10、好ましくは1～6である。

また、 R^{i1} は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-CH=CH-$ に置換されることにより、炭素原子数2～20のアルケニル基を表すことができる。

10

当該アルケニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニル基であり、直鎖状のアルケニル基であることが好ましい。

当該アルケニル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、 R^{i1} は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数1～20のハロゲン化アルキル基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルキル基であり、直鎖状のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

20

当該ハロゲン化アルキル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、 R^{i1} は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換され、且つ当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数1～19のハロゲン化アルコキシ基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルコキシ基であり、直鎖状のハロゲン化アルコキシ基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

R^{i1} における炭素原子数1～20のアルキル基（置換されたものも含む）の具体例としては、式 $(R^{i1}-1) \sim (R^{i1}-39)$ で表される基等が挙げられる。

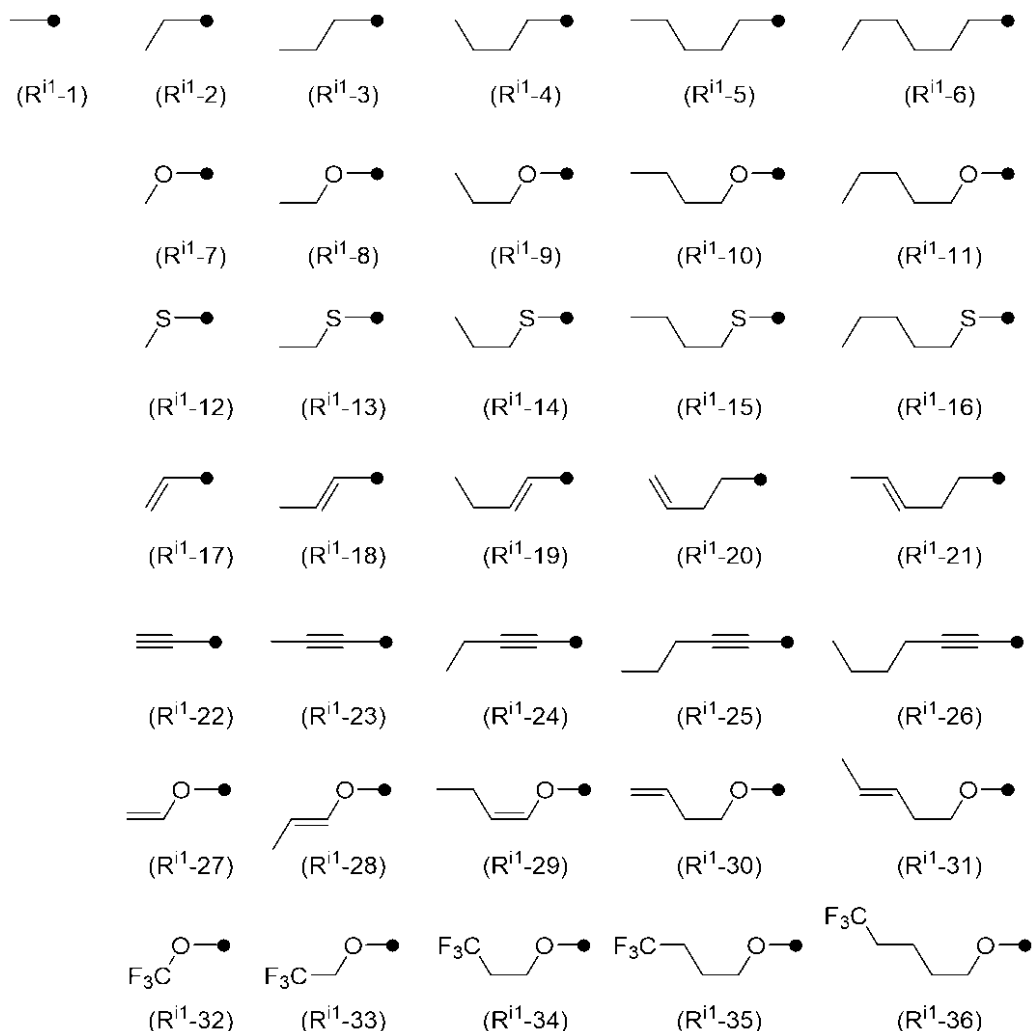
30

【0031】

40

50

【化 8】

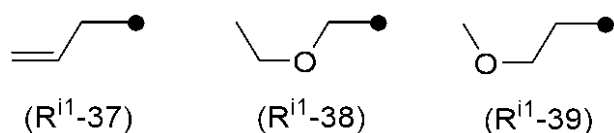


10

20

【0032】

【化 9】



30

【0033】

式 (Rⁱ¹-1) ~ (Rⁱ¹-39) 中、黒点はインデン構造への結合手を表す。

なお、Rⁱ¹としては、溶解性の観点から、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルコキシアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 6 の直鎖状のアルケニル基が好ましい。

40

【0034】

一般式 (i) 中、Xⁱ¹は、水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、チオイソシアノ基、イソチオシアネート基、イソシアネート基又は炭素原子数 1 ~ 20 のアルキル基を表す。

当該アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキル基であり、直鎖状のアルキル基であることが好ましい。

当該アルキル基における炭素原子数は、好ましくは 2 ~ 10、好ましくは 2 ~ 6 である。

当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の -CH₂- は、それぞれ独立して、-O-、-

50

S-、-CO-及び／又は-CS-で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の-CH₂-CH₂-は、それぞれ独立して、-CO-O-、-O-CO-、-CO-S-、-S-CO-、-CO-NH-、-NH-CO-、-CH=CH-、-CF=CF-及び／又は-C≡C-で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。但し、当該アルキル基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と硫黄原子が直接結合することはない。

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び／又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

例えば、Xⁱ¹は、当該アルキル基中の1つの-CH₂-が-O-に置換されることにより、炭素原子数1～19のアルコキシ基を表すことができる。

当該アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルコキシ基であり、直鎖状のアルコキシ基であることが好ましい。

当該アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、Xⁱ¹は、当該アルキル基中の1つの-CH₂-が-S-に置換されることにより、炭素原子数1～19のアルキルスルファニル基（アルキルチオ基）を表すことができる。

当該アルキルスルファニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキルスルファニル基であり、直鎖状のアルキルスルファニル基であることが好ましい。

当該アルキルスルファニル基における炭素原子数は、好ましくは1～10、好ましくは1～6である。

また、Xⁱ¹は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の-CH₂-CH₂-が、-CH=CH-に置換されることにより、炭素原子数2～20のアルケニル基を表すことができる。

当該アルケニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニル基であり、直鎖状のアルケニル基であることが好ましい。

当該アルケニル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、Xⁱ¹は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数1～20のハロゲン化アルキル基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルキル基であり、直鎖状のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルキル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、Xⁱ¹は、当該アルキル基中の1つの-CH₂-が-O-に置換され、且つ当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数1～19のハロゲン化アルコキシ基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルコキシ基であり、直鎖状のハロゲン化アルコキシ基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

Xⁱ¹における炭素原子数1～20のアルキル基（置換されたものも含む）の具体例としては、式(Xⁱ¹-1)～(Xⁱ¹-39)で表される基等が挙げられる。

【0035】

10

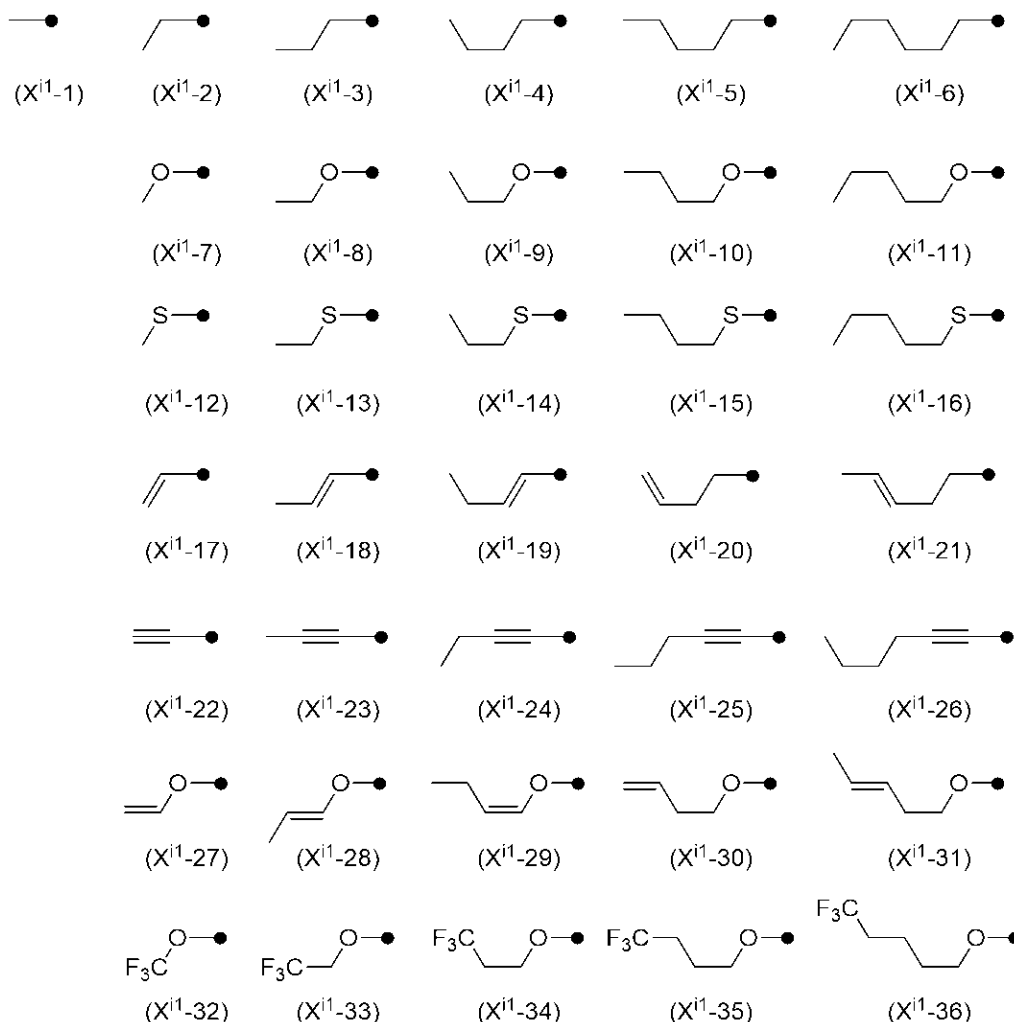
20

30

40

50

【化 1 0】

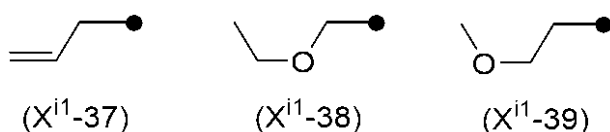


10

20

【0 0 3 6】

【化 1 1】



30

【0 0 3 7】

式 (Xⁱ¹-1) ~ (Xⁱ¹-39) 中、黒点は Aⁱ¹ 又は Aⁱ² への結合手を表す。

なお、長波長域、及び高周波域の Δn や、粘性の観点から、Xⁱ¹ は、フッ素原子、シアノ基、イソチオシアネート基 (—NCS)、炭素原子数 1~6 の直鎖状のアルキル基又は炭素原子数 1~6 の直鎖状のアルコキシ基を表すことが好ましい。

40

【0 0 3 8】

一般式 (i) 中、Aⁱ¹ 及び Aⁱ² は、それぞれ独立して、炭素原子数 3~16 の炭化水素環又は炭素原子数 3~16 の複素環のいずれかを表す。

炭素原子数 3~16 の炭化水素環又は炭素原子数 3~16 の複素環は、より具体的には、以下の基 (a)、基 (b) 基 (c) 及び基 (d) :

(a) 1, 4-シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 つの —CH₂— 又は隣接していない 2 つ以上の —CH₂— は —O— 又は —S— に置き換えられても良い。)

(b) 1, 4-フェニレン基 (この基中に存在する 1 つの —CH= 又は隣接していない 2 つ以上の —CH= は —N= に置き換えられても良い。)

(c) 1, 4-シクロヘキセニレン基、ビスシクロ [2.2.2] オクタン-1, 4-ジ

50

イル基、ナフタレンー２，６－ジイル基、ナフタレンー１，４－ジイル基、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレンー２，６－ジイル基、５，６，７，８－テトラヒドロナフタレンー１，４－ジイル基、デカヒドロナフタレンー２，６－ジイル基、アントラセンー２，６－ジイル基、アントラセンー１，４－ジイル基、アントラセンー９，１０－ジイル基、フェナントレンー２，７－ジイル基（ナフタレンー２，６－ジイル基、ナフタレンー１，４－ジイル基、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレンー２，６－ジイル基、５，６，７，８－テトラヒドロナフタレンー１，４－ジイル基、アントラセンー２，６－ジイル基、アントラセンー１，４－ジイル基、アントラセンー９，１０－ジイル基又はフェナントレンー２，７－ジイル基中に存在する１つの－ＣＨ＝又は２つ以上の－ＣＨ＝は－Ｎ＝に置き換えられても良い。）

10

（ｄ）チオフェンー２，５－ジイル基、ベンゾチオフェンー２，５－ジイル基、ベンゾチオフェンー２，６－ジイル基、ジベンゾチオフェンー３，７－ジイル基、ジベンゾチオフェンー２，６－ジイル基、チエノ〔３，２－ｂ〕チオフェンー２，５－ジイル基（この基中に存在する１つの－ＣＨ＝又は隣接していない２つ以上の－ＣＨ＝は－Ｎ＝に置き換えられても良い。）

からなる群より選ばれる基を表すことが好ましい。

【００３９】

A^{i1} 及び A^{i2} 中の１つ又は２つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、置換基 S^{i1} によって置換されていてもよい。

20

置換基 S^{i1} は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基、炭素原子数１～２０のアルキル基のいずれかを表す。

当該アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキル基であり、直鎖状のアルキル基であることが好ましい。

当該アルキル基における炭素原子数は、好ましくは２～１０、好ましくは３～６である。

当該アルキル基における１つ又は２つ以上の－ＣＨ₂－は、それぞれ独立して、－Ｏ－、－Ｓ－及び／又は－ＣＯ－で置換されていてもよい。

30

また、当該アルキル基における１つ又は２つ以上の－ＣＨ₂－ＣＨ₂－は、それぞれ独立して、－ＣＨ＝ＣＨ－、－ＣＦ＝ＣＦ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯ－Ｏ－、－Ｏ－ＣＯ－、－ＣＯ－Ｓ－、－Ｓ－ＣＯ－、－ＣＯ－ＮＨ－及び／又は－ＮＨ－ＣＯ－で置換されてもよい。

当該アルキル基における１つ又は２つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。

但し、当該アルキル基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び／又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

40

置換基 S^{i1} としては、炭素原子数１～１０の直鎖状のアルキル基、塩素原子、フッ素原子が好ましい。

また、 A^{i1} 及び A^{i2} の少なくとも一つは少なくとも一つの置換基 S^{i1} で置換されていることが好ましい。

また、 A^{i2} は、少なくとも一つの置換基 S^{i1} で置換されていることが好ましい。

なお、置換基 S^{i1} が複数ある場合は、それらは同一であってもよく、異なってもよい。

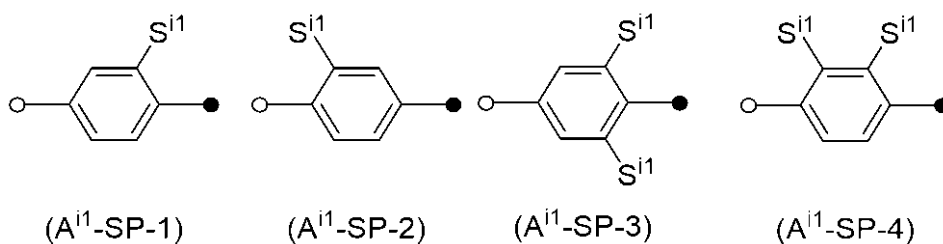
【００４０】

A^{i1} における置換基 S^{i1} の置換位置としては、下記式 ($A^{i1}-SP-1$) ～ ($A^{i1}-SP-4$) のいずれかであることが好ましい。

50

【0041】

【化12】



10

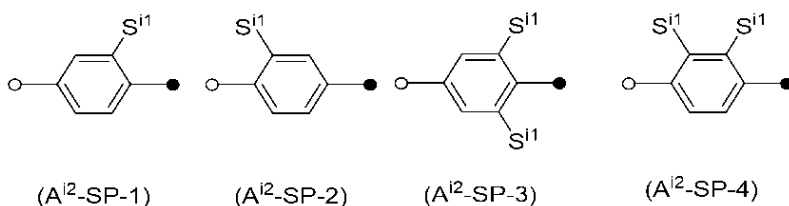
【0042】

式(Aⁱ¹-SP-1)～(Aⁱ¹-SP-4)中、白点はZⁱ¹への結合手を表し、黒点はZⁱ²又はXⁱ¹への結合手を表す。

Aⁱ²における置換基Sⁱ¹の置換位置としては、下記式(Aⁱ²-SP-1)～(Aⁱ²-SP-4)のいずれかであることが好ましい。

【0043】

【化13】



20

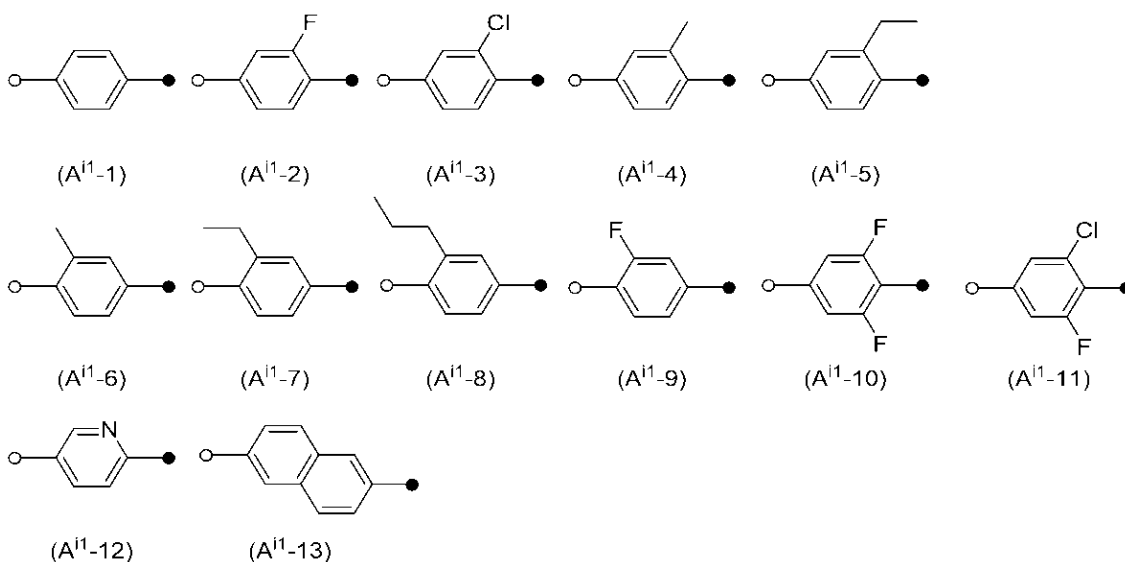
【0044】

式(Aⁱ²-SP-1)～(Aⁱ²-SP-4)中、白点はZⁱ²への結合手を表し、黒点はZⁱ²又はXⁱ¹への結合手を表す。

より具体的には、Aⁱ¹は、下記式(Aⁱ¹-1)～(Aⁱ¹-13)のいずれかを表すことが好ましい。

【0045】

【化14】



40

【0046】

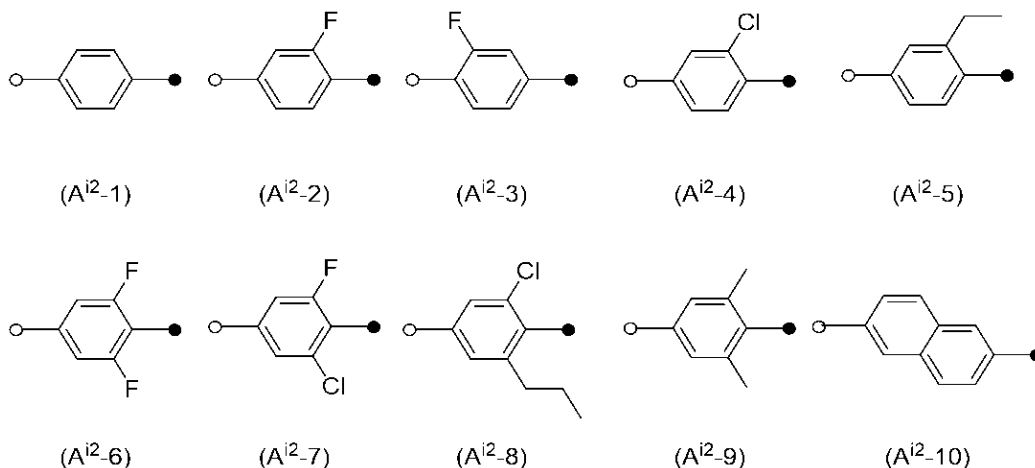
式(Aⁱ¹-1)～(Aⁱ¹-13)中、白点はZⁱ¹への結合手を表し、黒点はZⁱ²又はXⁱ¹への結合手を表す。

50

より具体的には、 A^{i2} は、下記式 $(A^{i2-1}) \sim (A^{i2-10})$ のいずれかを表すことが好ましい。

【0047】

【化15】



10

【0048】

式 $(A^{i2-1}) \sim (A^{i2-10})$ 中、白点は Z^{i2} への結合手を表し、黒点は Z^{i2} 又は X^{i1} への結合手を表す。

20

【0049】

一般式(i)中、 L^{i1} 及び L^{i2} は、それぞれ独立して、水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基又は炭素原子数1から20のアルキル基のいずれかを表す。

炭素原子数1～20のアルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキル基であり、直鎖状のアルキル基であることが好ましい。

炭素原子数1～20のアルキル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

30

当該アルキル基における1つ又は2つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 及び／又は $-CS-$ で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基における1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 及び／又は $-NH-CO-$ で置換されてもよい。

また、当該アルキル基における1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子が挙げられる。

但し、当該アルキル基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

40

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び／又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

例えば、 L^{i1} 及び L^{i2} は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換されることにより、炭素原子数1～19のアルコキシ基を表すことができる。

当該アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルコキシ基であり、直鎖状のアルコキシ基であることが好ましい。

当該アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、 L^{i1} 及び L^{i2} は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-S-$ に置換される

50

ことにより、炭素原子数 1 ～ 19 のアルキルスルファニル基（アルキルチオ基）を表すことができる。

当該アルキルスルファニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキルスルファニル基であり、直鎖状のアルキルスルファニル基であることが好ましい。

当該アルキルスルファニル基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

また、 L^{i1} 及び L^{i2} は、当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-CH=CH-$ に置換されることにより、炭素原子数 2 ～ 20 のアルケニル基を表すことができる。

当該アルケニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニル基であり、直鎖状のアルケニル基であることが好ましい。

当該アルケニル基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

また、 L^{i1} 及び L^{i2} は、当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-C\equiv C-$ に置換されることにより、炭素原子数 2 ～ 20 のアルキニル基を表すことができる。

当該アルキニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキニル基であり、直鎖状のアルキニル基であることが好ましい。

当該アルキニル基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

また、 L^{i1} 及び L^{i2} は、当該アルキル基中の 1 つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換され、且つ一つ又は 2 つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-CH=CH-$ に置換されることにより、炭素原子数 2 ～ 19 のアルケニルオキシ基を表すことができる。

当該アルケニルオキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニルオキシ基であり、直鎖状のアルケニルオキシ基であることが好ましい。

当該アルケニルオキシ基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

また、 L^{i1} 及び L^{i2} は、当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数 1 ～ 20 のハロゲン化アルキル基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルキル基であり、直鎖状のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルキル基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

また、 L^{i1} 及び L^{i2} は、当該アルキル基中の 1 つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換され、且つ当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数 1 ～ 19 のハロゲン化アルコキシ基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルコキシ基であり、直鎖状のハロゲン化アルコキシ基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

【0050】

L^{i1} 及び L^{i2} における炭素原子数 1 ～ 20 のアルキル基（置換されたものも含む）の具体例としては、式 $(L^{i1}/2 - 1) \sim (L^{i1}/2 - 36)$ で表される基等が挙げられる。

【0051】

10

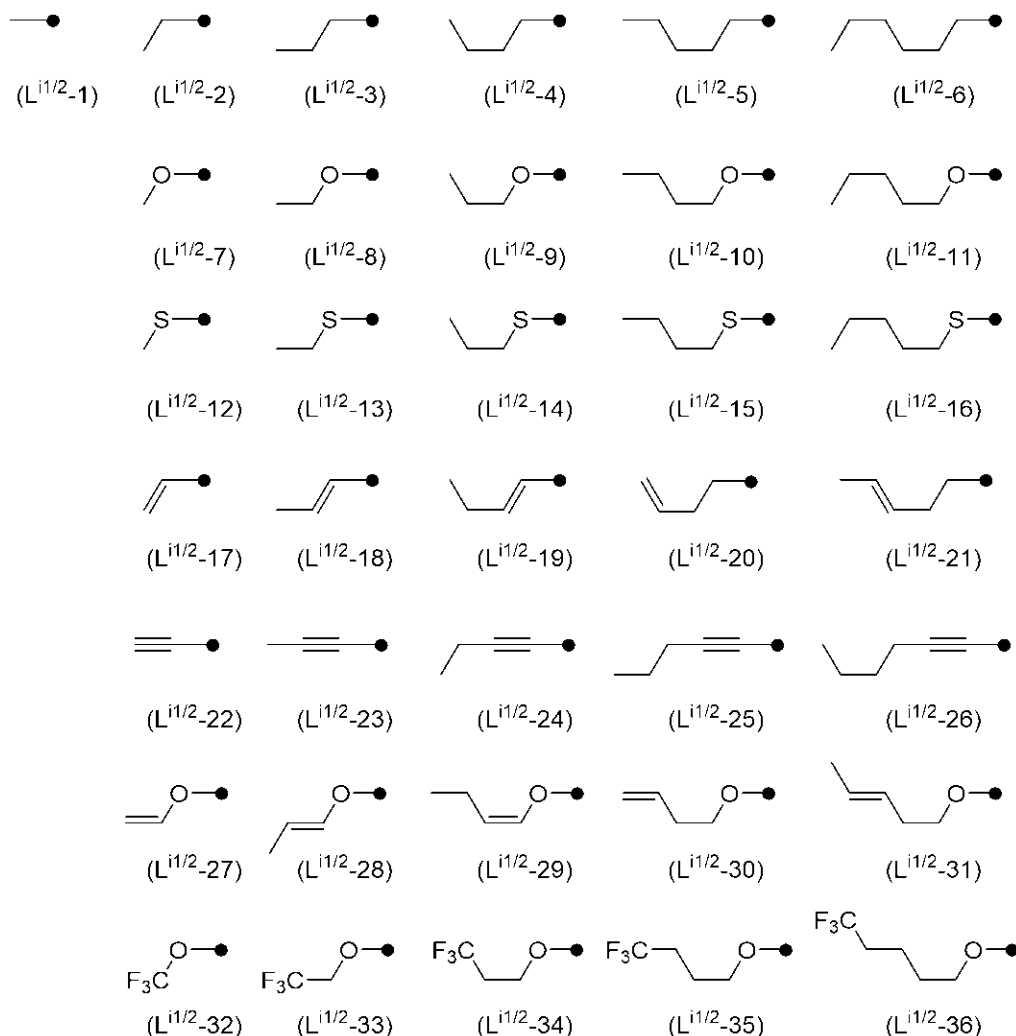
20

30

40

50

【化 1 6】



10

20

【0 0 5 2】

式 (L^{i1/2}-1) ~ (L^{i1/2}-36) 中、黒点はインデン構造への結合手を表す。

溶解性、粘性の観点から、Lⁱ¹及びLⁱ²の少なくとも一つは、水素原子、フッ素原子又は炭素原子数1~6の直鎖状のアルキル基であることが好ましく、Lⁱ¹及びLⁱ²が水素原子又はフッ素原子であることがより好ましい。

【0 0 5 3】

一般式 (i) 中、Zⁱ¹及びZⁱ²は、それぞれ独立して、単結合、炭素原子数1~20のアルキレン基のいずれかを表す。

当該アルキレン基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキレン基であり、直鎖状のアルキレン基であることが好ましい。

当該アルキレン基における炭素原子数は、好ましくは2~10、好ましくは2~6である。

当該アルキレン基中の1つ又は2つ以上の-CH₂-は、それぞれ独立して、-O-、-CF₂-及び/又は-CO-で置換されていてもよい。

また、当該アルキレン基中の1つ又は2つ以上の-CH₂-CH₂-は、それぞれ独立して、-CH₂-CH(CH₃)-、-CH(CH₃)-CH₂-、-CH=CH-、-CF=CF-、-CH=C(CH₃)-、-C(CH₃)=CH-、-CH=N-、-N=CH-、-N=N-、-C≡C-、-CO-O-及び/又は-O-CO-で置換されてもよい。

但し、当該アルキレン基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

30

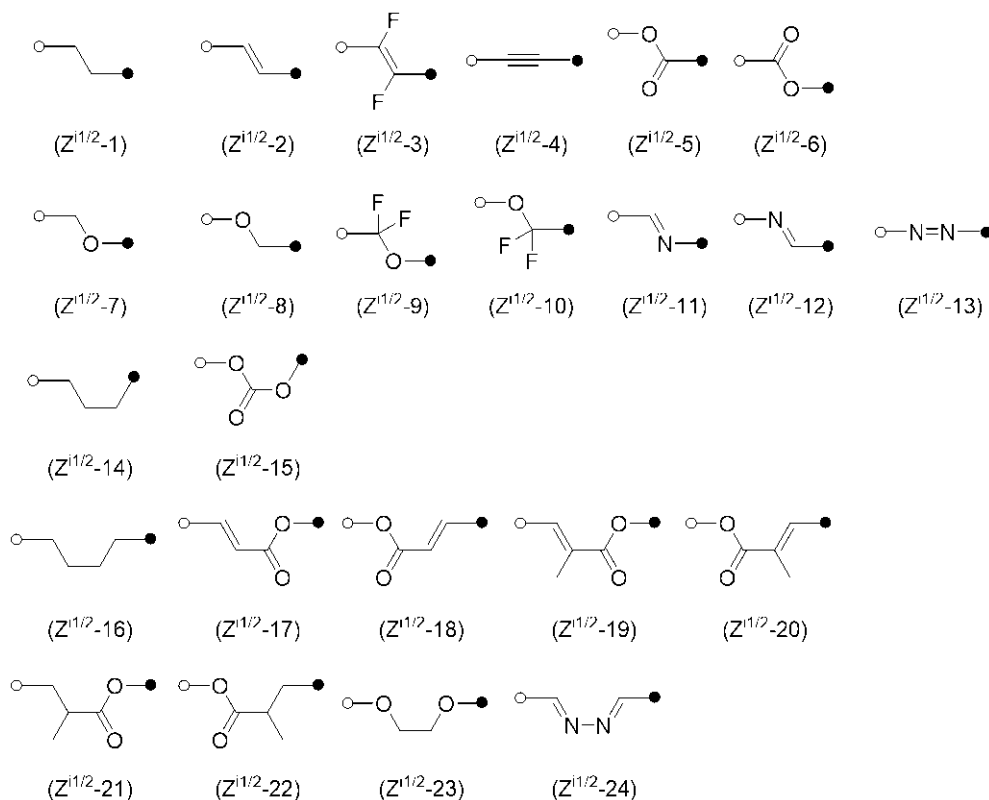
40

50

炭素原子数 2 ～ 20 のアルキレン基の具体例（置換されたものも含む）としては、式（ $Z^{i1/2-1}$ ）～（ $Z^{i1/2-24}$ ）で表される基等が挙げられる。

【0054】

【化17】



10

20

【0055】

式（ $Z^{i1/2-1}$ ）～（ $Z^{i1/2-24}$ ）中、白点はインデン構造、 A^{i1} 又は A^{i2} への結合手を表し、黒点は A^{i1} 又は A^{i2} への結合手を表す。

Δn の観点から、 Z^{i1} 及び Z^{i2} は、それぞれ独立して、単結合、 $-CH_2-CH_2-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-N=N-$ 、 $-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 又は $-C\equiv C-$ であることが好ましい。

30

また、 Δn の観点から、 Z^{i1} 及び Z^{i2} の少なくとも一つが、 $-C\equiv C-$ であることが好ましい。

【0056】

一般式（i）中、 n^{i1} は、0～3の整数、好ましくは1～2の整数を表す。

A^{i2} 又は Z^{i2} が複数存在する場合は、それらはそれぞれ同一であってもよく、異なってもよい。

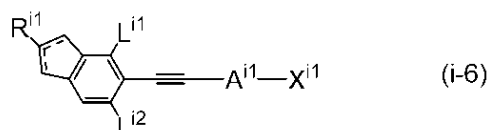
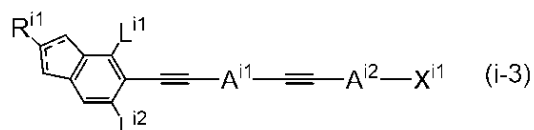
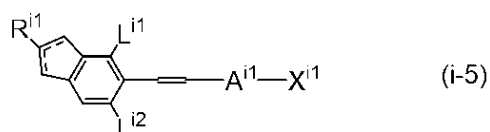
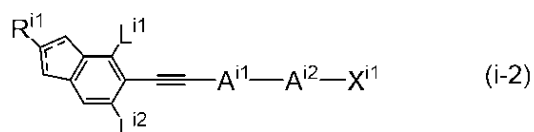
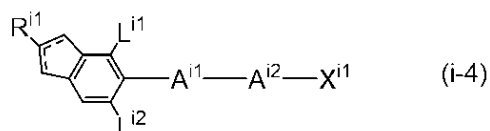
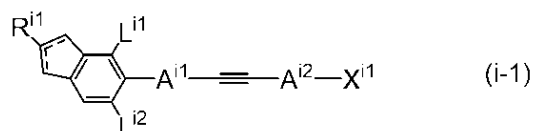
【0057】

一般式（i）で表される化合物としては、下記一般式（i-1）～（i-11）で表される化合物であることが好ましい。

40

【0058】

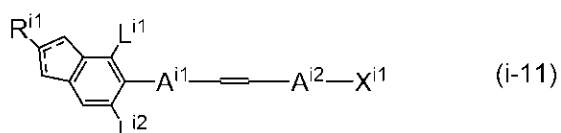
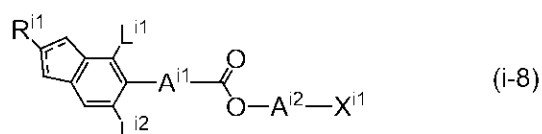
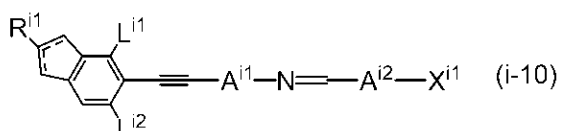
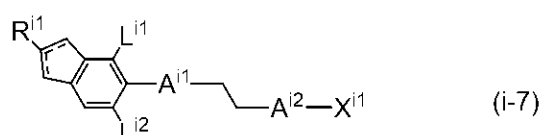
【化 18】



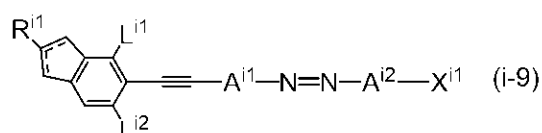
10

【0059】

【化 19】



20



【0060】

一般式 (i-1) ~ (i-11) 中、 R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 及び X^{i1} は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 及び X^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

30

【0061】

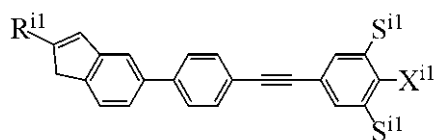
一般式 (i-1) で表される化合物としては、下記一般式 (i-1-1) ~ (i-1-19) で表される化合物であることが好ましい。

【0062】

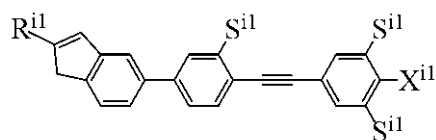
40

50

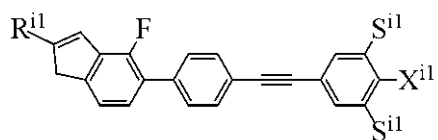
【化 2 0】



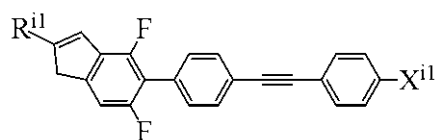
(i-1-1)



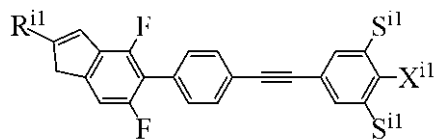
(i-1-4)



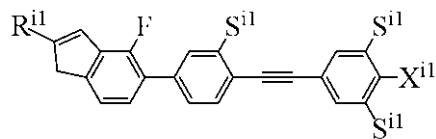
(i-1-2)



(i-1-5)



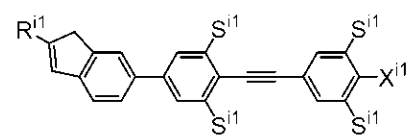
(i-1-3)



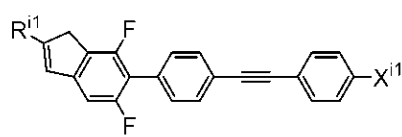
(i-1-6)

【 0 0 6 3】

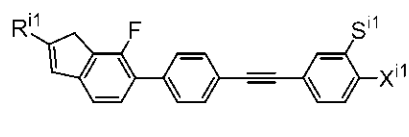
【化 2 1】



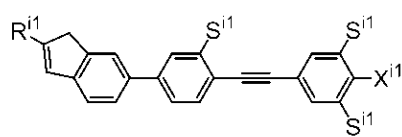
(i-1-7)



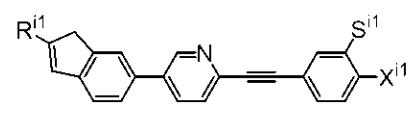
(i-1-10)



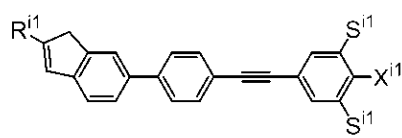
(i-1-8)



(i-1-11)



(i-1-9)



(i-1-12)

【 0 0 6 4】

10

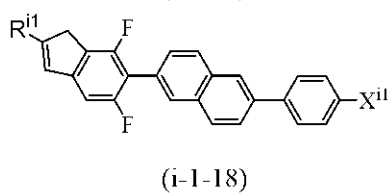
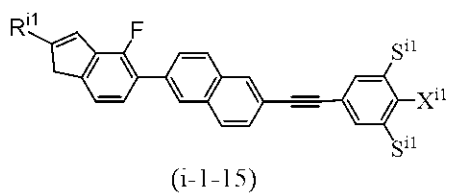
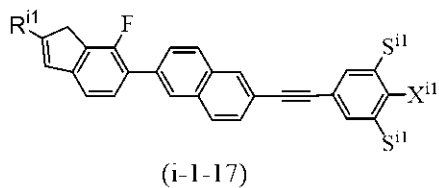
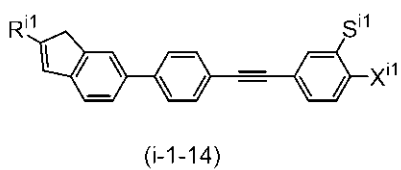
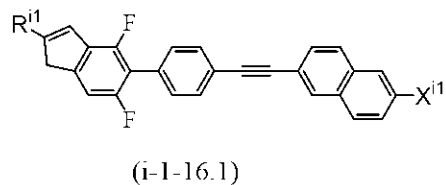
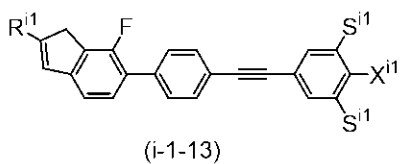
20

30

40

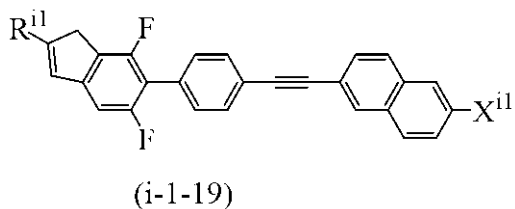
50

【化 2 2】



【 0 0 6 5】

【化 2 3】



【 0 0 6 6】

一般式 (i-1-1) ~ (i-1-19) 中、 R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

一般式 (i-1-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-1.1) ~ (i-1-1.10) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 0 6 7】

10

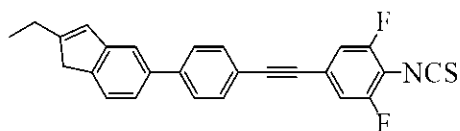
20

30

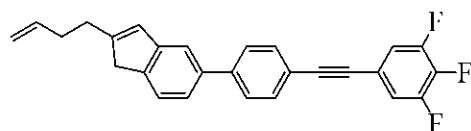
40

50

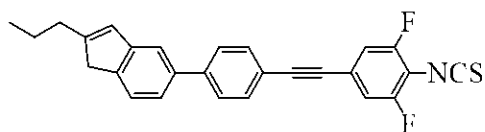
【化 2 4】



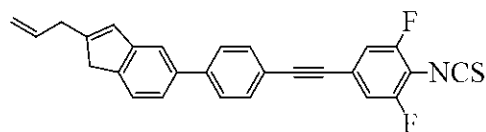
(i-1-1.1)



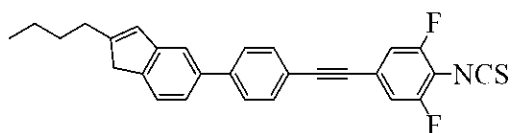
(i-1-1.4)



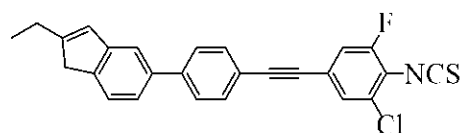
(i-1-1.2)



(i-1-1.5)



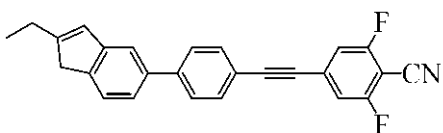
(i-1-1.3)



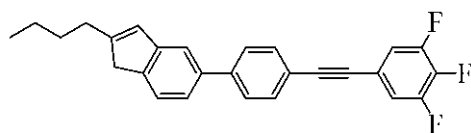
(i-1-1.6)

【 0 0 6 8】

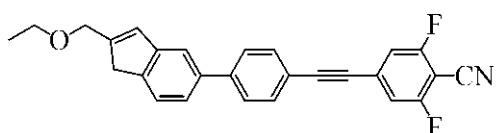
【化 2 5】



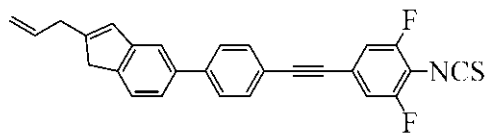
(i-1-1.7)



(i-1-1.9)



(i-1-1.8)



(i-1-1.10)

【 0 0 6 9】

一般式 (i-1-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-2.1) ~ (i-1-2.5) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 0 7 0】

10

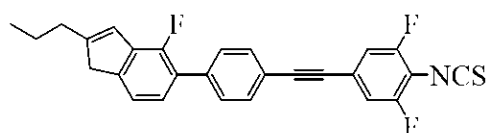
20

30

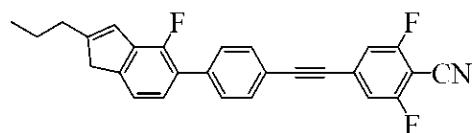
40

50

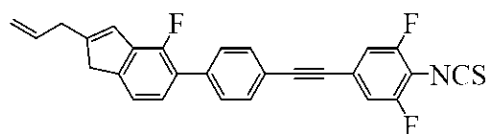
【化 2 6】



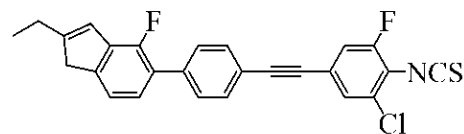
(i-1-2.1)



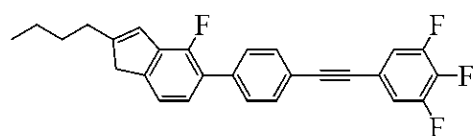
(i-1-2.4)



(i-1-2.2)



(i-1-2.5)



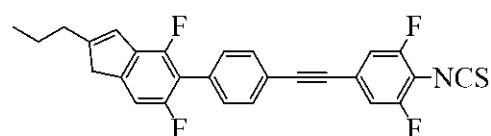
(i-1-2.3)

【 0 0 7 1】

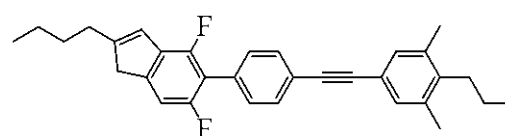
一般式 (i-1-3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-3.1) ~ (i-1-3.6) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 0 7 2】

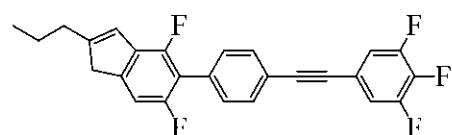
【化 2 7】



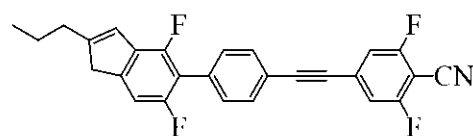
(i-1-3.1)



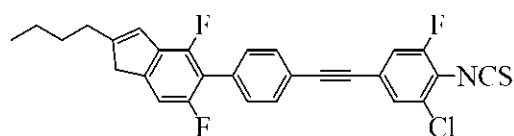
(i-1-3.4)



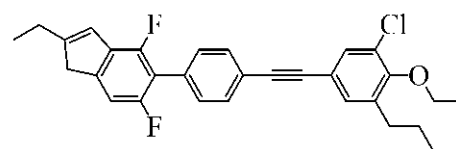
(i-1-3.2)



(i-1-3.5)



(i-1-3.3)



(i-1-3.6)

【 0 0 7 3】

一般式 (i-1-4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-4.1) ~ (i-1-4.6) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 0 7 4】

10

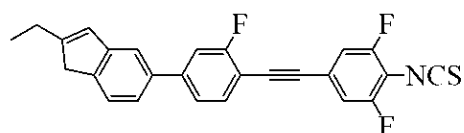
20

30

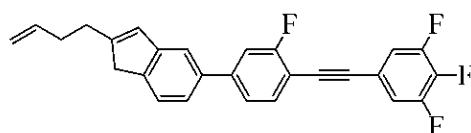
40

50

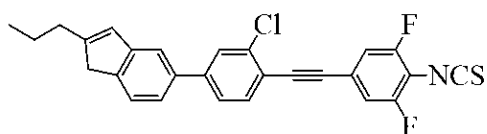
【化 28】



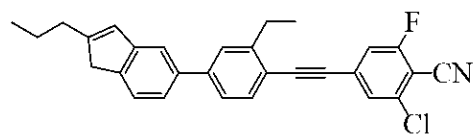
(i-1-4.1)



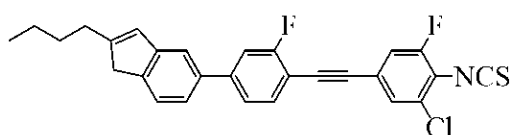
(i-1-4.4)



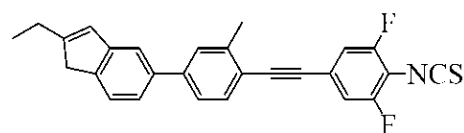
(i-1-4.2)



(i-1-4.5)



(i-1-4.3)



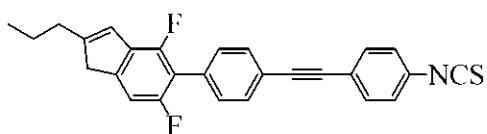
(i-1-4.6)

【0075】

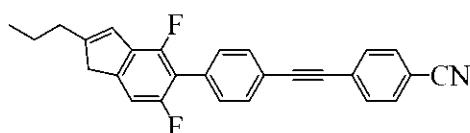
一般式 (i-1-5) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-5.1) ~ (i-1-5.5) で表される化合物等が挙げられる。

【0076】

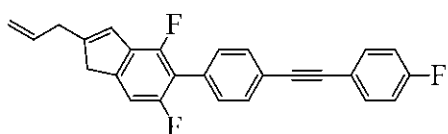
【化 29】



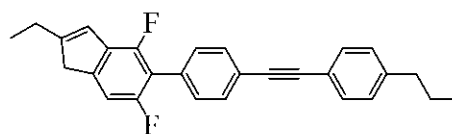
(i-1-5.1)



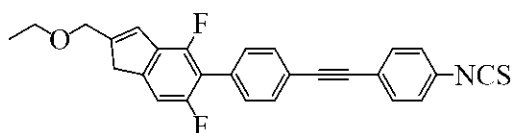
(i-1-5.4)



(i-1-5.2)



(i-1-5.5)



(i-1-5.3)

【0077】

一般式 (i-1-6) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-6.1) ~ (i-1-6.6) で表される化合物等が挙げられる。

【0078】

10

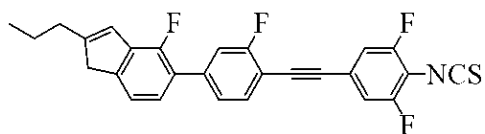
20

30

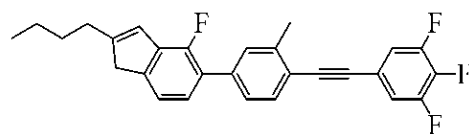
40

50

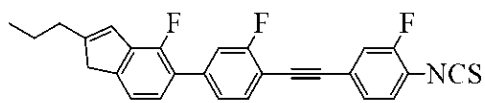
【化 3 0】



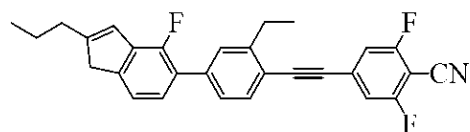
(i-1-6.1)



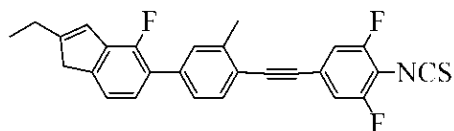
(i-1-6.4)



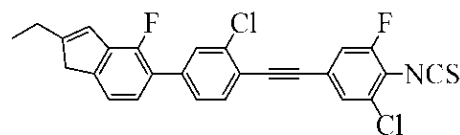
(i-1-6.2)



(i-1-6.5)



(i-1-6.3)



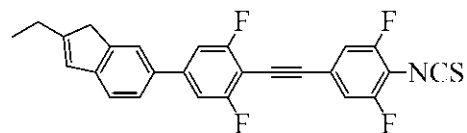
(i-1-6.6)

【0 0 7 9】

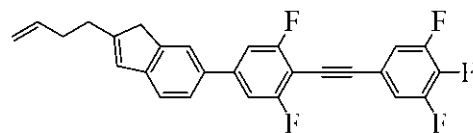
一般式 (i-1-7) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-7.1) ~ (i-1-7.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0 0 8 0】

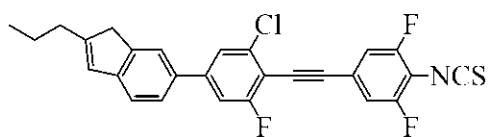
【化 3 1】



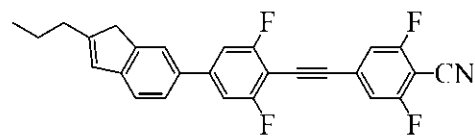
(i-1-7.1)



(i-1-7.3)



(i-1-7.2)



(i-1-7.4)

【0 0 8 1】

一般式 (i-1-8) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-8.1) ~ (i-1-8.5) で表される化合物等が挙げられる。

【0 0 8 2】

10

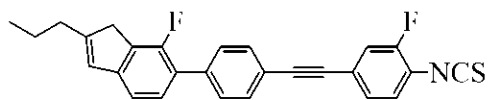
20

30

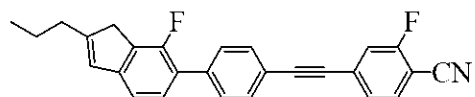
40

50

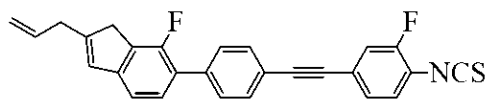
【化 3 2】



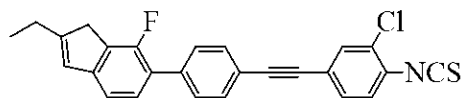
(i-1-8.1)



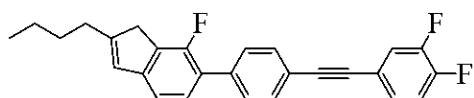
(i-1-8.4)



(i-1-8.2)



(i-1-8.5)



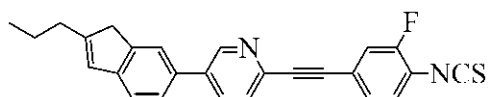
(i-1-8.3)

【0083】

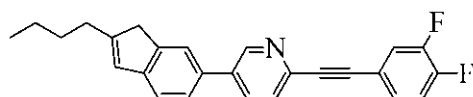
一般式 (i-1-9) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-9.1) ~ (i-1-9.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0084】

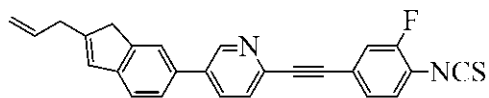
【化 3 3】



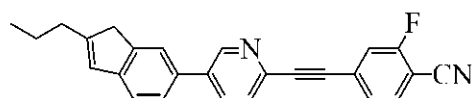
(i-1-9.1)



(i-1-9.3)



(i-1-9.2)



(i-1-9.4)

【0085】

一般式 (i-1-10) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-10.1) ~ (i-1-10.2) で表される化合物等が挙げられる。

【0086】

10

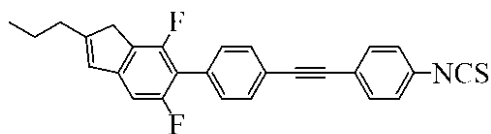
20

30

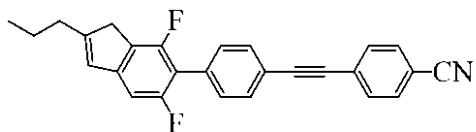
40

50

【化 3 4】



(i-1-10.1)



(i-1-10.2)

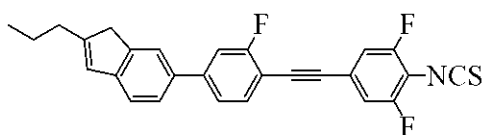
10

【0087】

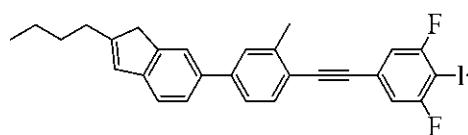
一般式 (i-1-11) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-11.1) ~ (i-1-11.6) で表される化合物等が挙げられる。

【0088】

【化 3 5】

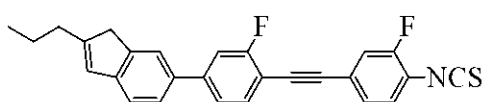


(i-1-11.1)

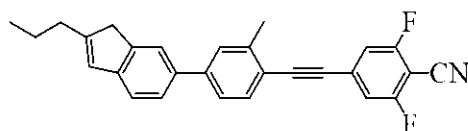


(i-1-11.4)

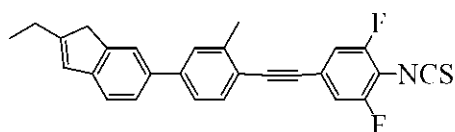
20



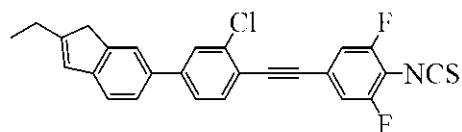
(i-1-11.2)



(i-1-11.5)



(i-1-11.3)



(i-1-11.6)

30

【0089】

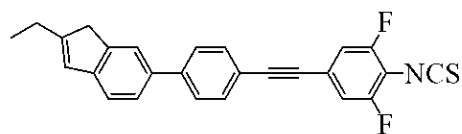
一般式 (i-1-12) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-12.1) ~ (i-1-12.6) で表される化合物等が挙げられる。

【0090】

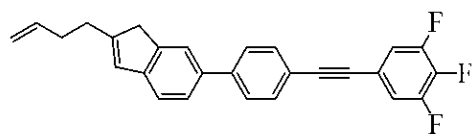
40

50

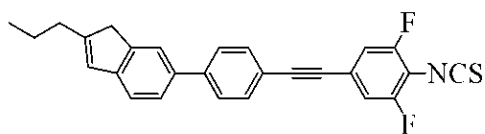
【化 3 6】



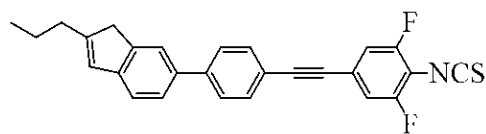
(i-1-12.1)



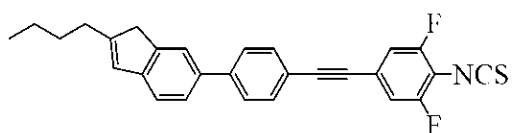
(i-1-12.4)



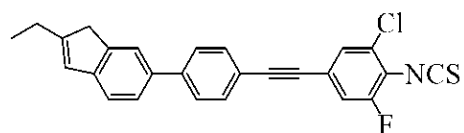
(i-1-12.2)



(i-1-12.5)



(i-1-12.3)



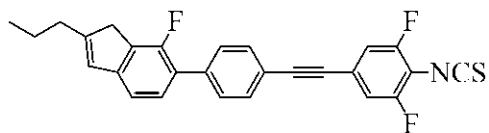
(i-1-12.6)

【0091】

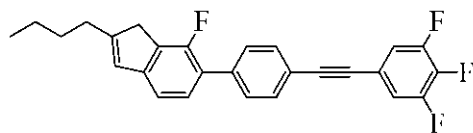
一般式 (i-1-13) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-13.1) ~ (i-1-13.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0092】

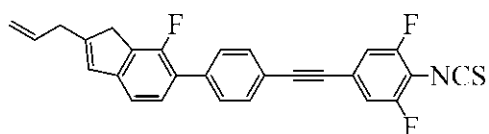
【化 3 7】



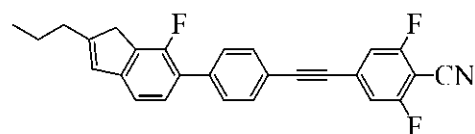
(i-1-13.1)



(i-1-13.3)



(i-1-13.2)



(i-1-13.4)

【0093】

一般式 (i-1-14) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-14.1) ~ (i-1-14.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0094】

10

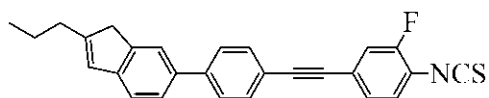
20

30

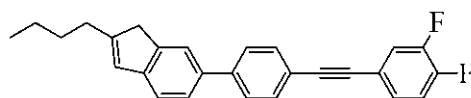
40

50

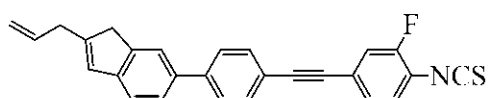
【化 3 8】



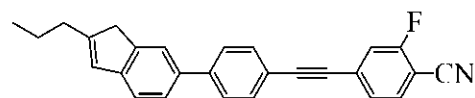
(i-1-14.1)



(i-1-14.3)



(i-1-14.2)



(i-1-14.4)

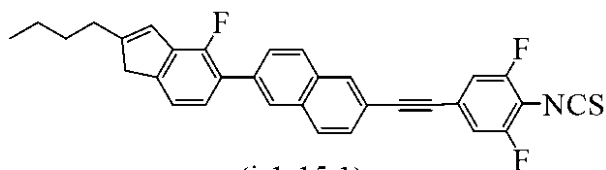
10

【0095】

一般式 (i-1-15) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-15.1) で表される化合物等が挙げられる。

【0096】

【化 3 9】



(i-1-15.1)

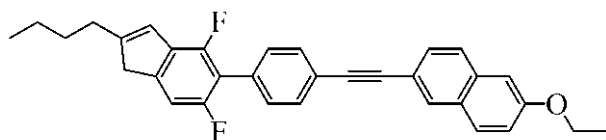
20

【0097】

一般式 (i-1-16) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-16.1) で表される化合物等が挙げられる。

【0098】

【化 4 0】



(i-1-16.1)

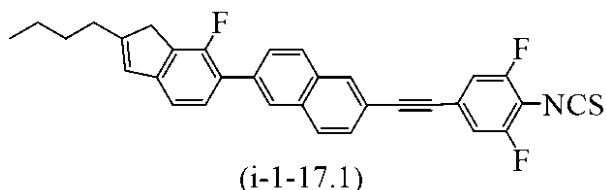
30

【0099】

一般式 (i-1-17) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-17.1) で表される化合物等が挙げられる。

【0100】

【化 4 1】



(i-1-17.1)

40

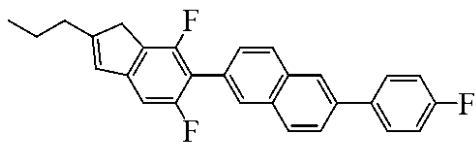
【0101】

一般式 (i-1-18) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-18.1) で表される化合物等が挙げられる。

【0102】

50

【化 4 2】



(i-1-18.1)

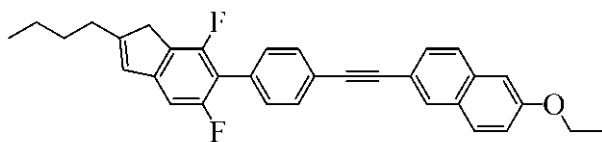
【 0 1 0 3】

一般式 (i-1-19) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-1-19.1) で表される化合物等が挙げられる。

10

【 0 1 0 4】

【化 4 3】



(i-1-19.1)

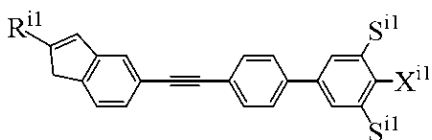
【 0 1 0 5】

一般式 (i-2) で表される化合物としては、下記一般式 (i-2-1) ~ (i-2-7) で表される化合物であることが好ましい。

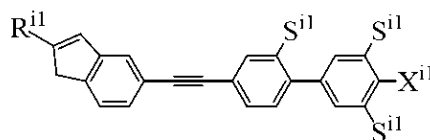
20

【 0 1 0 6】

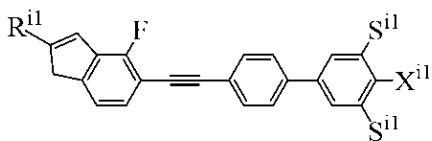
【化 4 4】



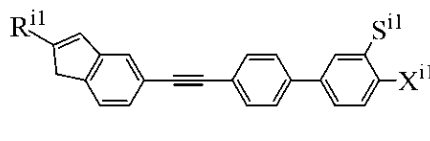
(i-2-1)



(i-2-4)

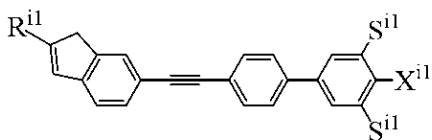


(i-2-2)

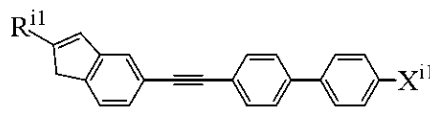


(i-2-5)

30



(i-2-3)

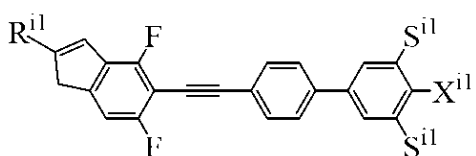


(i-2-6)

40

【 0 1 0 7】

【化 4 5】



(i-2-7)

【 0 1 0 8】

一般式 (i-2-1) ~ (i-2-7) 中、Rⁱ¹、Xⁱ¹ 及び Sⁱ¹ は、上記一般式 (

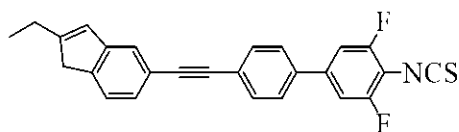
50

i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

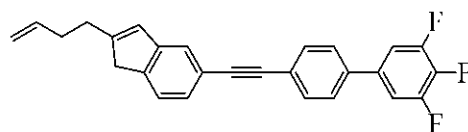
一般式 (i-2-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-2-1.1) ~ (i-2-1.6) で表される化合物等が挙げられる。

【0109】

【化46】

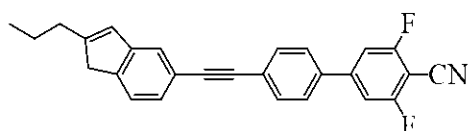


(i-2-1.1)

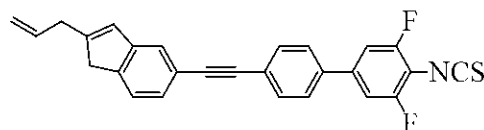


(i-2-1.4)

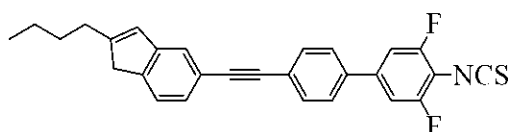
10



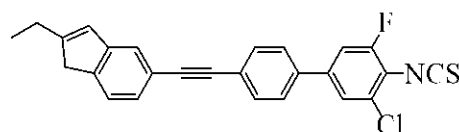
(i-2-1.2)



(i-2-1.5)



(i-2-1.3)



(i-2-1.6)

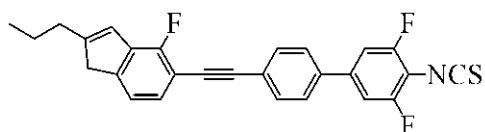
20

【0110】

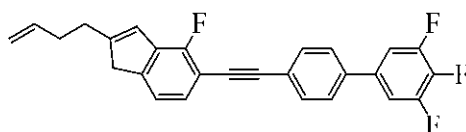
一般式 (i-2-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-2-2.1) ~ (i-2-2.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0111】

【化47】

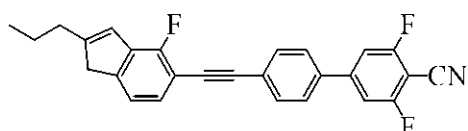


(i-2-2.1)

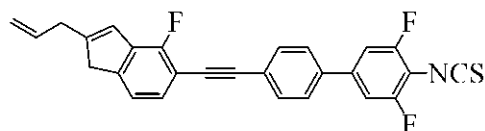


(i-2-2.3)

30



(i-2-2.2)



(i-2-2.4)

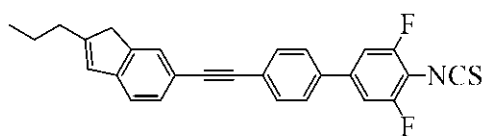
40

【0112】

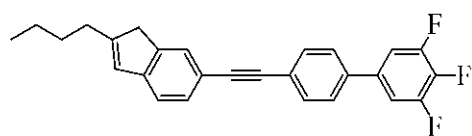
一般式 (i-2-3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-2-3.1) ~ (i-2-3.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0113】

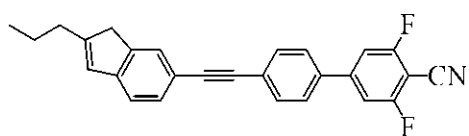
【化 4 8】



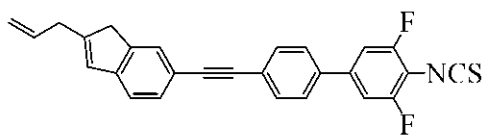
(i-2-3.1)



(i-2-3.3)



(i-2-3.2)



(i-2-3.4)

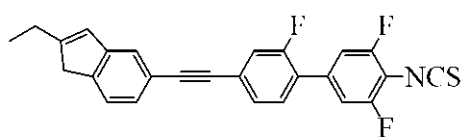
10

【0114】

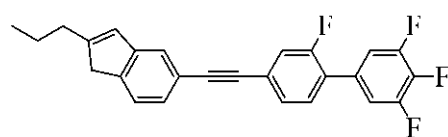
一般式 (i-2-4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-2-4.1) ~ (i-2-4.6) で表される化合物等が挙げられる。

【0115】

【化 4 9】

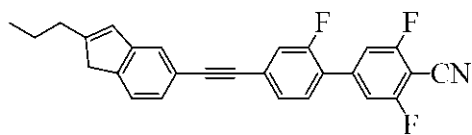


(i-2-4.1)

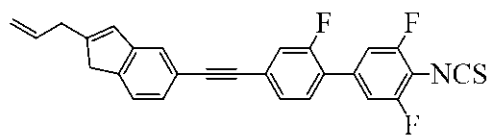


(i-2-4.4)

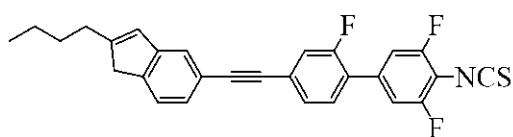
20



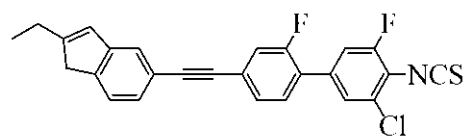
(i-2-4.2)



(i-2-4.5)



(i-2-4.3)



(i-2-4.6)

30

【0116】

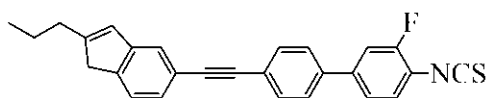
一般式 (i-2-5) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-2-5.1) ~ (i-2-5.5) で表される化合物等が挙げられる。

【0117】

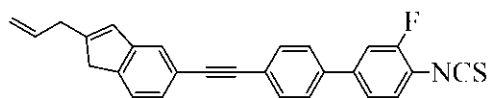
40

50

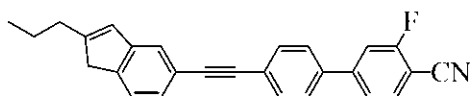
【化 5 0】



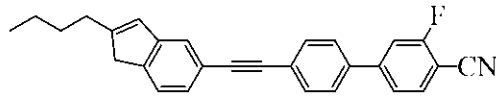
(i-2-5.1)



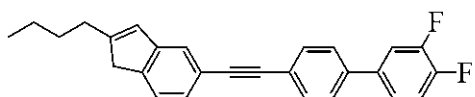
(i-2-5.4)



(i-2-5.2)



(i-2-5.5)



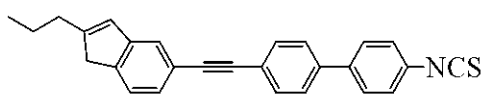
(i-2-5.3)

【 0 1 1 8】

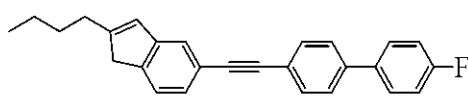
一般式 (i-2-6) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-2-6.1) ~ (i-2-6.4) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 1 9】

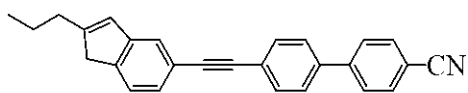
【化 5 1】



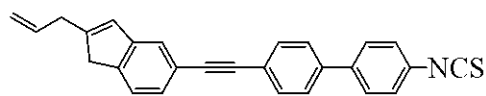
(i-2-6.1)



(i-2-6.3)



(i-2-6.2)



(i-2-6.4)

【 0 1 2 0】

一般式 (i-2-7) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-2-7.1) ~ (i-2-7.4) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 2 1】

10

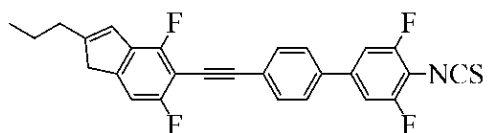
20

30

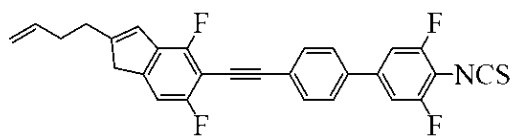
40

50

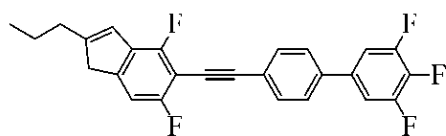
【化 5 2】



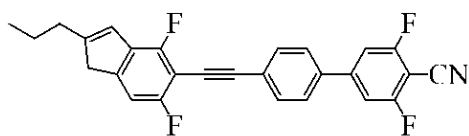
(i-2-7.1)



(i-2-7.3)



(i-2-7.2)



(i-2-7.4)

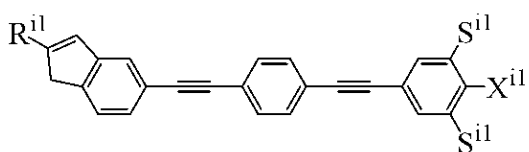
10

【 0 1 2 2】

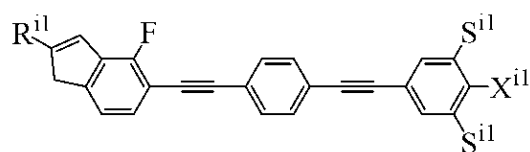
一般式 (i - 3) で表される化合物としては、下記一般式 (i - 3 - 1) ~ (i - 3 - 1 0) で表される化合物であることが好ましい。

【 0 1 2 3】

【化 5 3】

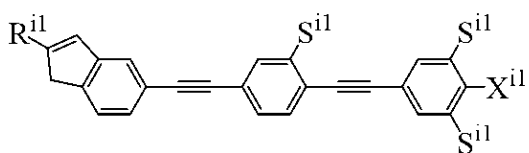


(i-3-1)

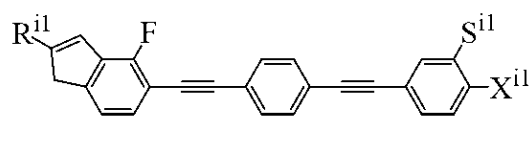


(i-3-4)

20

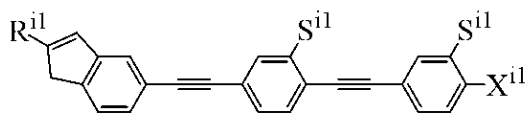


(i-3-2)

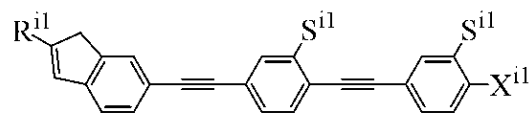


(i-3-5)

30



(i-3-3)



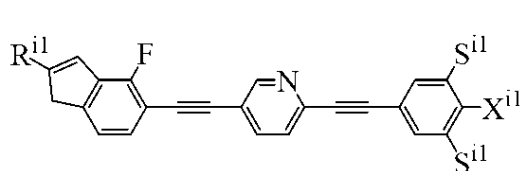
(i-3-6)

【 0 1 2 4】

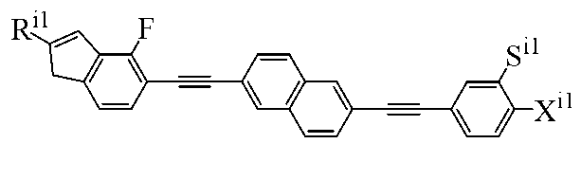
40

50

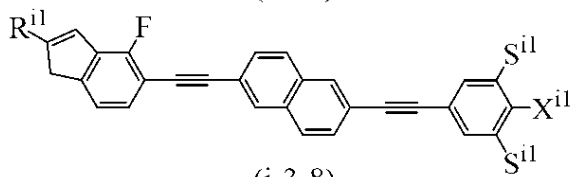
【化 5 4】



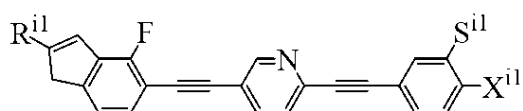
(i-3-7)



(i-3-10)



(i-3-8)



(i-3-9)

【 0 1 2 5 】

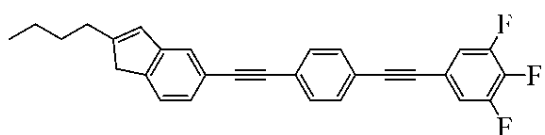
一般式 (i-3-1) ~ (i-3-10) 中、 R^{i1} 、 X^{i1} 及び Si^{i1} は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び Si^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

【 0 1 2 6 】

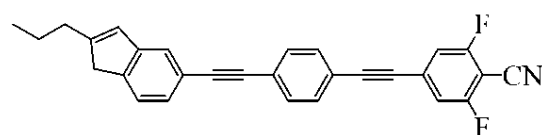
一般式 (i-3-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-3-1.1) ~ (i-3-1.6) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 2 7 】

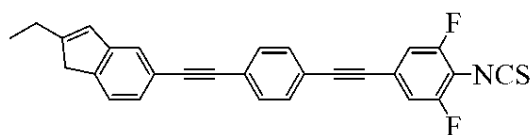
【化 5 5】



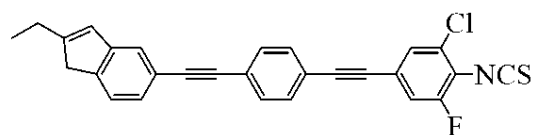
(i-3-1.1)



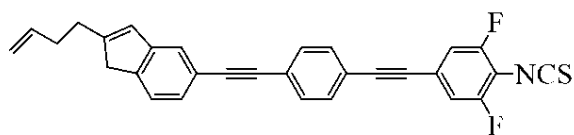
(i-3-1.4)



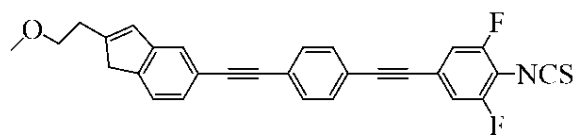
(i-3-1.2)



(i-3-1.5)



(i-3-1.3)



(i-3-1.6)

【 0 1 2 8 】

一般式 (i-3-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-3-2.1) ~ (i-3-2.6) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 2 9 】

10

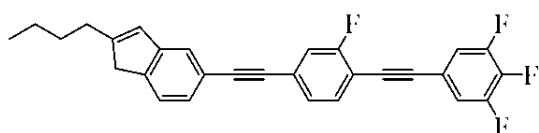
20

30

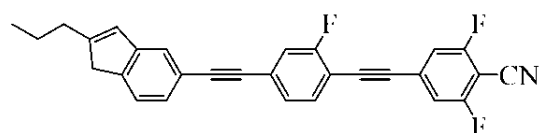
40

50

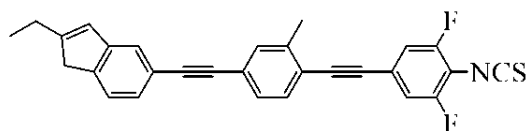
【化 5 6】



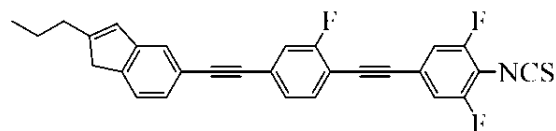
(i-3-2.1)



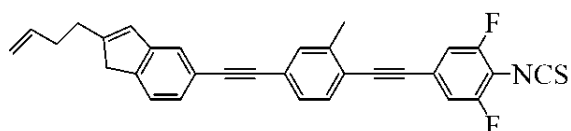
(i-3-2.4)



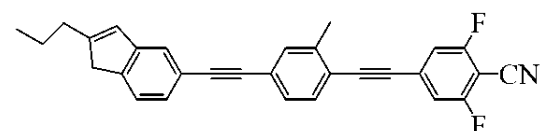
(i-3-2.2)



(i-3-2.5)



(i-3-2.3)



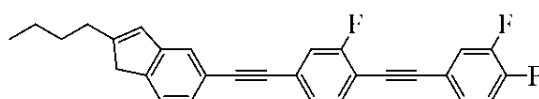
(i-3-2.6)

【 0 1 3 0】

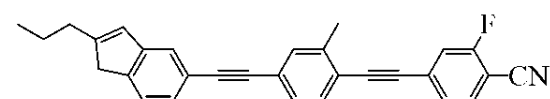
一般式 (i - 3 - 3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 3 - 3 . 1) ~ (i - 3 - 3 . 6) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 3 1】

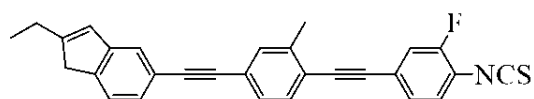
【化 5 7】



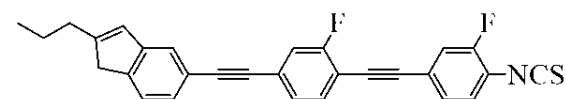
(i-3-3.1)



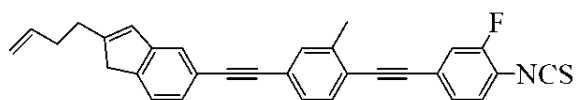
(i-3-3.4)



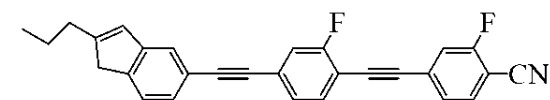
(i-3-3.2)



(i-3-3.5)



(i-3-3.3)



(i-3-3.6)

【 0 1 3 2】

一般式 (i - 3 - 4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 3 - 4 . 1) ~ (i - 3 - 4 . 4) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 3 3】

10

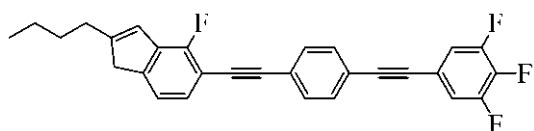
20

30

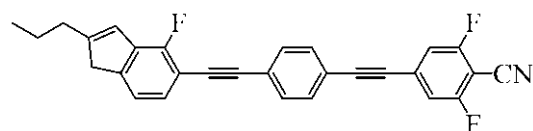
40

50

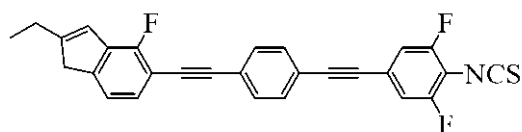
【化 5 8】



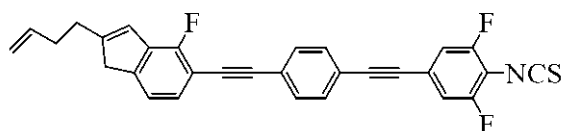
(i-3-4.1)



(i-3-4.4)



(i-3-4.2)



(i-3-4.3)

10

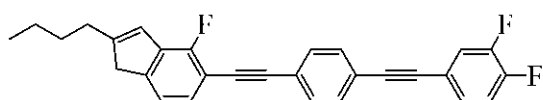
【 0 1 3 4】

一般式 (i - 3 - 5) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 3 - 5 . 1) ~ (i - 3 - 5 . 4) で表される化合物等が挙げられる。

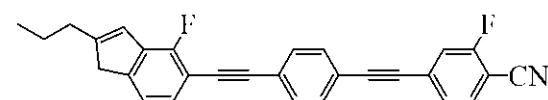
20

【 0 1 3 5】

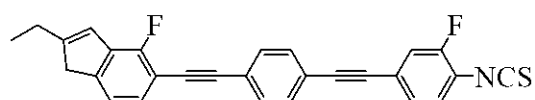
【化 5 9】



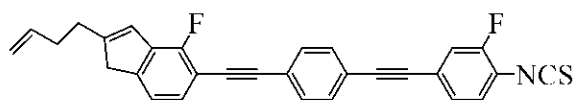
(i-3-5.1)



(i-3-5.4)



(i-3-5.2)



(i-3-5.3)

30

【 0 1 3 6】

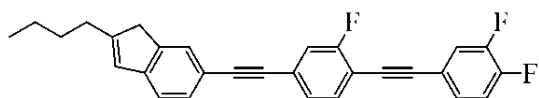
一般式 (i - 3 - 6) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 3 - 6 . 1) ~ (i - 3 - 6 . 6) で表される化合物等が挙げられる。

40

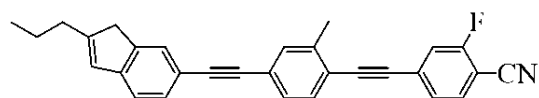
【 0 1 3 7】

50

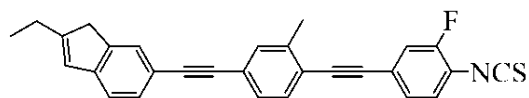
【化 6 0】



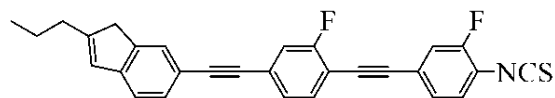
(i-3-6.1)



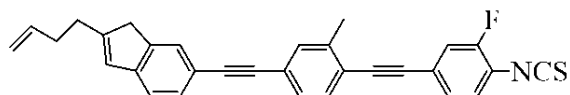
(i-3-6.4)



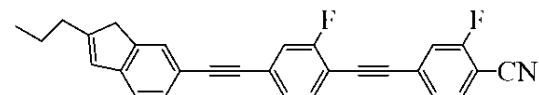
(i-3-6.2)



(i-3-6.5)



(i-3-6.3)



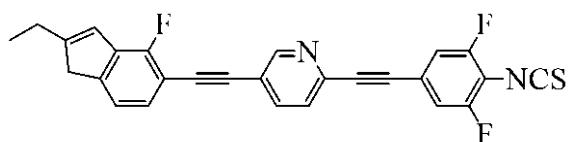
(i-3-6.6)

【 0 1 3 8】

一般式 (i-3-7) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-3-7.1) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 3 9】

【化 6 1】



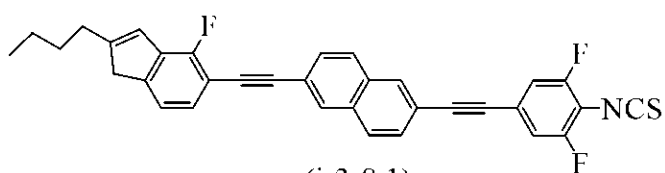
(i-3-7.1)

【 0 1 4 0】

一般式 (i-3-8) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-3-8.1) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 4 1】

【化 6 2】



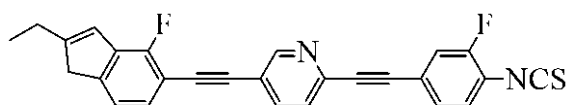
(i-3-8.1)

【 0 1 4 2】

一般式 (i-3-9) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-3-9.1) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 4 3】

【化 6 3】



(i-3-9.1)

10

20

30

40

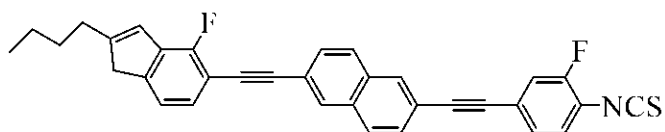
50

【0144】

一般式 (i-3-10) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-3-10.1) で表される化合物等が挙げられる。

【0145】

【化64】



(i-3-10.1)

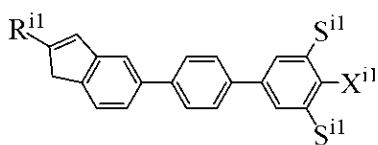
10

【0146】

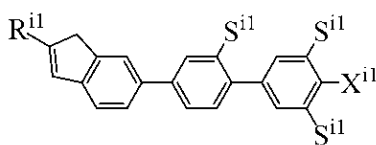
一般式 (i-4) で表される化合物としては、下記一般式 (i-4-1) ~ (i-4-6) で表される化合物であることが好ましい。

【0147】

【化65】

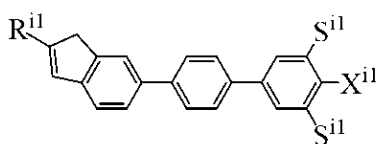


(i-4-1)

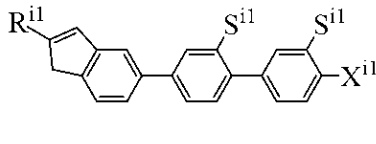


(i-4-4)

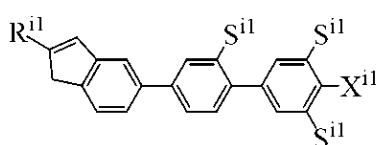
20



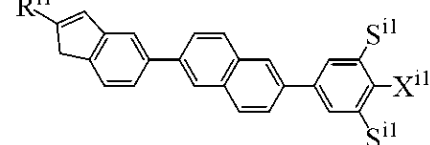
(i-4-2)



(i-4-5)



(i-4-3)



(i-4-6)

30

【0148】

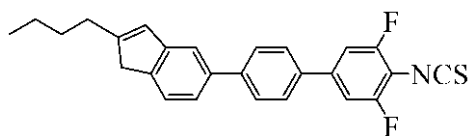
一般式 (i-4-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-4-1.1) ~ (i-4-1.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0149】

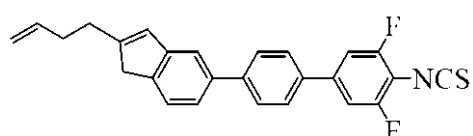
40

50

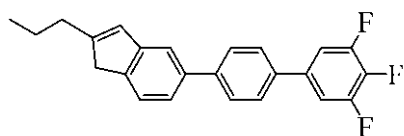
【化 6 6】



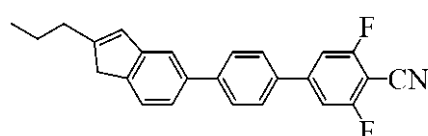
(i-4-1.1)



(i-4-1.3)



(i-4-1.2)



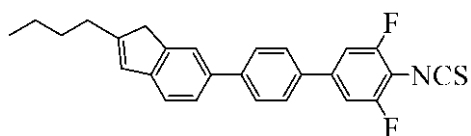
(i-4-1.4)

【 0 1 5 0】

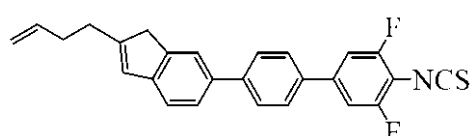
一般式 (i-4-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-4-2.1) ~ (i-4-2.4) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 5 1】

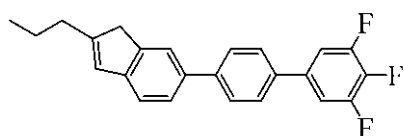
【化 6 7】



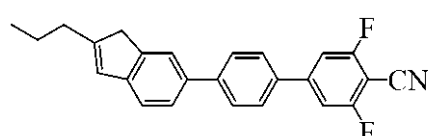
(i-4-2.1)



(i-4-2.3)



(i-4-2.2)



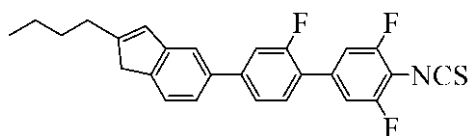
(i-4-2.4)

【 0 1 5 2】

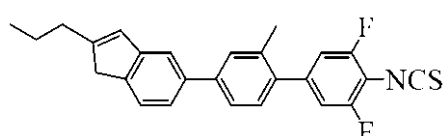
一般式 (i-4-3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-4-3.1) ~ (i-4-3.4) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 5 3】

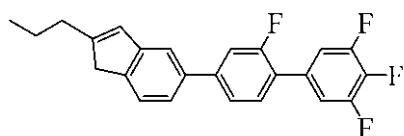
【化 6 8】



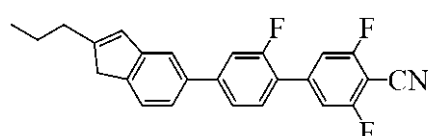
(i-4-3.1)



(i-4-3.3)



(i-4-3.2)



(i-4-3.4)

【 0 1 5 4】

一般式 (i-4-4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-4-4.1) ~ (i-4-4.4) で表される化合物等が挙げられる。

10

20

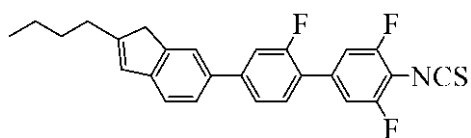
30

40

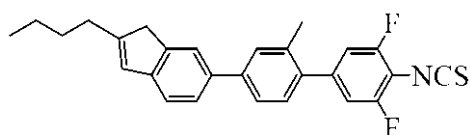
50

【0155】

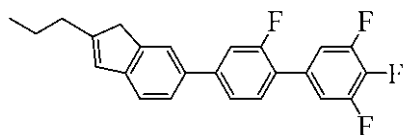
【化69】



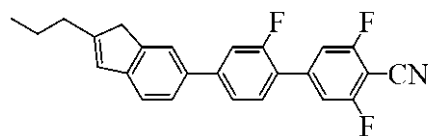
(i-4-4.1)



(i-4-4.3)



(i-4-4.2)



(i-4-4.4)

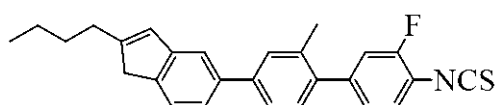
10

【0156】

一般式（i-4-5）で表される化合物の具体例としては、下記構造式（i-4-5.1）で表される化合物等が挙げられる。

【0157】

【化70】



(i-4-5.1)

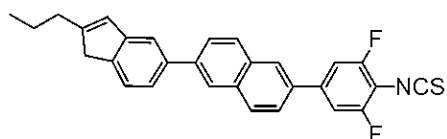
20

【0158】

一般式（i-4-6）で表される化合物の具体例としては、下記構造式（i-4-6.1）で表される化合物等が挙げられる。

【0159】

【化71】



(i-4-6.1)

30

【0160】

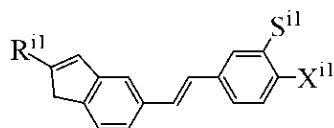
一般式（i-5）で表される化合物としては、下記一般式（i-5-1）～（i-5-4）で表される化合物であることが好ましい。

【0161】

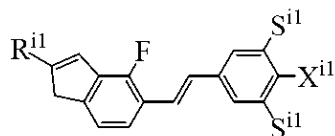
40

50

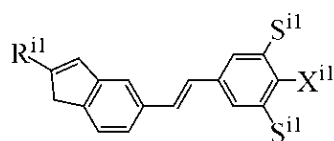
【化 7 2】



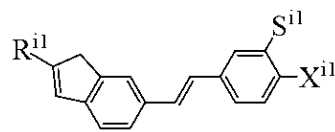
(i-5-1)



(i-5-3)



(i-5-2)



(i-5-4)

10

【0162】

一般式 (i-5-1) ~ (i-5-4) 中、R^{il}、X^{il} 及び S^{il} は、上記一般式 (i) 中の R^{il}、X^{il} 及び S^{il} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

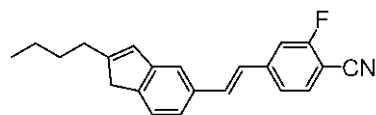
【0163】

一般式 (i-5-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-5-1.1) ~ (i-5-1.4) で表される化合物等が挙げられる。

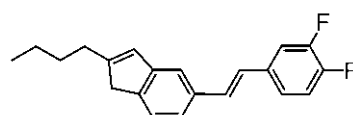
20

【0164】

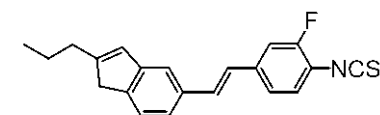
【化 7 3】



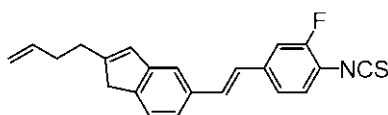
(i-5-1.1)



(i-5-1.3)



(i-5-1.2)



(i-5-1.4)

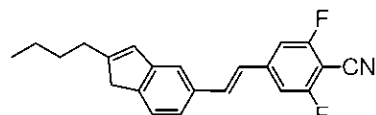
30

【0165】

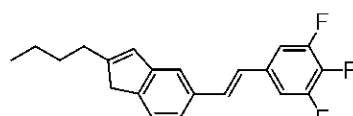
一般式 (i-5-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-5-2.1) ~ (i-5-2.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0166】

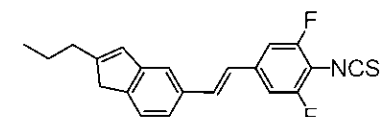
【化 7 4】



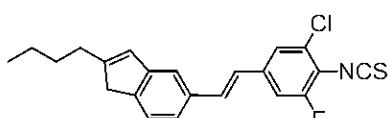
(i-5-2.1)



(i-5-2.3)



(i-5-2.2)



(i-5-2.4)

40

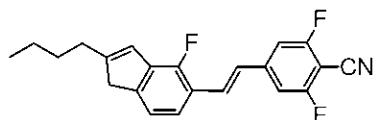
【0167】

50

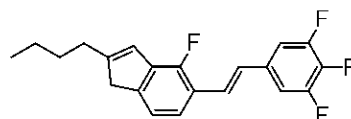
一般式 (i-5-3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-5-3.1) ~ (i-5-3.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0168】

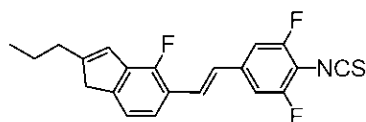
【化75】



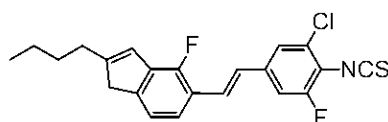
(i-5-3.1)



(i-5-3.3)



(i-5-3.2)



(i-5-3.4)

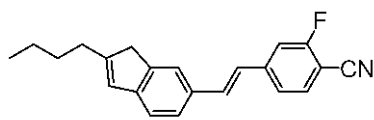
10

【0169】

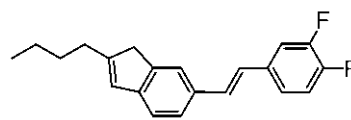
一般式 (i-5-4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-5-4.1) ~ (i-5-4.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0170】

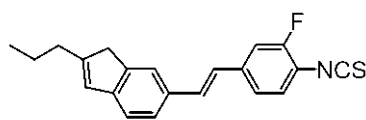
【化76】



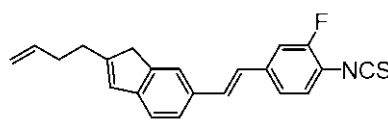
(i-5-4.1)



(i-5-4.3)



(i-5-4.2)



(i-5-4.4)

20

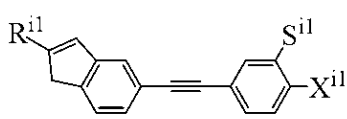
30

【0171】

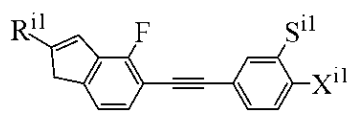
一般式 (i-6) で表される化合物としては、下記一般式 (i-6-1) ~ (i-6-4) で表される化合物であることが好ましい。

【0172】

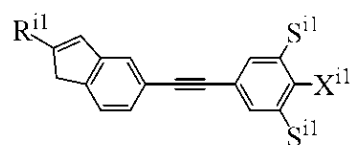
【化77】



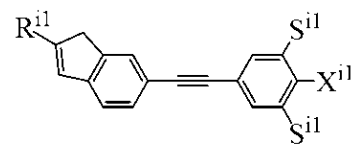
(i-6-1)



(i-6-3)



(i-6-2)



(i-6-4)

40

【0173】

一般式 (i-6-1) ~ (i-6-4) 中、Rⁱ¹、Xⁱ¹ 及び Sⁱ¹ は、上記一般式 (

50

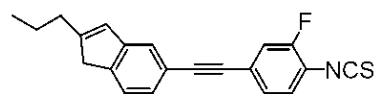
i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

【0174】

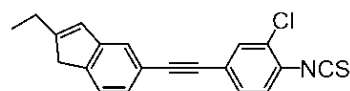
一般式 (i-6-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-6-1.1) ~ (i-6-1.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0175】

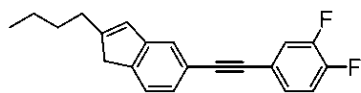
【化78】



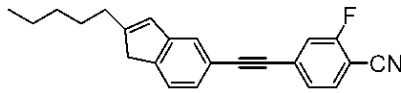
(i-6-1.1)



(i-6-1.3)



(i-6-1.2)



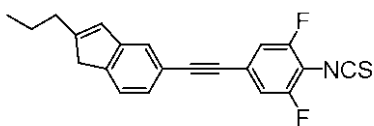
(i-6-1.4)

【0176】

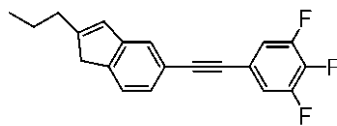
一般式 (i-6-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-6-2.1) ~ (i-6-2.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0177】

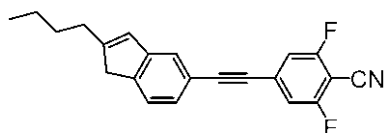
【化79】



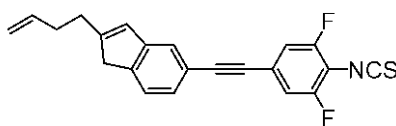
(i-6-2.1)



(i-6-2.3)



(i-6-2.2)



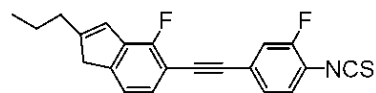
(i-6-2.4)

【0178】

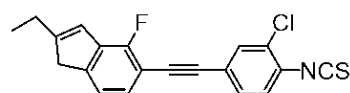
一般式 (i-6-3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-6-3.1) ~ (i-6-3.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0179】

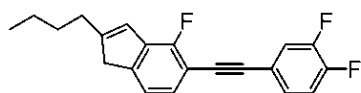
【化80】



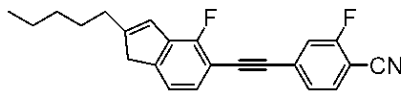
(i-6-3.1)



(i-6-3.3)



(i-6-3.2)



(i-6-3.4)

【0180】

一般式 (i-6-4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-6-4.1) ~ (i-6-4.4) で表される化合物等が挙げられる。

10

20

30

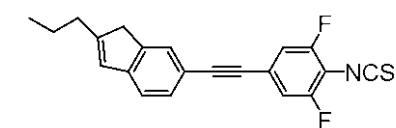
40

50

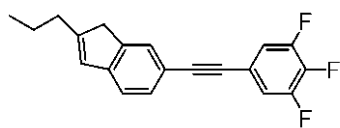
1) ~ (i-6-4.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0181】

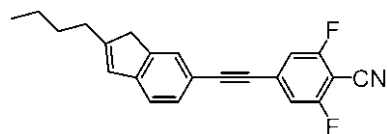
【化81】



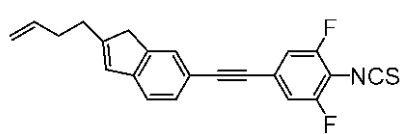
(i-6-4.1)



(i-6-4.3)



(i-6-4.2)



(i-6-4.4)

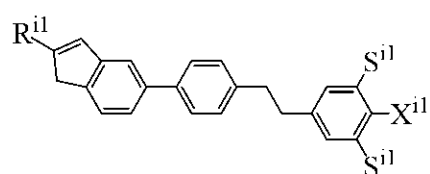
10

【0182】

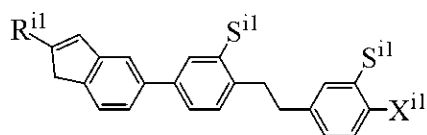
一般式 (i-7) で表される化合物としては、下記一般式 (i-7-1) ~ (i-7-4) で表される化合物であることが好ましい。

【0183】

【化82】

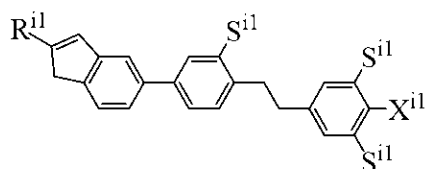


(i-7-1)

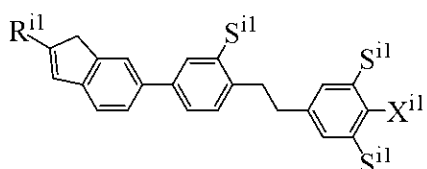


(i-7-3)

20



(i-7-2)



(i-7-4)

30

【0184】

一般式 (i-7-1) ~ (i-7-4) 中、 R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

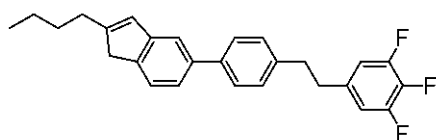
【0185】

一般式 (i-7-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-7-1.1) ~ (i-7-1.4) で表される化合物等が挙げられる。

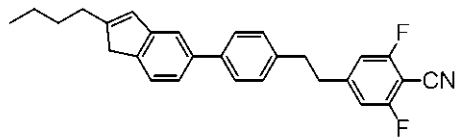
【0186】

40

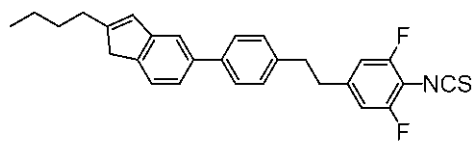
【化 8 3】



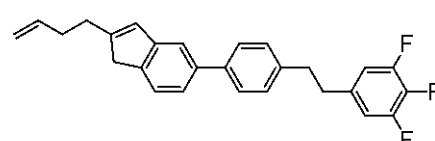
(i-7-1.1)



(i-7-1.3)



(i-7-1.2)



(i-7-1.4)

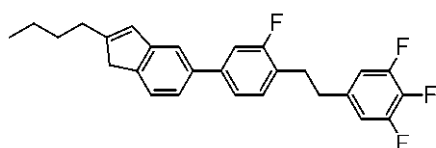
10

【0187】

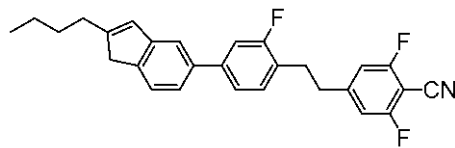
一般式 (i-7-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-7-2.1) ~ (i-7-2.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0188】

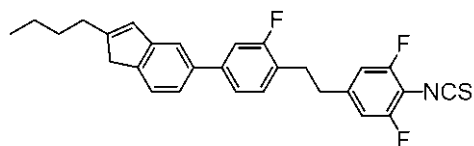
【化 8 4】



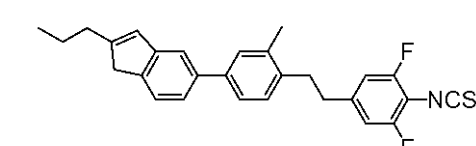
(i-7-2.1)



(i-7-2.3)



(i-7-2.2)



(i-7-2.4)

20

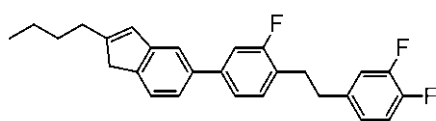
30

【0189】

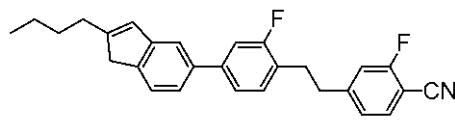
一般式 (i-7-3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-7-3.1) ~ (i-7-3.4) で表される化合物等が挙げられる。

【0190】

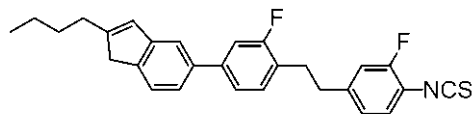
【化 8 5】



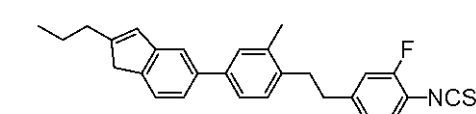
(i-7-3.1)



(i-7-3.3)



(i-7-3.2)



(i-7-3.4)

40

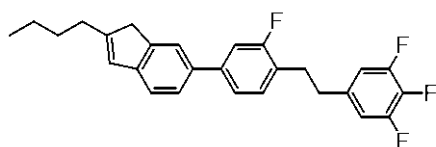
【0191】

一般式 (i-7-4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-7-4.1) ~ (i-7-4.4) で表される化合物等が挙げられる。

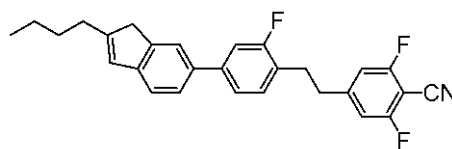
50

【 0 1 9 2 】

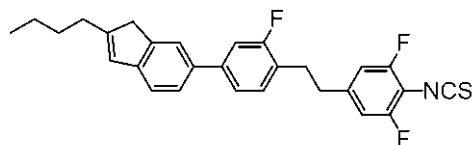
【化 8 6】



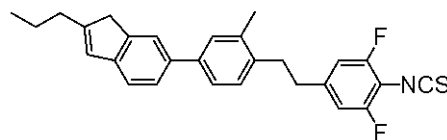
(i-7-4.1)



(i-7-4.3)



(i-7-4.2)



(i-7-4.4)

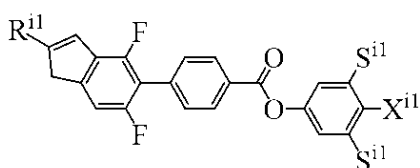
10

【 0 1 9 3 】

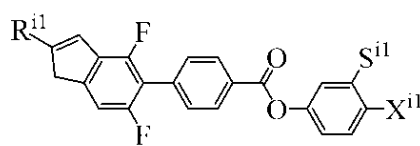
一般式 (i - 8) で表される化合物としては、下記一般式 (i - 8 - 1) ~ (i - 8 - 2) で表される化合物であることが好ましい。

【 0 1 9 4 】

【化 8 7】



(i-8-1)



(i-8-2)

20

【 0 1 9 5 】

一般式 (i - 8 - 1) ~ (i - 8 - 2) 中、Rⁱ¹、Xⁱ¹及びSⁱ¹は、上記一般式 (i) 中のRⁱ¹、Xⁱ¹及びSⁱ¹とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

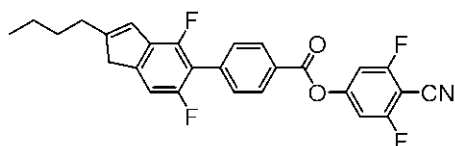
30

【 0 1 9 6 】

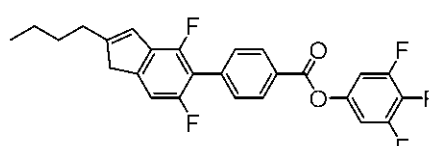
一般式 (i - 8 - 1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 8 - 1 . 1) ~ (i - 8 - 1 . 2) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 1 9 7 】

【化 8 8】



(i-8-1.1)



(i-8-1.2)

40

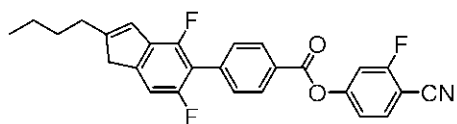
【 0 1 9 8 】

一般式 (i - 8 - 2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 8 - 2 . 1) ~ (i - 8 - 2 . 2) で表される化合物等が挙げられる。

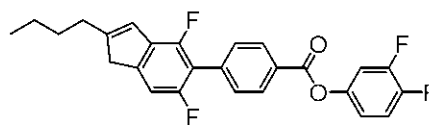
【 0 1 9 9 】

50

【化 8 9】



(i-8-2.1)



(i-8-2.2)

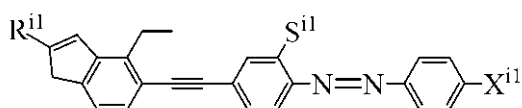
【 0 2 0 0】

一般式 (i-9) で表される化合物としては、下記一般式 (i-9-1) ~ (i-9-4) で表される化合物であることが好ましい。

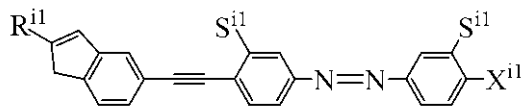
10

【 0 2 0 1】

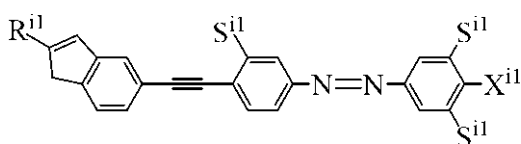
【化 9 0】



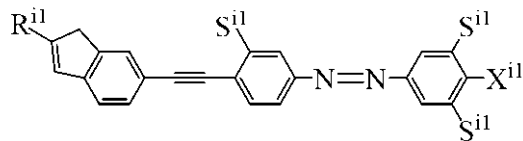
(i-9-1)



(i-9-3)



(i-9-2)



(i-9-4)

20

【 0 2 0 2】

一般式 (i-9-1) ~ (i-9-4) 中、 R^{i1} 、 X^{i1} 及び $Si1$ は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び $Si1$ とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

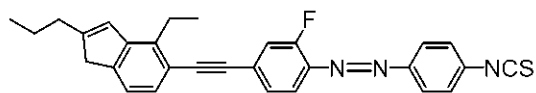
【 0 2 0 3】

一般式 (i-9-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-9-1.1) ~ (i-9-1.4) で表される化合物等が挙げられる。

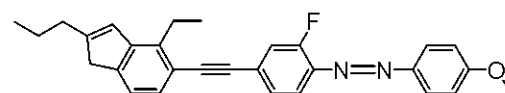
30

【 0 2 0 4】

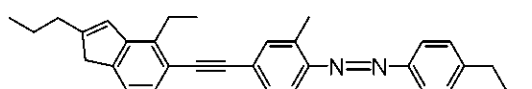
【化 9 1】



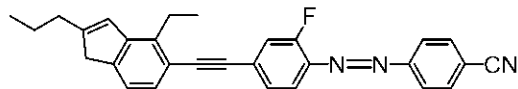
(i-9-1.1)



(i-9-1.3)



(i-9-1.2)



(i-9-1.4)

40

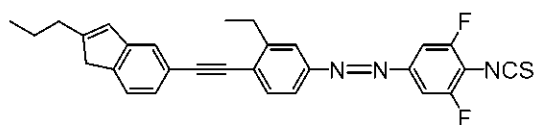
【 0 2 0 5】

一般式 (i-9-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-9-2.1) ~ (i-9-2.4) で表される化合物等が挙げられる。

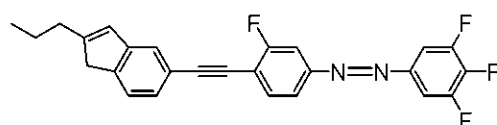
【 0 2 0 6】

50

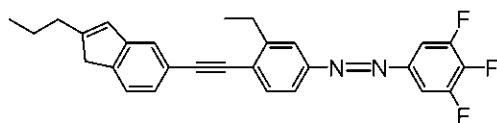
【化 9 2】



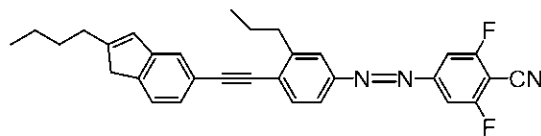
(i-9-2.1)



(i-9-2.3)



(i-9-2.2)



(i-9-2.4)

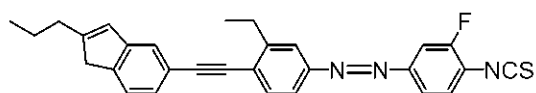
10

【 0 2 0 7】

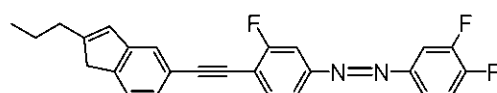
一般式 (i - 9 - 3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 9 - 3 . 1) ~ (i - 9 - 3 . 4) で表される化合物等が挙げられる。

【 0 2 0 8】

【化 9 3】

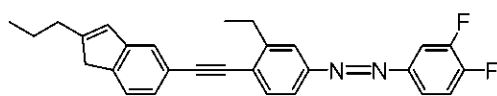


(i-9-3.1)

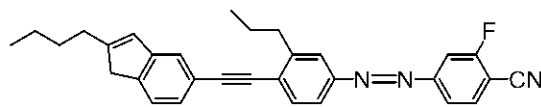


(i-9-3.3)

20



(i-9-3.2)



(i-9-3.4)

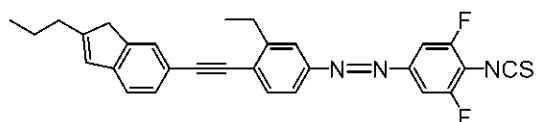
【 0 2 0 9】

一般式 (i - 9 - 4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i - 9 - 4 . 1) ~ (i - 9 - 4 . 4) で表される化合物等が挙げられる。

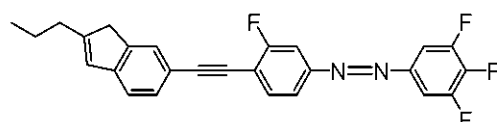
30

【 0 2 1 0】

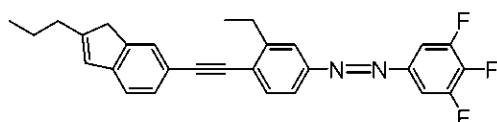
【化 9 4】



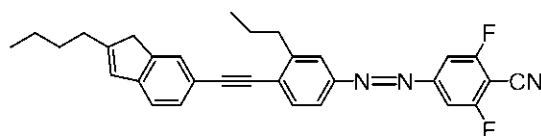
(i-9-4.1)



(i-9-4.3)



(i-9-4.2)



(i-9-4.4)

40

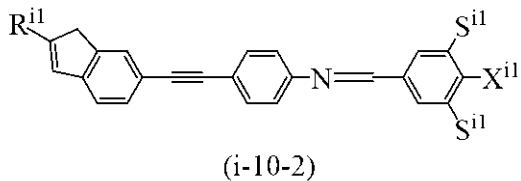
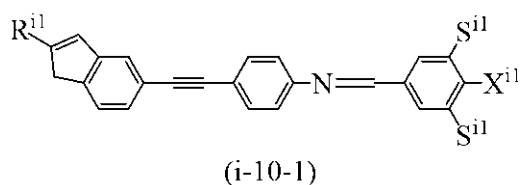
【 0 2 1 1】

一般式 (i - 1 0) で表される化合物としては、下記一般式 (i - 1 0 - 1) ~ (i - 1 0 - 2) で表される化合物であることが好ましい。

【 0 2 1 2】

50

【化 9 5】



【0 2 1 3】

一般式 (i-10-1) ~ (i-10-2) 中、 R^{i1} 、 X^{i1} 及び Si^{i1} は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び Si^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

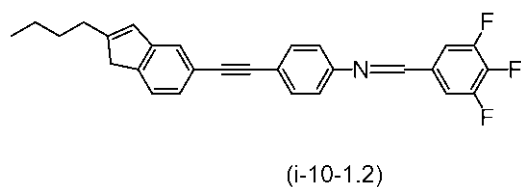
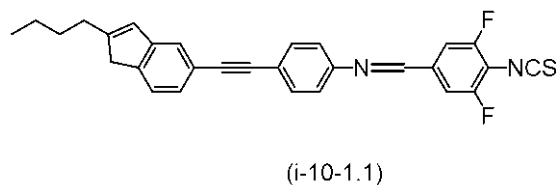
10

【0 2 1 4】

一般式 (i-10-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-10-1.1) ~ (i-10-1.2) で表される化合物等が挙げられる。

【0 2 1 5】

【化 9 6】



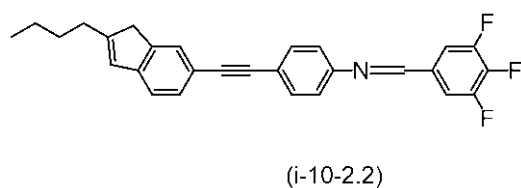
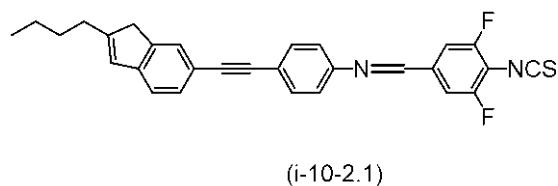
20

【0 2 1 6】

一般式 (i-10-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-10-2.1) ~ (i-10-2.2) で表される化合物等が挙げられる。

【0 2 1 7】

【化 9 7】



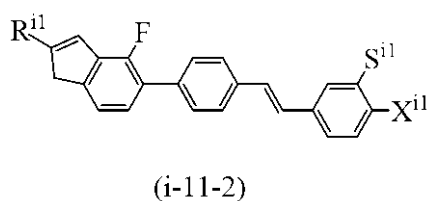
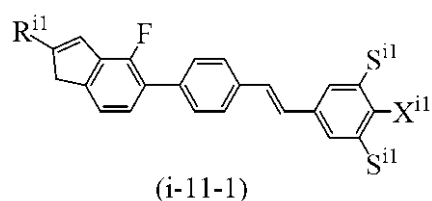
30

【0 2 1 8】

一般式 (i-11) で表される化合物としては、下記一般式 (i-11-1) ~ (i-11-2) で表される化合物であることが好ましい。

【0 2 1 9】

【化 9 8】



40

50

【0220】

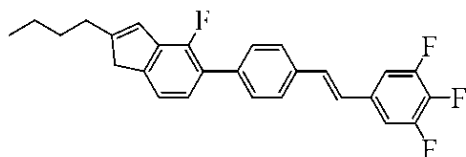
一般式 (i-11-1) ~ (i-11-2) 中、 R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} は、上記一般式 (i) 中の R^{i1} 、 X^{i1} 及び S^{i1} とそれぞれ同じ意味を表し、好ましい基も同じものを表す。

【0221】

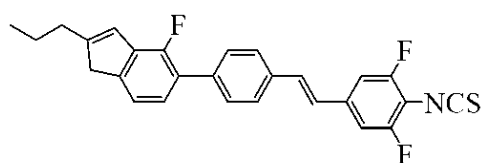
一般式 (i-11-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-11-1.1) ~ (i-11-1.2) で表される化合物等が挙げられる。

【0222】

【化99】



(i-11-1.1)



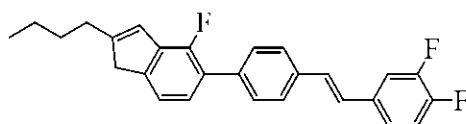
(i-11-1.2)

【0223】

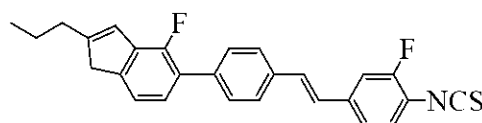
一般式 (i-11-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (i-11-2.1) ~ (i-11-2.2) で表される化合物等が挙げられる。

【0224】

【化100】



(i-11-2.1)



(i-11-2.2)

【0225】

一般式 (i)、一般式 (i-1) ~ (i-11)、一般式 (i-1-1) ~ (i-1-19)、一般式 (i-2-1) ~ (i-2-7)、一般式 (i-3-1) ~ (i-3-10)、一般式 (i-4-1) ~ (i-4-6)、一般式 (i-5-1) ~ (i-5-4)、一般式 (i-6-1) ~ (i-6-4)、一般式 (i-7-1) ~ (i-7-4)、一般式 (i-8-1) ~ (i-8-2)、一般式 (i-9-1) ~ (i-9-4)、一般式 (i-10-1) ~ (i-10-2)、一般式 (i-11-1) ~ (i-11-2)、構造式 (i-1-1.1) ~ (i-1-1.10)、構造式 (i-1-2.1) ~ (i-1-2.5)、構造式 (i-1-3.1) ~ (i-1-3.6)、構造式 (i-1-4.1) ~ (i-1-4.6)、構造式 (i-1-5.1) ~ (i-1-5.5)、構造式 (i-1-6.1) ~ (i-1-6.6)、構造式 (i-1-7.1) ~ (i-1-7.4)、構造式 (i-1-8.1) ~ (i-1-8.5)、構造式 (i-1-9.1) ~ (i-1-9.4)、構造式 (i-1-10.1) ~ (i-1-10.2)、構造式 (i-1-11.1) ~ (i-1-11.6)、構造式 (i-1-12.1) ~ (i-1-12.6)

)、構造式 (i-1-13.1) ~ (i-1-13.4)、構造式 (i-1-14.1) ~ (i-1-14.4)、構造式 (i-1-15.1)、構造式 (i-1-16.1)、構造式 (i-1-17.1)、構造式 (i-1-18.1)、構造式 (i-1-19.1)、構造式 (i-2-1.1) ~ (i-2-1.6)、構造式 (i-2-2.1) ~ (i-2-2.4)、構造式 (i-2-3.1) ~ (i-2-3.4)、構造式 (i-2-4.1) ~ (i-2-4.6)、構造式 (i-2-5.1) ~ (i-2-5.5)、構造式 (i-2-6.1) ~ (i-2-6.4)、構造式 (i-2-7.1) ~ (i-2-7.4)、構造式 (i-3-1.1) ~ (i-3-1.6)、構造式 (i-3-2.1) ~ (i-3-2.6)、構造式 (i-3-3.1) ~ (i-3-3.6)、構造式 (i-3-4.1) ~ (i-3-4.4)、構造式 (i-3-5.1) ~ (i-3-5.4)、構造式 (i-3-6.1) ~ (i-3-6.6)、構造式 (i-3-7.1)、構造式 (i-3-8.1)、構造式 (i-3-9.1)、構造式 (i-3-10.1)、構造式 (i-4-1.1) ~ (i-4-1.4)、構造式 (i-4-2.1) ~ (i-4-2.4)、構造式 (i-4-3.1) ~ (i-4-3.4)、構造式 (i-4-4.1) ~ (i-4-4.4)、構造式 (i-4-5.1)、構造式 (i-4-6.1)、構造式 (i-5-1.1) ~ (i-5-1.4)、構造式 (i-5-2.1) ~ (i-5-2.4)、構造式 (i-5-3.1) ~ (i-5-3.4)、構造式 (i-5-4.1) ~ (i-5-4.4)、構造式 (i-6-1.1) ~ (i-6-1.4)、構造式 (i-6-2.1) ~ (i-6-2.4)、構造式 (i-6-3.1) ~ (i-6-3.4)、構造式 (i-6-4.1) ~ (i-6-4.4)、構造式 (i-7-1.1) ~ (i-7-1.4)、構造式 (i-7-2.1) ~ (i-7-2.4)、構造式 (i-7-3.1) ~ (i-7-3.4)、構造式 (i-7-4.1) ~ (i-7-4.4)、構造式 (i-8-1.1) ~ (i-8-1.2)、構造式 (i-8-2.1) ~ (i-8-2.2)、構造式 (i-9-1.1) ~ (i-9-1.4)、構造式 (i-9-2.1) ~ (i-9-2.4)、構造式 (i-9-3.1) ~ (i-9-3.4)、構造式 (i-9-4.1) ~ (i-9-4.4)、構造式 (i-10-1.1) ~ (i-10-1.2)、構造式 (i-10-2.1) ~ (i-10-2.2)、構造式 (i-11-1.1) ~ (i-11-1.2) 又は構造式 (i-11-2.1) ~ (i-11-2.2) で表される化合物の液晶組成物に用いる種類は、1種又は2種以上、好ましくは1~10種、好ましくは1~5種、好ましくは1~3種である。

【0226】

一般式 (i)、一般式 (i-1) ~ (i-11)、一般式 (i-1-1) ~ (i-1-19)、一般式 (i-2-1) ~ (i-2-7)、一般式 (i-3-1) ~ (i-3-10)、一般式 (i-4-1) ~ (i-4-6)、一般式 (i-5-1) ~ (i-5-4)、一般式 (i-6-1) ~ (i-6-4)、一般式 (i-7-1) ~ (i-7-4)、一般式 (i-8-1) ~ (i-8-2)、一般式 (i-9-1) ~ (i-9-4)、一般式 (i-10-1) ~ (i-10-2)、一般式 (i-11-1) ~ (i-11-2)、構造式 (i-1-1.1) ~ (i-1-1.10)、構造式 (i-1-2.1) ~ (i-1-2.5)、構造式 (i-1-3.1) ~ (i-1-3.6)、構造式 (i-1-4.1) ~ (i-1-4.6)、構造式 (i-1-5.1) ~ (i-1-5.5)、構造式 (i-1-6.1) ~ (i-1-6.6)、構造式 (i-1-7.1) ~ (i-1-7.4)、構造式 (i-1-8.1) ~ (i-1-8.5)、構造式 (i-1-9.1) ~ (i-1-9.4)、構造式 (i-1-10.1) ~ (i-1-10.2)、構造式 (i-1-11.1) ~ (i-1-11.6)、構造式 (i-1-12.1) ~ (i-1-12.6)、構造式 (i-1-13.1) ~ (i-1-13.4)、構造式 (i-1-14.1) ~ (i-1-14.4)、構造式 (i-1-15.1)、構造式 (i-1-16.1)、構造式 (i-1-17.1)、構造式 (i-1-18.1)、構造式 (i-1-19.1)、構造式 (i-2-1.1) ~ (i-2-1.6)、構造式 (i-2-2.1) ~ (i-2-2.4)、構造式 (i-2-3.1) ~ (i-2-3.4)、構造式 (i-2-4.1) ~ (i-2-4.6)、構造式 (i-2-5.1) ~ (i-2-5.5)、構造式

($i-2-6.1$) $\sim$ ($i-2-6.4$)、構造式($i-2-7.1$) $\sim$ ($i-2-7.4$)、構造式($i-3-1.1$) $\sim$ ($i-3-1.6$)、構造式($i-3-2.1$) $\sim$ ($i-3-2.6$)、構造式($i-3-3.1$) $\sim$ ($i-3-3.6$)、構造式($i-3-4.1$) $\sim$ ($i-3-4.4$)、構造式($i-3-5.1$) $\sim$ ($i-3-5.4$)、構造式($i-3-6.1$) $\sim$ ($i-3-6.6$)、構造式($i-3-7.1$)、構造式($i-3-8.1$)、構造式($i-3-9.1$)、構造式($i-3-10.1$)、構造式($i-4-1.1$) $\sim$ ($i-4-1.4$)、構造式($i-4-2.1$) $\sim$ ($i-4-2.4$)、構造式($i-4-3.1$) $\sim$ ($i-4-3.4$)、構造式($i-4-4.1$) $\sim$ ($i-4-4.4$)、構造式($i-4-5.1$)、構造式($i-4-6.1$)、構造式($i-5-1.1$) $\sim$ ($i-5-1.4$)、構造式($i-5-2.1$) $\sim$ ($i-5-2.4$)、構造式($i-5-3.1$) $\sim$ ($i-5-3.4$)、構造式($i-5-4.1$) $\sim$ ($i-5-4.4$)、構造式($i-6-1.1$) $\sim$ ($i-6-1.4$)、構造式($i-6-2.1$) $\sim$ ($i-6-2.4$)、構造式($i-6-3.1$) $\sim$ ($i-6-3.4$)、構造式($i-6-4.1$) $\sim$ ($i-6-4.4$)、構造式($i-7-1.1$) $\sim$ ($i-7-1.4$)、構造式($i-7-2.1$) $\sim$ ($i-7-2.4$)、構造式($i-7-3.1$) $\sim$ ($i-7-3.4$)、構造式($i-7-4.1$) $\sim$ ($i-7-4.4$)、構造式($i-8-1.1$) $\sim$ ($i-8-1.2$)、構造式($i-8-2.1$) $\sim$ ($i-8-2.2$)、構造式($i-9-1.1$) $\sim$ ($i-9-1.4$)、構造式($i-9-2.1$) $\sim$ ($i-9-2.4$)、構造式($i-9-3.1$) $\sim$ ($i-9-3.4$)、構造式($i-9-4.1$) $\sim$ ($i-9-4.4$)、構造式($i-10-1.1$) $\sim$ ($i-10-1.2$)、構造式($i-10-2.1$) $\sim$ ($i-10-2.2$)、構造式($i-11-1.1$) $\sim$ ($i-11-1.2$)
 又は構造式($i-11-2.1$) $\sim$ ($i-11-2.2$)で表される化合物の液晶組成物100質量%中の合計含有量の下限值は、0.1質量%以上であることが好ましく、0.5質量%以上であることが好ましく、1質量%以上であることが好ましい。

【0227】

一般式(i)、一般式($i-1$) $\sim$ ($i-11$)、一般式($i-1-1$) $\sim$ ($i-1-19$)、一般式($i-2-1$) $\sim$ ($i-2-7$)、一般式($i-3-1$) $\sim$ ($i-3-10$)、一般式($i-4-1$) $\sim$ ($i-4-6$)、一般式($i-5-1$) $\sim$ ($i-5-4$)、一般式($i-6-1$) $\sim$ ($i-6-4$)、一般式($i-7-1$) $\sim$ ($i-7-4$)、一般式($i-8-1$) $\sim$ ($i-8-2$)、一般式($i-9-1$) $\sim$ ($i-9-4$)、一般式($i-10-1$) $\sim$ ($i-10-2$)、一般式($i-11-1$) $\sim$ ($i-11-2$)、構造式($i-1-1.1$) $\sim$ ($i-1-1.10$)、構造式($i-1-2.1$) $\sim$ ($i-1-2.5$)、構造式($i-1-3.1$) $\sim$ ($i-1-3.6$)、構造式($i-1-4.1$) $\sim$ ($i-1-4.6$)、構造式($i-1-5.1$) $\sim$ ($i-1-5.5$)、構造式($i-1-6.1$) $\sim$ ($i-1-6.6$)、構造式($i-1-7.1$) $\sim$ ($i-1-7.4$)、構造式($i-1-8.1$) $\sim$ ($i-1-8.5$)、構造式($i-1-9.1$) $\sim$ ($i-1-9.4$)、構造式($i-1-10.1$) $\sim$ ($i-1-10.2$)、構造式($i-1-11.1$) $\sim$ ($i-1-11.6$)、構造式($i-1-12.1$) $\sim$ ($i-1-12.6$)、構造式($i-1-13.1$) $\sim$ ($i-1-13.4$)、構造式($i-1-14.1$) $\sim$ ($i-1-14.4$)、構造式($i-1-15.1$)、構造式($i-1-16.1$)、構造式($i-1-17.1$)、構造式($i-1-18.1$)、構造式($i-1-19.1$)、構造式($i-2-1.1$) $\sim$ ($i-2-1.6$)、構造式($i-2-2.1$) $\sim$ ($i-2-2.4$)、構造式($i-2-3.1$) $\sim$ ($i-2-3.4$)、構造式($i-2-4.1$) $\sim$ ($i-2-4.6$)、構造式($i-2-5.1$) $\sim$ ($i-2-5.5$)、構造式($i-2-6.1$) $\sim$ ($i-2-6.4$)、構造式($i-2-7.1$) $\sim$ ($i-2-7.4$)、構造式($i-3-1.1$) $\sim$ ($i-3-1.6$)、構造式($i-3-2.1$) $\sim$ ($i-3-2.6$)、構造式($i-3-3.1$) $\sim$ ($i-3-3.6$)、構造式($i-3-4.1$) $\sim$ ($i-3-4.4$)、構造式($i-3-5.1$) $\sim$ ($i-3-5.4$)、構造式($i-3-6.1$) $\sim$ ($i-3-6.6$)、構造式($i-3-7.1$)、構造式($i-$

3-8.1)、構造式(i-3-9.1)、構造式(i-3-10.1)、構造式(i-4-1.1)~(i-4-1.4)、構造式(i-4-2.1)~(i-4-2.4)、構造式(i-4-3.1)~(i-4-3.4)、構造式(i-4-4.1)~(i-4-4.4)、構造式(i-4-5.1)、構造式(i-4-6.1)、構造式(i-5-1.1)~(i-5-1.4)、構造式(i-5-2.1)~(i-5-2.4)、構造式(i-5-3.1)~(i-5-3.4)、構造式(i-5-4.1)~(i-5-4.4)、構造式(i-6-1.1)~(i-6-1.4)、構造式(i-6-2.1)~(i-6-2.4)、構造式(i-6-3.1)~(i-6-3.4)、構造式(i-6-4.1)~(i-6-4.4)、構造式(i-7-1.1)~(i-7-1.4)、構造式(i-7-2.1)~(i-7-2.4)、構造式(i-7-3.1)~(i-7-3.4)、構造式(i-7-4.1)~(i-7-4.4)、構造式(i-8-1.1)~(i-8-1.2)、構造式(i-8-2.1)~(i-8-2.2)、構造式(i-9-1.1)~(i-9-1.4)、構造式(i-9-2.1)~(i-9-2.4)、構造式(i-9-3.1)~(i-9-3.4)、構造式(i-9-4.1)~(i-9-4.4)、構造式(i-10-1.1)~(i-10-1.2)、構造式(i-10-2.1)~(i-10-2.2)、構造式(i-11-1.1)~(i-11-1.2)又は構造式(i-11-2.1)~(i-11-2.2)で表される化合物の液晶組成物100質量%中の合計含有量の上限値は、95質量%以下であることが好ましく、90質量%以下であることが好ましく、85質量%以下であることが好ましく、30質量%以下であることが好ましく、20質量%以下であることが好ましく、15質量%以下であることが好ましい。

10

20

【0228】

一般式(i)、一般式(i-1)~(i-11)、一般式(i-1-1)~(i-1-19)、一般式(i-2-1)~(i-2-7)、一般式(i-3-1)~(i-3-10)、一般式(i-4-1)~(i-4-6)、一般式(i-5-1)~(i-5-4)、一般式(i-6-1)~(i-6-4)、一般式(i-7-1)~(i-7-4)、一般式(i-8-1)~(i-8-2)、一般式(i-9-1)~(i-9-4)、一般式(i-10-1)~(i-10-2)、一般式(i-11-1)~(i-11-2)、構造式(i-1-1.1)~(i-1-1.10)、構造式(i-1-2.1)~(i-1-2.5)、構造式(i-1-3.1)~(i-1-3.6)、構造式(i-1-4.1)~(i-1-4.6)、構造式(i-1-5.1)~(i-1-5.5)、構造式(i-1-6.1)~(i-1-6.6)、構造式(i-1-7.1)~(i-1-7.4)、構造式(i-1-8.1)~(i-1-8.5)、構造式(i-1-9.1)~(i-1-9.4)、構造式(i-1-10.1)~(i-1-10.2)、構造式(i-1-11.1)~(i-1-11.6)、構造式(i-1-12.1)~(i-1-12.6)、構造式(i-1-13.1)~(i-1-13.4)、構造式(i-1-14.1)~(i-1-14.4)、構造式(i-1-15.1)、構造式(i-1-16.1)、構造式(i-1-17.1)、構造式(i-1-18.1)、構造式(i-1-19.1)、構造式(i-2-1.1)~(i-2-1.6)、構造式(i-2-2.1)~(i-2-2.4)、構造式(i-2-3.1)~(i-2-3.4)、構造式(i-2-4.1)~(i-2-4.6)、構造式(i-2-5.1)~(i-2-5.5)、構造式(i-2-6.1)~(i-2-6.4)、構造式(i-2-7.1)~(i-2-7.4)、構造式(i-3-1.1)~(i-3-1.6)、構造式(i-3-2.1)~(i-3-2.6)、構造式(i-3-3.1)~(i-3-3.6)、構造式(i-3-4.1)~(i-3-4.4)、構造式(i-3-5.1)~(i-3-5.4)、構造式(i-3-6.1)~(i-3-6.6)、構造式(i-3-7.1)、構造式(i-3-8.1)、構造式(i-3-9.1)、構造式(i-3-10.1)、構造式(i-4-1.1)~(i-4-1.4)、構造式(i-4-2.1)~(i-4-2.4)、構造式(i-4-3.1)~(i-4-3.4)、構造式(i-4-4.1)~(i-4-4.4)、構造式(i-4-5.1)、構造式(i-4-6.1)、構造式(i-5-

30

40

50

1. 1) ~ (i-5-1. 4)、構造式 (i-5-2. 1) ~ (i-5-2. 4)、構造式 (i-5-3. 1) ~ (i-5-3. 4)、構造式 (i-5-4. 1) ~ (i-5-4. 4)、構造式 (i-6-1. 1) ~ (i-6-1. 4)、構造式 (i-6-2. 1) ~ (i-6-2. 4)、構造式 (i-6-3. 1) ~ (i-6-3. 4)、構造式 (i-6-4. 1) ~ (i-6-4. 4)、構造式 (i-7-1. 1) ~ (i-7-1. 4)、構造式 (i-7-2. 1) ~ (i-7-2. 4)、構造式 (i-7-3. 1) ~ (i-7-3. 4)、構造式 (i-7-4. 1) ~ (i-7-4. 4)、構造式 (i-8-1. 1) ~ (i-8-1. 2)、構造式 (i-8-2. 1) ~ (i-8-2. 2)、構造式 (i-9-1. 1) ~ (i-9-1. 4)、構造式 (i-9-2. 1) ~ (i-9-2. 4)、構造式 (i-9-3. 1) ~ (i-9-3. 4)、構造式 (i-9-4. 1) ~ (i-9-4. 4)、構造式 (i-10-1. 1) ~ (i-10-1. 2)、構造式 (i-10-2. 1) ~ (i-10-2. 2)、構造式 (i-11-1. 1) ~ (i-11-1. 2) 又は構造式 (i-11-2. 1) ~ (i-11-2. 2) で表される化合物の液晶組成物 100 質量%中の合計含有量は、溶解性、 Δn 及び／又は $\Delta \epsilon_r$ の観点から、0.1~95 質量%であることが好ましく、0.5~90 質量%であることが好ましく、1~85 質量%であることが好ましく、1~30 質量%であることが好ましく、1~20 質量%であることが好ましく、5~15 質量%であることが好ましい。

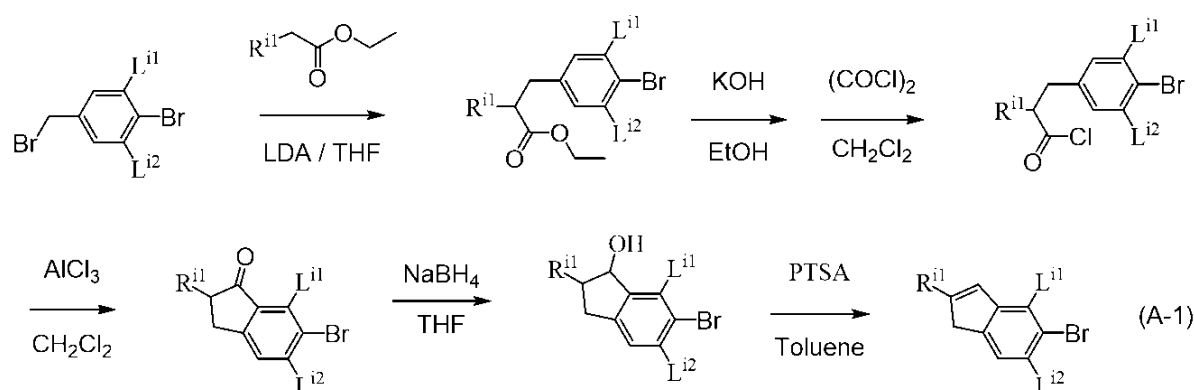
【0229】

一般式 (i) で表される化合物 (下位概念を含む) は、公知の合成方法を用いて合成することができ、以下、いくつか例示する。

本発明に係る化合物の合成中間体であるインデン誘導体 (A-1) は、例えば下記に示す製造方法で得ることができる。

【0230】

【化101】



【0231】

式中、Rⁱ¹、Lⁱ¹及びLⁱ²は、前記一般式 (i) におけるRⁱ¹、Lⁱ¹及びLⁱ²と同じ意味を表す。

本発明に係る化合物の合成中間体であるインデン誘導体 (A-2) は、例えば下記に示す製造方法で得ることができる。

【0232】

10

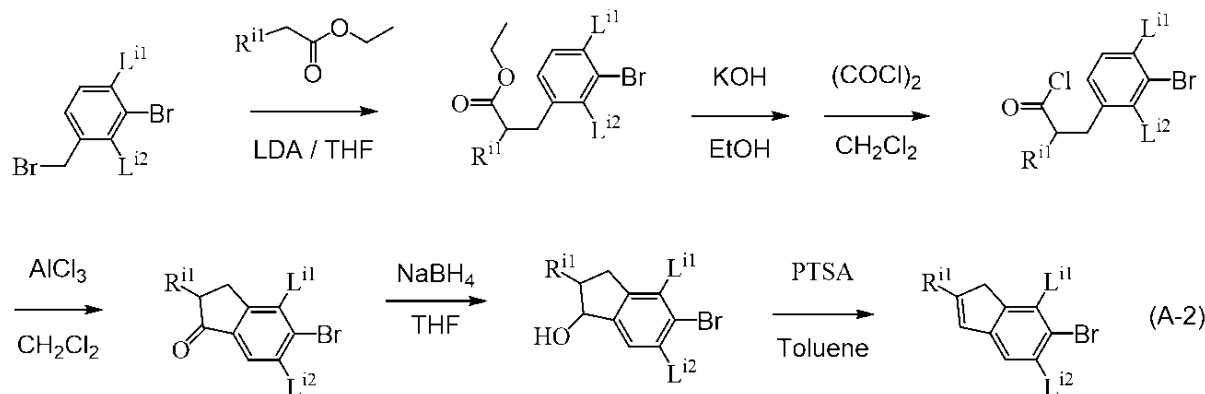
20

30

40

50

【化 1 0 2】



10

【 0 2 3 3】

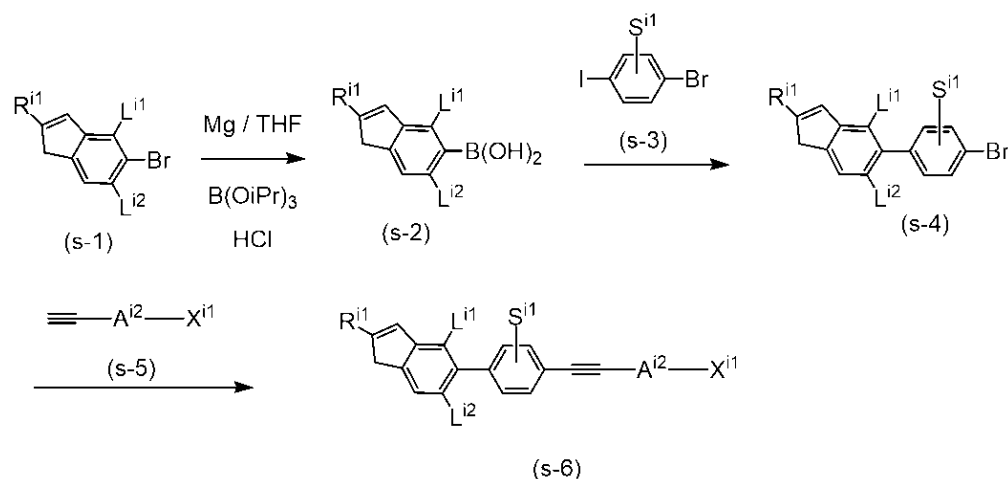
式中、 R^{i1} 、 L^{i1} 及び L^{i2} は、前記一般式(i)における R^{i1} 、 L^{i1} 及び L^{i2} と同じ意味を表す。

本発明において、一般式(i)で表される化合物は、例えば、以下のようにして製造することができる。

(製法1) 下記一般式(s-6)で表される化合物の製造

【 0 2 3 4】

【化 1 0 3】



20

30

【 0 2 3 5】

式中、 R^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 S^{i1} 及び X^{i1} は、前記一般式(i)における R^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 S^{i1} 及び X^{i1} と同じ意味を表す。

一般式(s-1)で表される化合物にマグネシウムを反応させた後、トリイソプロピルボレート、次いで塩酸で処理することにより、一般式(s-2)で表される化合物であるホウ酸誘導体を得ることが出来る。

次に、一般式(s-2)で表される化合物と一般式(s-3)で表される化合物を反応させることにより、一般式(s-4)で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては、例えばパラジウム触媒及び塩基を用いた鈴木カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒の具体例としては[1, 1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド、酢酸パラジウム(II)、ジクロロビス[ジ-tert-ブチル(p-ジメチルアミノフェニル)ホスフィノ]パラジウム(II)、ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)等が挙げられる。

塩基としては炭酸カリウム、炭酸ナトリウム、リン酸カリウム等が挙げられる。

40

50

次いで、一般式（s-4）で表される化合物を一般式（s-5）で表される化合物と反応させることにより、目的物である一般式（s-6）で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては、例えばパラジウム触媒、銅触媒及び塩基を用いた菌頭カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒の具体例としては〔1, 1'-ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン〕パラジウム（II）ジクロリド、酢酸パラジウム（II）、ジクロロビス〔ジ-tert-ブチル（p-ジメチルアミノフェニル）ホスフィノ〕パラジウム（II）、ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（II）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）等が挙げられる。

10

金属触媒として酢酸パラジウム（II）を使用する場合、トリフェニルホスフィン、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2', 4', 6'-トリイソプロピルピフェニル等の配位子を添加してもよい。

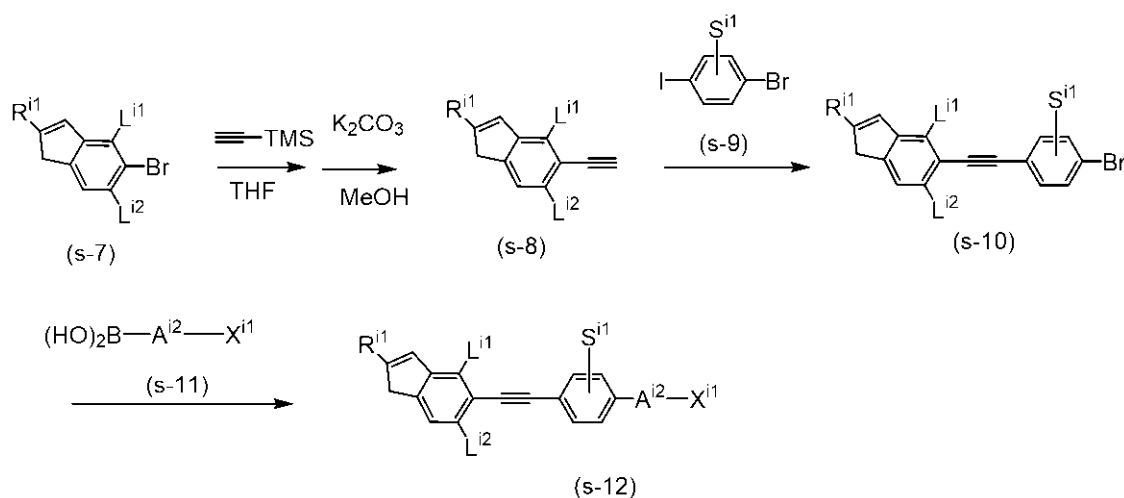
銅触媒の具体例としてはヨウ化銅（I）が挙げられる。

塩基の具体例としてはトリエチルアミン等が挙げられる。

（製法2）下記一般式（s-12）で表される化合物の製造

【0236】

【化104】



20

30

【0237】

式中、 R^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 Si^{i1} 及び X^{i1} は、前記一般式（i）における R^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 Si^{i1} 及び X^{i1} と同じ意味を表す。

一般式（s-7）で表される化合物にトリメチルシリルアセチレンを反応させた後、アルコール溶媒中にて炭酸カリウムと反応させることにより、一般式（s-8）で表される化合物を得ることができる。

トリメチルシリルアセチレンと反応には、パラジウム触媒、銅触媒及び塩基を用いた菌頭カップリング反応が挙げられる。

40

パラジウム触媒及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

次いで、一般式（s-8）で表される化合物を一般式（s-9）で表される化合物と反応させることにより一般式（s-10）で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては例えばパラジウム触媒、銅触媒及び塩基を用いた菌頭カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

一般式（s-10）で表される化合物と一般式（s-11）で表される化合物を反応させることにより、目的物である一般式（s-12）で表される化合物を得ることができる。

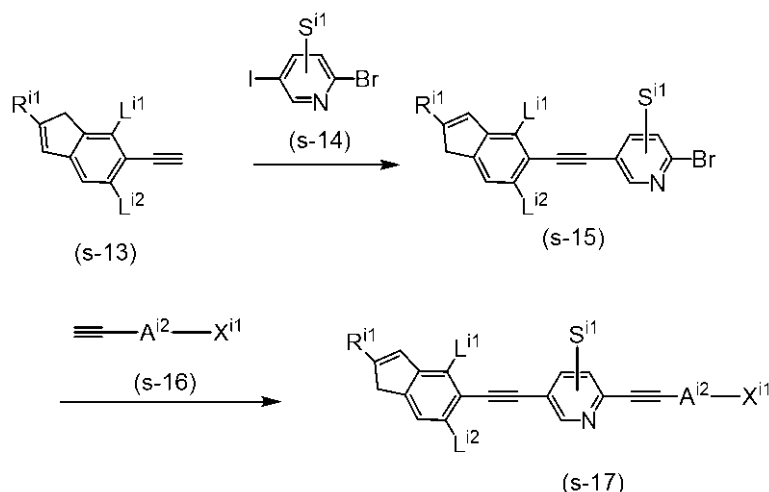
反応方法としては例えばパラジウム触媒及び塩基を用いた鈴木カップリング反応が挙げられる。

50

(製法3) 下記一般式 (s-17) で表される化合物の製造

【0238】

【化105】



10

【0239】

式中、 R^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 Si^{i1} 及び X^{i1} は、前記一般式(i)における R^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 Si^{i1} 及び X^{i1} と同じ意味を表す。

20

まず、一般式(s-13)で表される化合物と一般式(s-14)で表される化合物とを反応させることにより、一般式(s-15)で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては、例えばパラジウム触媒、銅触媒及び塩基を用いた菌頭カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

更に、一般式(s-15)で表される化合物と一般式(s-16)で表される化合物とを反応させることにより、目的物である一般式(s-17)で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては、例えばパラジウム触媒、銅触媒及び塩基を用いた菌頭カップリング反応が挙げられる。

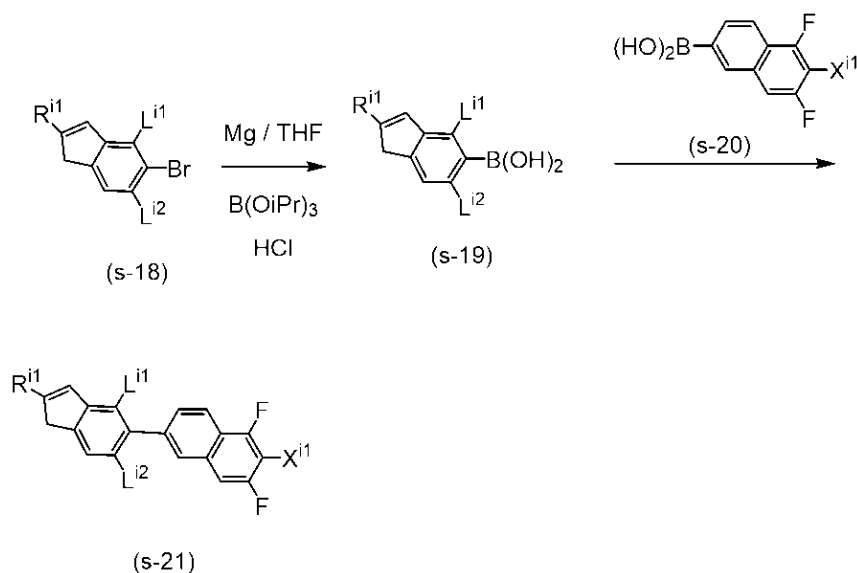
30

パラジウム触媒及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

(製法4) 下記一般式 (s-21) で表される化合物の製造

【0240】

【化106】



40

50

【0241】

式中、 R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 及び X^{i1} は、前記一般式(i)における R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 及び X^{i1} と同じ意味を表す。

まず、一般式(s-18)で表される化合物をマグネシウムと反応させた後、トリイソプロピルボレート、次いで塩酸で処理することにより一般式(s-19)で表される化合物であるホウ酸誘導体を得ることが出来る。

次に、一般式(s-19)で表される化合物と一般式(s-20)で表される化合物を反応させることにより、目的物である一般式(s-21)で表される化合物を得ることができる。

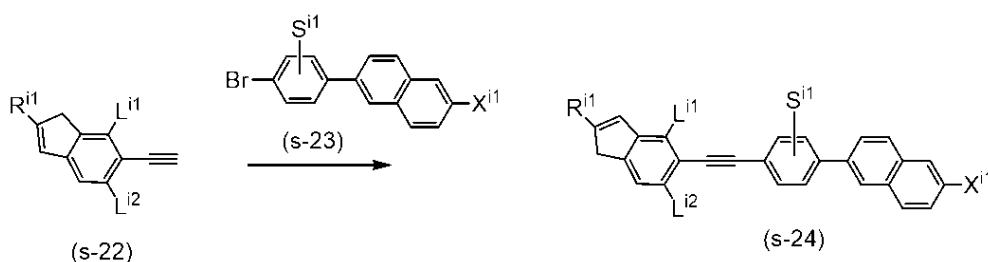
反応方法としては、例えばパラジウム触媒及び塩基を用いた鈴木カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

(製法5) 下記一般式(s-24)で表される化合物の製造

【0242】

【化107】



【0243】

式中、 R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 Si^{i1} 及び X^{i1} は、前記一般式(i)における R^{i1} 、 L^{i1} 、 L^{i2} 、 Si^{i1} 及び X^{i1} と同じ意味を表す。

一般式(s-22)で表される化合物と一般式(s-23)で表される化合物とを反応させることにより目的物である一般式(s-24)で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては例えばパラジウム触媒、銅触媒及び塩基を用いた菌頭カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

(製法6) 下記一般式(s-30)で表される化合物の製造

【0244】

10

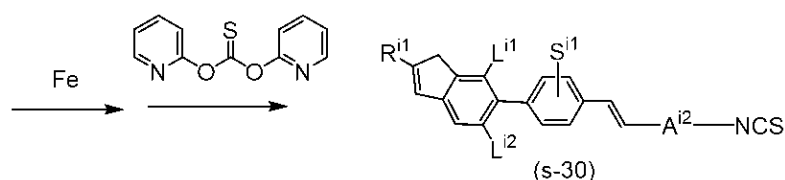
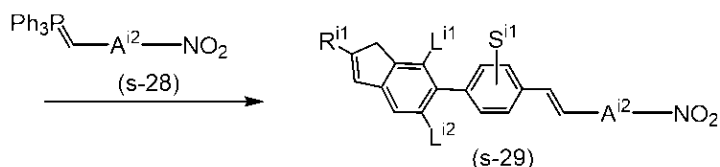
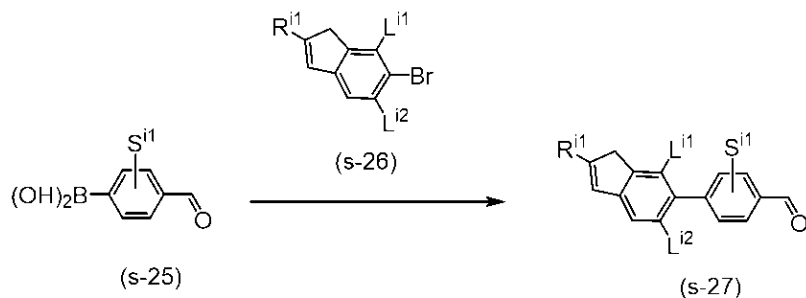
20

30

40

50

【化 1 0 8】



【 0 2 4 5】

式中、 $\text{R}^{\text{i}1}$ 、 $\text{A}^{\text{i}2}$ 、 $\text{L}^{\text{i}1}$ 、 $\text{L}^{\text{i}2}$ 及び $\text{S}^{\text{i}1}$ は、前記一般式 (i) における $\text{R}^{\text{i}1}$ 、 $\text{A}^{\text{i}2}$ 、 $\text{L}^{\text{i}1}$ 、 $\text{L}^{\text{i}2}$ 及び $\text{S}^{\text{i}1}$ と同じ意味を表す。

まず、一般式 (s-25) で表される化合物を一般式 (s-26) で表される化合物と反応させることにより、一般式 (s-27) で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては、例えばパラジウム触媒及び塩基を用いた鈴木カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒、及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

次に、一般式 (s-27) で表される化合物を一般式 (s-28) で表される化合物と反応させることにより、一般式 (s-29) で表される化合物を得ることができる。

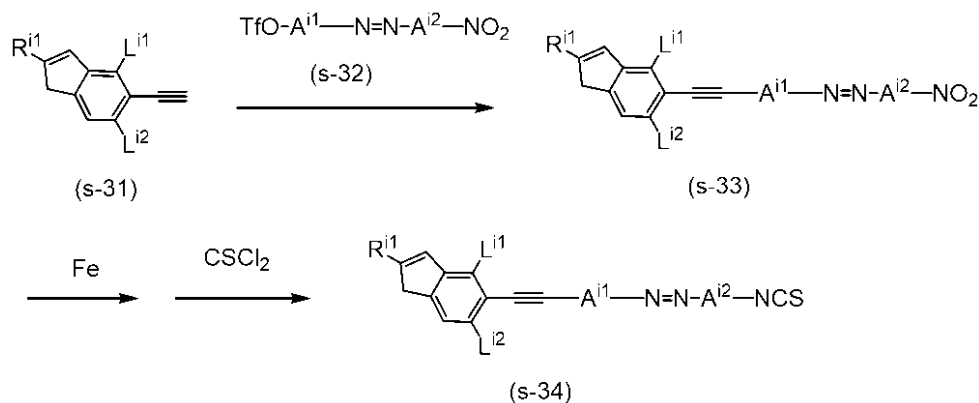
反応方法としては、例えばウィッティヒ反応が挙げられる。

更に、鉄等により、一般式 (s-29) で表される化合物のニトロ基をアミノ基に変換し、チオカルバメート化合物と反応させることにより目的物である一般式 (s-30) で表される化合物を得ることが出来る。

(製法 7) 下記一般式 (s-34) で表される化合物の製造

【 0 2 4 6】

【化 1 0 9】



【 0 2 4 7】

式中、 R^{i1} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 及び L^{i2} は、前記一般式(i)における R^{i1} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 、 L^{i1} 及び L^{i2} と同じ意味を表す。

まず、一般式(s-31)で表される化合物を一般式(s-32)で表される化合物と反応させることにより、一般式(s-33)で表される化合物を得ることができる。

反応方法としては、例えばパラジウム触媒、銅触媒及び塩基を用いた菌頭カップリング反応が挙げられる。

パラジウム触媒、銅触媒及び塩基の具体例としては上記のものが挙げられる。

次に、鉄等により、一般式(s-33)で表される化合物のニトロ基をアミノ基に変換し、チオフォスゲンと反応させることにより目的物である一般式(s-34)で表される化合物を得ることが出来る。

各工程において記載した以外の反応条件として、例えば実験化学講座(日本化学会編、丸善株式会社発行)、Organic Syntheses (A John Wiley & Sons, Inc., Publication)、Beilstein Handbook of Organic Chemistry (Beilstein-Institut fuer Literatur der Organischen Chemie, Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K)、Fiesers' Reagents for Organic Synthesis (John Wiley & Sons, Inc.)等の文献に記載のもの又はSciFinder (Chemical Abstracts Service, American Chemical Society)、Reaxys (Elsevier Ltd.)等のデータベースに収載のものが挙げられる。

各工程において酸素及び／又は水分に不安定な物質を取り扱う際は、窒素ガス、アルゴンガス等の不活性ガス中で作業を行うことが好ましい。

各工程において必要に応じて官能基を保護することができる。

保護基としては、例えば、GREENE'S PROTECTIVE GROUPS IN ORGANIC SYNTHESIS (Fourth Edition)、PETER G. M. WUTS、THEODORA W. GREENE共著、A John Wiley & Sons, Inc., Publication)等に記載の保護基が挙げられる。

また、各工程において必要に応じて精製を行ってもよい。

精製方法としてはクロマトグラフィー、再結晶、蒸留、昇華、再沈殿、吸着、分液処理等が挙げられる。

精製剤の具体例としてはシリカゲル、アルミナ、活性炭等が挙げられる。

【0248】

<一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)の特性値>

一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)の特性値は、以下のようにして測定することができる。

まず、母体液晶に対して、一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)を添加し、液晶組成物100質量%中に一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)をそれぞれ0質量%、5質量%、10質量%含む液晶組成物を調製し、それぞれの液晶組成物の Δn (屈折率異方性)及び $\Delta \epsilon_r$ を測定する。

そして、最小二乗法を用いて、一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)100質量%、すなわち一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)の Δn (屈折率異方性)及び $\Delta \epsilon_r$ を外挿値より求める。

【0249】

Δn (屈折率異方性)は、後述する光学センサで用いられる近赤外領域の Δn と関連する。

Δn が大きいほど対象とする波長の光の位相変調力が大きくなるため特に光学センサ類に好適である。

25℃、589nmにおける Δn はアッペ屈折計を用いて液晶組成物の異常光屈折率(n_e)と常光屈折率(n_o)の差($n_e - n_o$)から求める。

また、位相差測定装置から、 Δn を求めることもできる。

位相差 R_e 、液晶層の厚さ d 及び Δn との間には、 $\Delta n = R_e / d$ の関係が成り立つ。

セルギャップ(d)が約 $3.0 \mu\text{m}$ で、アンチパラレルラビング処理を施したポリイミド配向膜付きガラスセルに液晶組成物を注入し、面内の R_e を位相差フィルム・光学材料検査装置 $R E T S - 100$ (大塚電子株式会社製)で測定する。

測定は温度 25°C 、 589 nm の条件で行い、単位はない。

本発明に係る一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)の 25°C 、 589 nm における Δn は、波長の光の位相変調力の観点から、 0.30 以上であることが好ましく、 $0.35 \sim 0.60$ であることが好ましく、 $0.37 \sim 0.55$ であることが好ましく、 $0.40 \sim 0.55$ であることが好ましい。

10

【0250】

高周波数領域における誘電率異方性は、高いほど目的周波数帯の電波に対する位相変調力が大きくなるため、特にアンテナ用途に好適である。

また、アンテナ用途では高周波数領域における誘電正接が小さいほど目的周波数帯のエネルギー損失が小さくなるため好適である。

本発明に係る一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)においては、高周波数領域の特性を代表して 10 GHz における誘電率異方性 $\Delta \epsilon_r$ を測定した。

$\Delta \epsilon_r = (\epsilon_{r\parallel} - \epsilon_{r\perp})$ である。

ここで、「 ϵ_r 」は誘電定数であり、添え字の「 $\parallel$ 」は液晶の配向方向に対して並行方向、「 $\perp$ 」は液晶の配向方向に対して垂直方向の成分であることを表す。

20

【0251】

$\Delta \epsilon_r$ は以下の方法により測定することができる。

まず、液晶組成物を、ポリテトラフルオロエチレン(P T F E)製の毛細管へと導入する。

ここで用いた毛細管は 0.80 mm の内半径及び 0.835 mm の外半径を有し、有効長は 4.0 cm である。

液晶組成物を封入した毛細管を、 10 GHz の共鳴周波数を有する空洞共振器(E M ラボ株式会社製)の中心へと導入する。

この空洞共振器は 30 mm の直径、 26 mm 幅の外形を有する。

そして信号を入力し、出力された信号の結果を、ネットワーク・アナライザ(キーサイト・テクノロジー株式会社製)を用いて記録する。

30

液晶組成物を封入しないP T F E毛細管の共鳴周波数等と液晶組成物を封入したP T F E毛細管の共鳴周波数等の差を用いて、 10 GHz における誘電定数(ϵ_r)を決定する。

なお、液晶組成物を封入したP T F E毛細管を用いた共鳴周波数等は、液晶分子の配向制御により、液晶分子の配向方向に垂直な特性成分の値及び平行な特性成分の値として求める。

液晶分子をP T F E毛細管の垂直方向(有効長方向に対して垂直)に配列させたり、平行方向(有効長方向に対して平行)に配列させたりするために、永久磁石又は電磁石の磁界を用いる。

磁界は、例えば、磁極間距離 45 mm 、中央付近の磁界の強さは 0.23 テスラである。

40

液晶組成物を封入したP T F E毛細管を磁界に対して並行又は垂直に回転させることで所望の特性成分を得る。

測定は温度 25°C で行い、 $\Delta \epsilon_r$ に単位はない。

【0252】

本発明に係る一般式(i)で表される化合物(下位概念を含む)の 25°C における $\Delta \epsilon_r$ はより大きいことが好ましいが、 GHz 帯における位相変調力の観点から、 0.33 以上であることが好ましく、 $0.33 \sim 0.65$ であることが好ましく、 $0.34 \sim 0.60$ であることが好ましく、 $0.34 \sim 0.55$ であることが好ましく、 $0.35 \sim 0.50$ であることが好ましく、 $0.35 \sim 0.45$ であることが好ましく、 $0.35 \sim 0.40$ であることが好ましい。

50

【 0 2 5 3 】

(液晶組成物)

本発明に係る液晶組成物は、例えば、上述の一般式 (i) で表される化合物 (下位概念を含む) 、必要に応じてその他の液晶化合物、添加物を混合することにより、製造することができる。

【 0 2 5 4 】

添加物としては、安定剤、色素化合物、重合性化合物、アゾラン化合物等が挙げられる。

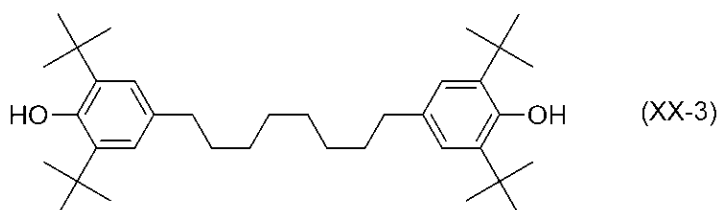
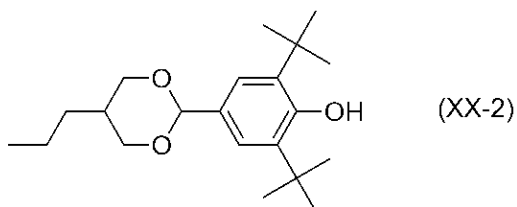
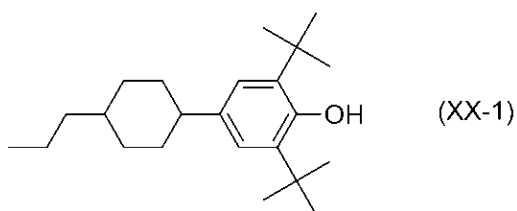
【 0 2 5 5 】

安定剤としては、例えば、ヒドロキノン類、ヒドロキノンモノアルキルエーテル類、第三ブチルカテコール類、ピロガロール類、チオフェノール類、ニトロ化合物類、β - ナフチルアミン類、β - ナフトール類、ニトロソ化合物類、ヒンダードフェノール類、ヒンダードアミン類等が挙げられる。

ヒンダードフェノール類としては、下記の構造式 (X X - 1) ~ (X X - 3) で表されるヒンダードフェノール系酸化防止剤等が挙げられる。

【 0 2 5 6 】

【 化 1 1 0 】

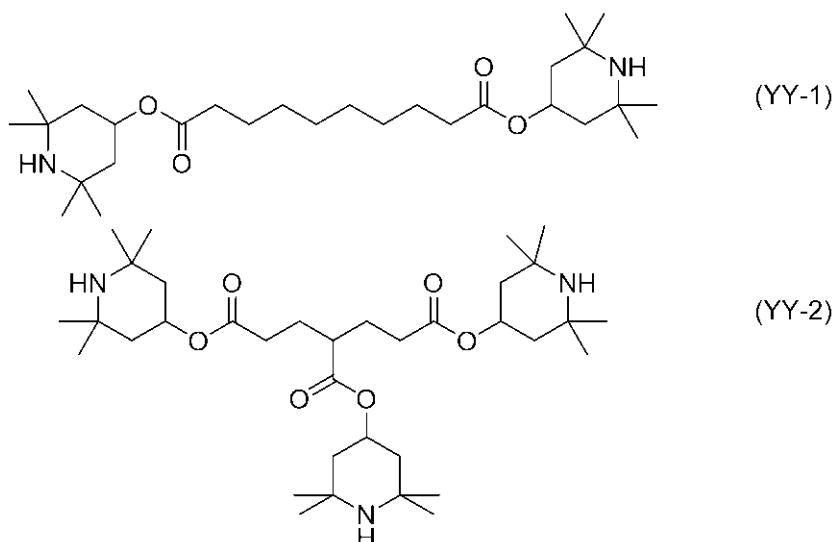


【 0 2 5 7 】

ヒンダードアミン類としては、下記の構造式 (Y Y - 1) ~ (Y Y - 2) で表されるヒンダードアミン系光安定剤等が挙げられる。

【 0 2 5 8 】

【化 1 1 1】



10

【 0 2 5 9】

安定剤を使用する場合における安定剤の液晶組成物に用いる種類は、1種又は2種以上、好ましくは1～10種、好ましくは1～8種、好ましくは1～6種、好ましくは1～4種、好ましくは1～2種である。

20

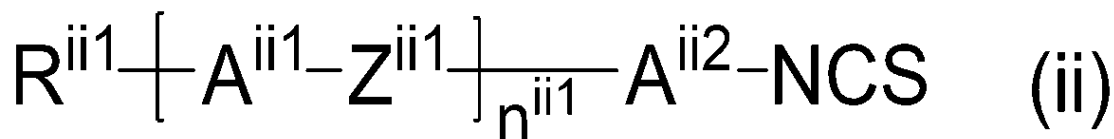
安定剤を使用する場合における安定剤の液晶組成物100質量%中の合計含有量は、0.005～1質量%であることが好ましく、0.02～0.50質量%であることが好ましく、0.03～0.35質量%であることが好ましい。

【 0 2 6 0】

液晶組成物は、その他の液晶化合物としては、溶解性、 Δn 及び／又は $\Delta \epsilon r$ の観点から、下記一般式 (ii) で表される化合物の1種又は2種以上を含むことが好ましい。

【 0 2 6 1】

【化 1 1 2】



30

【 0 2 6 2】

一般式 (ii) 中、 R^{ii1} は、炭素原子数1～20のアルキル基を表す。

当該アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキル基であり、直鎖状のアルキル基であることが好ましい。

当該アルキル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

当該アルキル基中の1つ又2つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 及び／又は $-CS-$ で置換されていてもよい。

40

また、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 及び／又は $-C \equiv C-$ で置換されてもよい。

また、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子に置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。

但し、当該アルキル基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び／又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

50

例えば、 R^{ii1} は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換されることにより、炭素原子数1～19のアルコキシ基を表すことができる。

当該アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルコキシ基であり、直鎖状のアルコキシ基であることが好ましい。

当該アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、 R^{ii1} は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-S-$ に置換されることにより、炭素原子数1～19のアルキルスルファニル基（アルキルチオ基）を表すことができる。

当該アルキルスルファニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキルスルファニル基であり、直鎖状のアルキルスルファニル基であることが好ましい。

当該アルキルスルファニル基における炭素原子数は、好ましくは1～10、好ましくは1～6である。

また、 R^{ii1} は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-CH=CH-$ に置換されることにより、炭素原子数2～20のアルケニル基を表すことができる。

当該アルケニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニル基であり、直鎖状のアルケニル基であることが好ましい。

当該アルケニル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、 R^{ii1} は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-C\equiv C-$ に置換されることにより、炭素原子数2～20のアルキニル基を表すことができる。

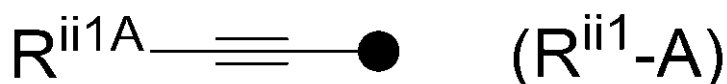
当該アルキニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキニル基であり、直鎖状のアルキニル基であることが好ましい。

当該アルキニル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

アルキニル基としては、合成の容易さや共役系の伸長の観点から、下記式($R^{ii1}-A$)で表されるアルキニル基が好ましい。

【0263】

【化113】



【0264】

式($R^{ii1}-A$)中、 $R^{ii1}A$ は、炭素原子数1～18のアルキル基を表す。

炭素原子数1～18のアルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキル基であり、直鎖状のアルキル基であることが好ましい。

炭素原子数1～18のアルキル基における炭素原子数は、好ましくは1～8である。

当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 及び／又は $-CS-$ で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ は、それぞれ独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 及び／又は $-C\equiv C-$ で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子で置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。

但し、当該アルキル基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び／又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

また、式 ($R^{i i 1}-A$) 中、黒点は $A^{i i 1}$ への結合手を表す。

また、 $R^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の 1 つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換され、且つ一つ又は 2 つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-CH=CH-$ に置換されることにより、炭素原子数 2 ～ 19 のアルケニルオキシ基を表すことができる。

当該アルケニルオキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニルオキシ基であり、直鎖状のアルケニルオキシ基であることが好ましい。

当該アルケニルオキシ基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

また、 $R^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数 1 ～ 20 のハロゲン化アルキル基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルキル基であり、直鎖状のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルキル基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

また、 $R^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の 1 つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換され、且つ当該アルキル基中の 1 つ又は 2 つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数 1 ～ 19 のハロゲン化アルコキシ基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルコキシ基であり、直鎖状のハロゲン化アルコキシ基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは 2 ～ 10、好ましくは 2 ～ 6 である。

$R^{i i 1}$ における炭素原子数 1 ～ 20 のアルキル基（置換されたものも含む）の具体例としては、式 ($R^{i i 1}-1$) ～ ($R^{i i 1}-56$) で表される基等が挙げられる。

【0265】

10

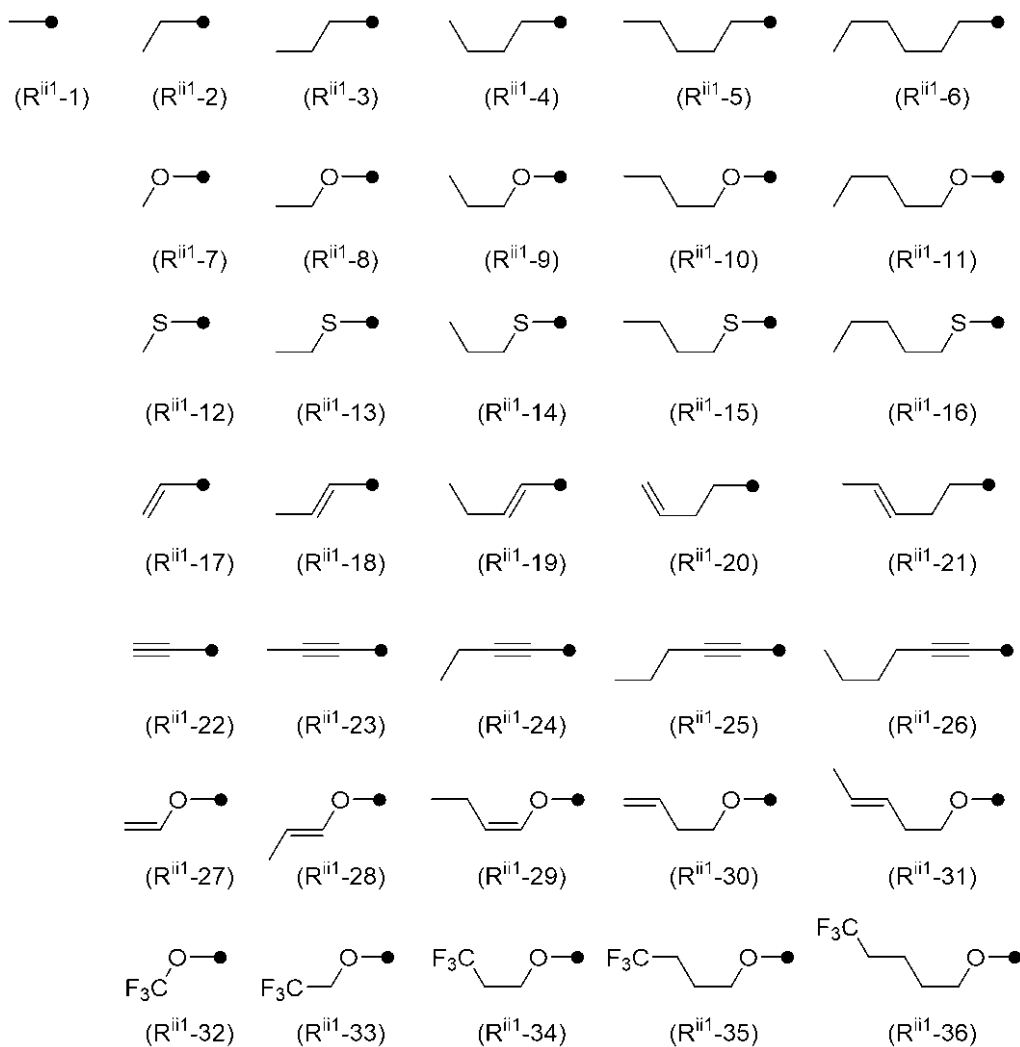
20

30

40

50

【化 1 1 4】



10

20

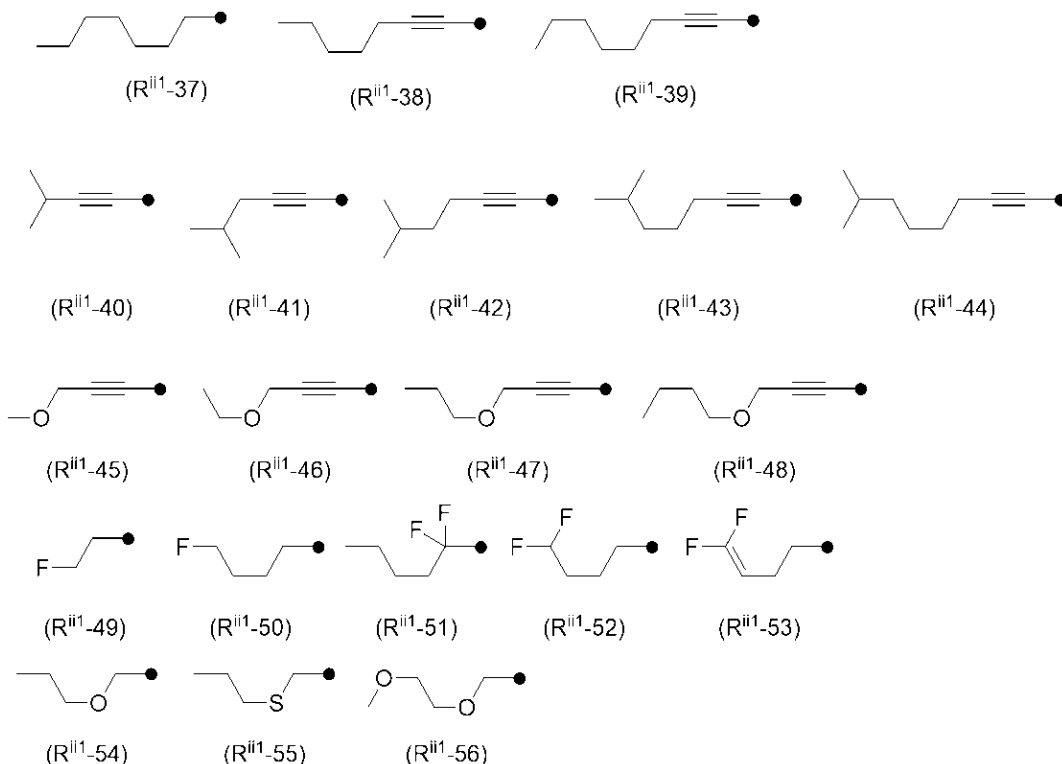
【 0 2 6 6 】

30

40

50

【化 1 1 5】



10

20

【0 2 6 7】

式 (Rⁱⁱⁱ¹-1) ~ (Rⁱⁱⁱ¹-56) 中、黒点は Aⁱⁱⁱ¹ への結合手を表す。

Rⁱⁱⁱ¹ が結合する環構造がフェニル基（芳香族）である場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、Rⁱⁱⁱ¹ が結合する環構造がシクロヘキサン、ピラン及びジオキサンなどの飽和した環構造の場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましい。

30

また、Rⁱⁱⁱ¹ としては、ネマチック相を安定化させるためには、炭素原子及び存在する場合の酸素原子の合計が 5 以下であることが好ましく、直鎖状であることが好ましい。

なお、Rⁱⁱⁱ¹ としては、溶解性の観点から、炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖状又は分岐状のアルキル基、炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖状のアルコキシ基、炭素原子数 1 ~ 8 の直鎖状のハロゲン化アルコキシ基、炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖状のアルキニル基又は炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルキルスルファニル基が好ましい。

【0 2 6 8】

一般式 (i i) 中、Aⁱⁱⁱ¹ 及び Aⁱⁱⁱ² は、それぞれ独立して、以下の基 (a)、基 (b)、基 (c) 及び基 (d) :

(a) 1, 4-シクロヘキシレン基（この基中に存在する 1 つの -CH₂- 又は非隣接の 2 つ以上の -CH₂- は -O- 及び / 又は -S- に置き換えられてもよい。）

40

(b) 1, 4-フェニレン基（この基中に存在する 1 つの -CH= 又は 2 つ以上の -CH= は -N= に置き換えられてもよい。）

(c) 1, 4-シクロヘキセニレン基、ビスクロ [2. 2. 2] オクタン-1, 4-ジイル基、ナフタレン-2, 6-ジイル基、ナフタレン-1, 4-ジイル基、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基、5, 6, 7, 8-テトラヒドロナフタレン-1, 4-ジイル基、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基、アントラセン-2, 6-ジイル基、アントラセン-1, 4-ジイル基、アントラセン-9, 10-ジイル基、フェナントレン-2, 7-ジイル基、2, 3-ジヒドロインデン-2, 5-ジイル基、2, 3-ジヒドロインデン-1, 5-ジイル基、2, 3-ジヒドロインデン-3, 5-

50

ジイル基（ナフタレンー２，６ージイル基、ナフタレンー１，４ージイル基、１，２，３，４ーテトラヒドロナフタレンー２，６ージイル基、５，６，７，８ーテトラヒドロナフタレンー１，４ージイル基、アントラセンー２，６ージイル基、アントラセンー１，４ージイル基、アントラセンー９，１０ージイル基又はフェナントレンー２，７ージイル基中に存在する１つの－ＣＨ＝又は２つ以上の－ＣＨ＝は－Ｎ＝に置き換えられても良い。）

（ｄ）チオフェンー２，５ージイル基、ベンゾチオフェンー２，５ージイル基、ベンゾチオフェンー２，６ージイル基、ジベンゾチオフェンー３，７ージイル基、ジベンゾチオフェンー２，６ージイル基、チエノ〔３，２－ｂ〕チオフェンー２，５ージイル基、ベンゾ〔１，２－ｂ：４，５－ｂ′〕ジチオフェンー２，６ージイル基（この基中に存在する１つの－ＣＨ＝又は２つ以上の－ＣＨ＝は－Ｎ＝に置き換えられても良い。）
 からなる群より選ばれる基を表す。

【０２６９】

$A^{i i 1}$ 及び $A^{i i 2}$ 中の一つ又は二つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、置換基 $S^{i i 1}$ により置換されていてもよい。

置換基 $S^{i i 1}$ は、ハロゲン原子、ペンタフルオロスルファニル基、ニトロ基、シアノ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基又は炭素原子数１～２０のアルキル基のいずれかを表す。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。

炭素原子数１～２０のアルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキル基であり、直鎖状のアルキル基であることが好ましい。

炭素原子数１～２０のアルキル基における炭素原子数は、好ましくは２～１０、好ましくは２～６である。

当該アルキル基中の１つ又は２つ以上の－ＣＨ₂－は、それぞれ独立して、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－及び／又は－ＣＳ－で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の１つ又は２つ以上の－ＣＨ₂－ＣＨ₂－は、それぞれ独立して、－ＣＨ＝ＣＨ－、－ＣＦ＝ＣＦ－及び／又は－Ｃ≡Ｃ－で置換されていてもよい。

また、当該アルキル基中の１つ又は２つ以上の水素原子は、それぞれ独立して、ハロゲン原子に置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。

但し、当該アルキル基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び／又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

例えば、置換基 $S^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の１つの－ＣＨ₂－が－Ｏ－に置換されることにより、炭素原子数１～１９のアルコキシ基を表すことができる。

当該アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルコキシ基であり、直鎖状のアルコキシ基であることが好ましい。

当該アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは２～１０、好ましくは２～６である。

また、置換基 $S^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の１つの－ＣＨ₂－が－Ｓ－に置換されることにより、炭素原子数１～１９のアルキルスルファニル基（アルキルチオ基）を表すことができる。

当該アルキルスルファニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキルスルファニル基であり、直鎖状のアルキルスルファニル基であることが好ましい。

当該アルキルスルファニル基における炭素原子数は、好ましくは２～１０、好ましくは２～６である。

また、置換基 $S^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の１つ又は２つ以上の－ＣＨ₂－ＣＨ₂－が、－ＣＨ＝ＣＨ－に置換されることにより、炭素原子数２～２０のアルケニル基を表すことができる。

当該アルケニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニル基であり、直鎖状のアルケニル基であることが好ましい。

当該アルケニル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、置換基 $S^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-C \equiv C-$ に置換されることにより、炭素原子数2～20のアルキニル基を表すことができる。

当該アルキニル基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルキニル基であり、直鎖状のアルキニル基であることが好ましい。

当該アルキニル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

10

また、置換基 $S^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換され、且つ一つ又は2つ以上の $-CH_2-CH_2-$ が、 $-CH=CH-$ に置換されることにより、炭素原子数2～19のアルケニルオキシ基を表すことができる。

当該アルケニルオキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のアルケニルオキシ基であり、直鎖状のアルケニルオキシ基であることが好ましい。

当該アルケニルオキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、置換基 $S^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数1～20のハロゲン化アルキル基を表すことができる。

20

当該ハロゲン化アルキル基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルキル基であり、直鎖状のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

当該ハロゲン化アルキル基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

また、置換基 $S^{i i 1}$ は、当該アルキル基中の1つの $-CH_2-$ が $-O-$ に置換され、且つ当該アルキル基中の1つ又は2つ以上の水素原子が、ハロゲン原子に置換されることにより、炭素原子数1～19のハロゲン化アルコキシ基を表すことができる。

当該ハロゲン化アルコキシ基は、直鎖状、分岐状又は環状のハロゲン化アルコキシ基であり、直鎖状のハロゲン化アルコキシ基であることが好ましい。

30

当該ハロゲン化アルコキシ基における炭素原子数は、好ましくは2～10、好ましくは2～6である。

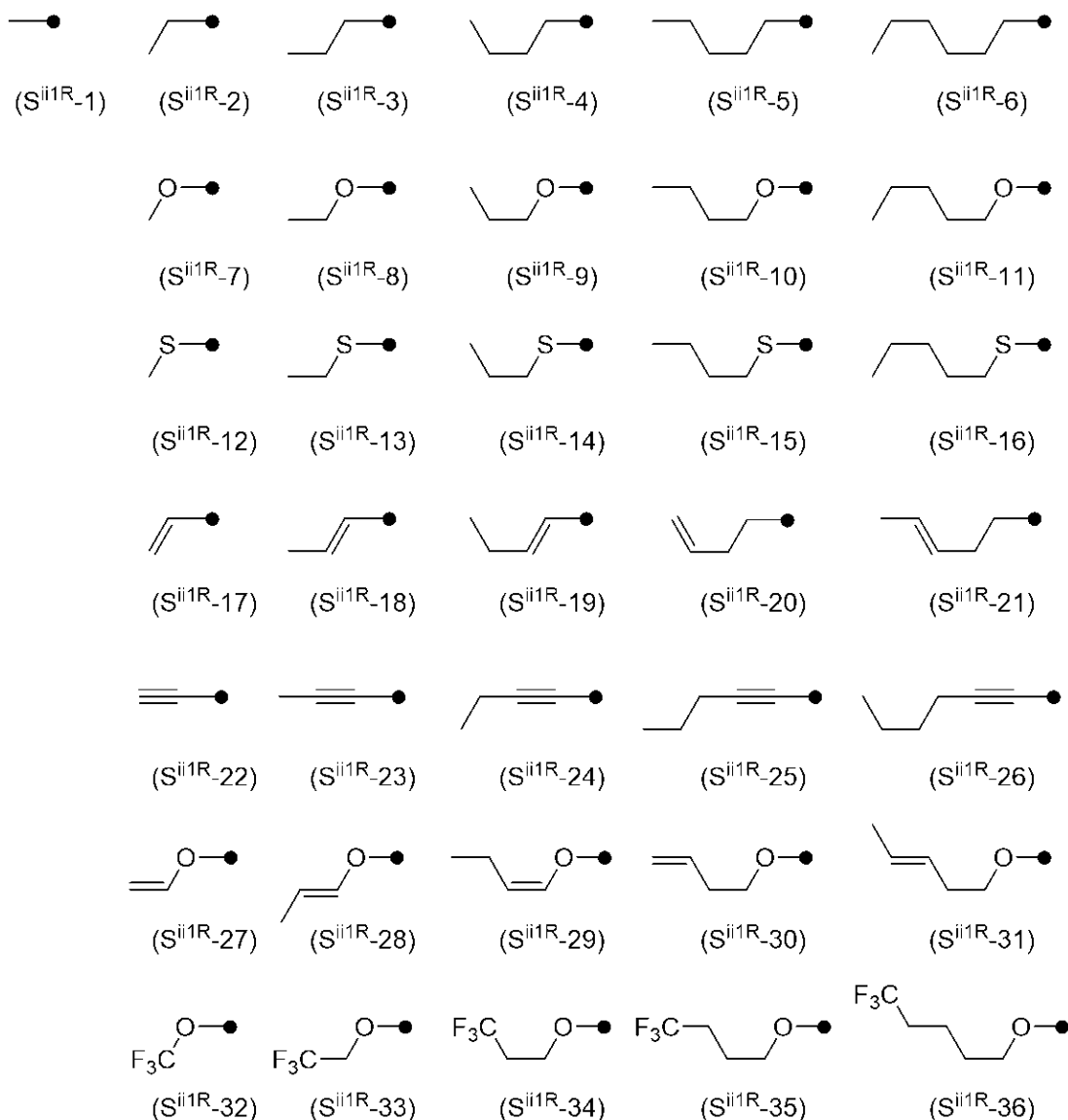
置換基 $S^{i i 1}$ における炭素原子数1～20のアルキル基（置換されたものも含む）の具体例としては、式 $(S^{i i 1}R-1) \sim (S^{i i 1}R-36)$ で表される基等が挙げられる。

【0270】

40

50

【化 1 1 6】



10

20

30

【0 2 7 1】

式 (Sⁱⁱ¹R-1) ~ (Sⁱⁱ¹R-36) 中、黒点は Aⁱⁱ¹ 又は Aⁱⁱ² への結合手を表す。

置換基 Sⁱⁱ¹ としては、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルキル基、フッ素原子又は塩素原子が好ましい。

また、Aⁱⁱ¹ の少なくとも一つ又は Aⁱⁱ² は、少なくとも一つの置換基 Sⁱⁱ¹ で置換されていることが好ましく、ハロゲン原子で置換されていることが好ましく、フッ素原子で置換されていることが好ましい。

なお、置換基 Sⁱⁱ¹ が複数ある場合は、それらは同一であってもよく、異なってもよい。

【0 2 7 2】

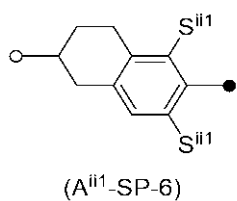
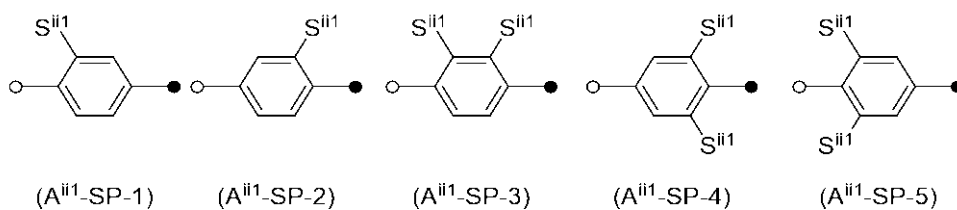
Aⁱⁱ¹ における置換基 Sⁱⁱ¹ の置換位置としては、下記式 (Aⁱⁱ¹-SP-1) ~ (Aⁱⁱ¹-SP-12) のいずれかであることが好ましい。

【0 2 7 3】

40

50

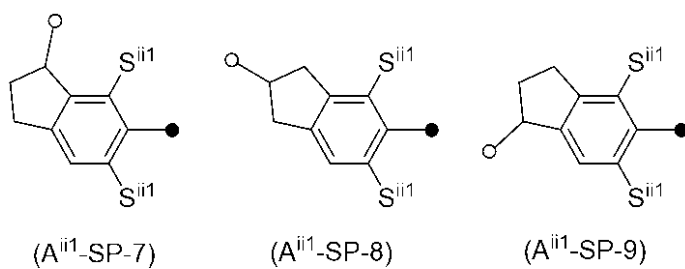
【化 1 1 7】



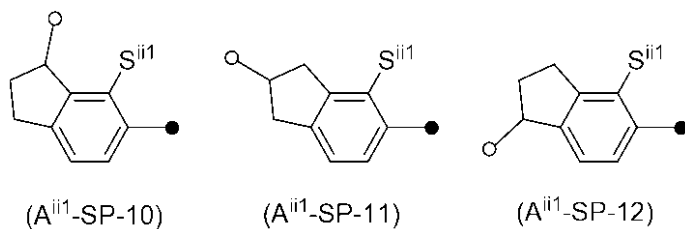
10

【 0 2 7 4】

【化 1 1 8】



20



【 0 2 7 5】

式 (Aⁱⁱ¹-SP-1) ~ (Aⁱⁱ¹-SP-12) 中、白点は Rⁱⁱ¹ 又は Zⁱⁱ¹ への結合手を表し、黒点は Zⁱⁱ¹ への結合手を表す。

Aⁱⁱ² における置換基 Sⁱⁱ¹ の置換位置としては、下記式 (Aⁱⁱ²-SP-1) ~ (Aⁱⁱ²-SP-8) のいずれかであることが好ましい。

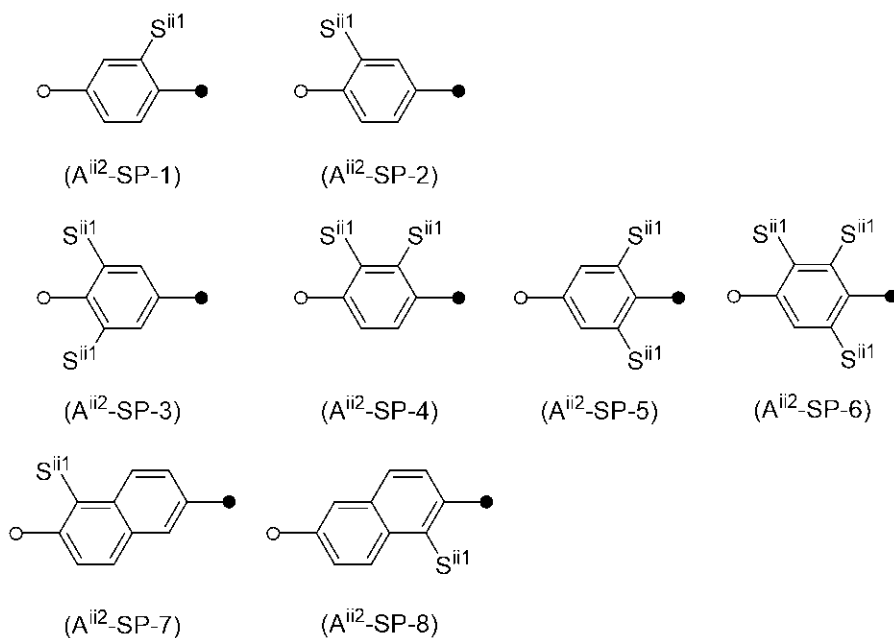
【 0 2 7 6】

30

40

50

【化 1 1 9】



10

【 0 2 7 7】

20

式 (Aⁱⁱ²-SP-1) ~ (Aⁱⁱ²-SP-8) 中、白点は Zⁱⁱⁱ¹ への結合手を表し、黒点はイソチオシアネート基 (-NCS) への結合手を表す。

より具体的には、Aⁱⁱⁱ¹ は、下記式 (Aⁱⁱⁱ¹-1) ~ (Aⁱⁱⁱ¹-34) のいずれかを表すことが好ましい。

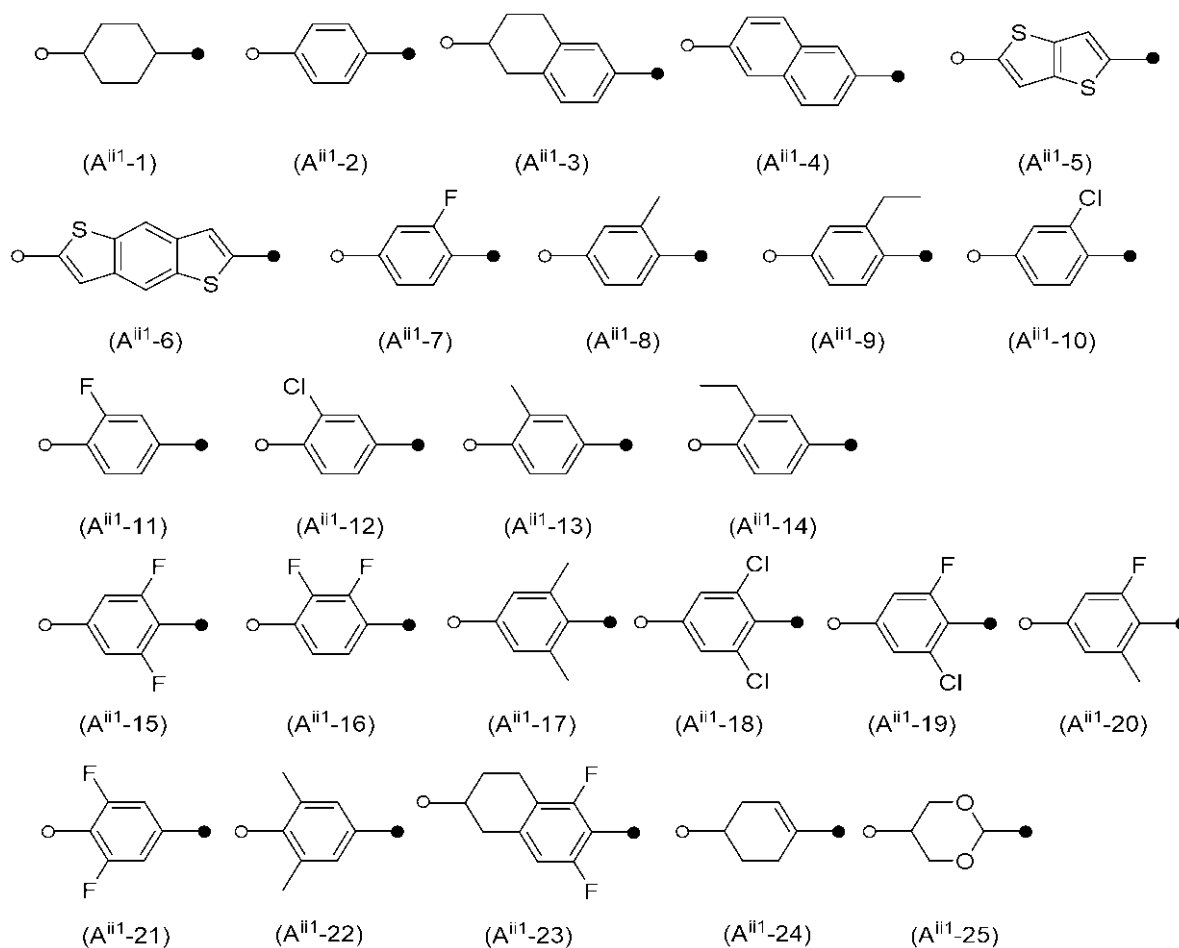
【 0 2 7 8】

30

40

50

【化 1 2 0】

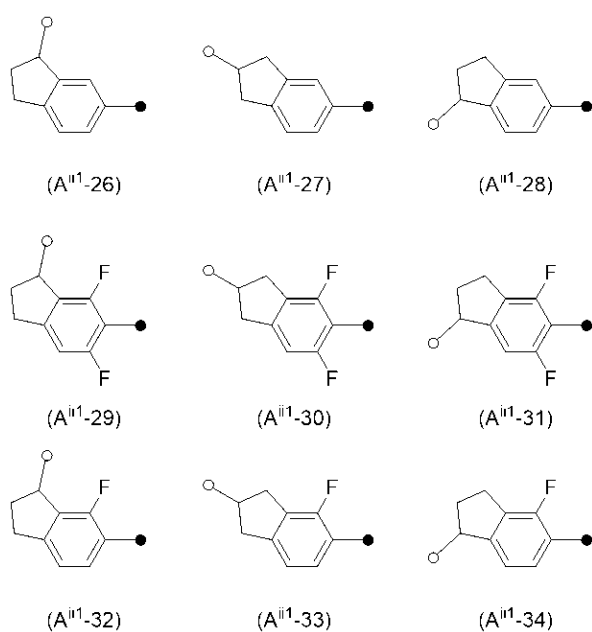


10

20

【 0 2 7 9】

【化 1 2 1】



30

40

【 0 2 8 0】

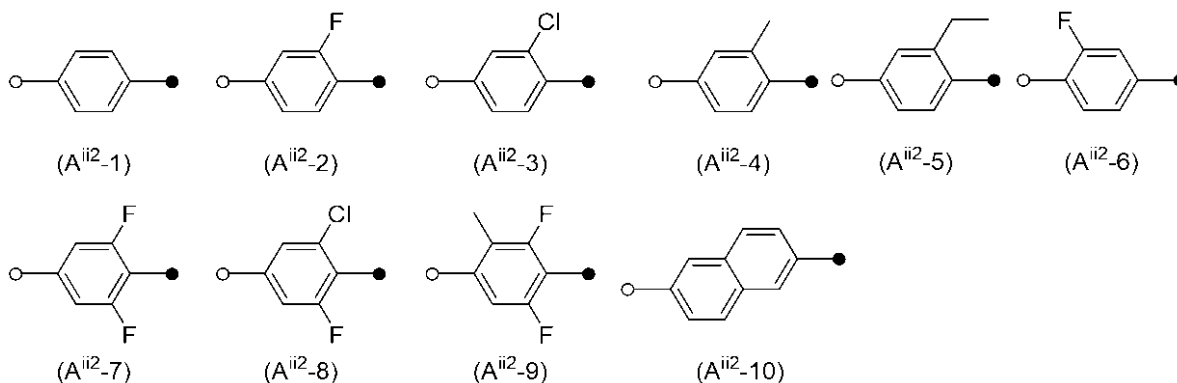
式 (Aⁱⁱ¹-1) ~ (Aⁱⁱ¹-34) 中、白点はRⁱⁱ¹又はZⁱⁱ¹への結合手を表し、黒点はZⁱⁱ¹への結合手を表す。

より具体的には、Aⁱⁱ²は、下記式 (Aⁱⁱ²-1) ~ (Aⁱⁱ²-10) のいずれかを表すことが好ましい。

50

【0281】

【化122】



10

【0282】

式 (Aⁱⁱ²-1) ~ (Aⁱⁱ²-10) 中、白点は Zⁱⁱⁱ¹ への結合手を表し、黒点はイソチオシアネート基 (-NCS) への結合手を表す。

【0283】

一般式 (i i) 中、Zⁱⁱⁱ¹ は、単結合、炭素原子数 1 ~ 20 のアルキレン基のいずれかを表す。

当該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の -CH₂- は、それぞれ独立して、-O-、-CF₂- 及び / 又は -CO- で置換されていてもよい。

20

また、当該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の -CH₂-CH₂- は、それぞれ独立して、-CH₂-CH(CH₃)-、-CH(CH₃)-CH₂-、-CH=CH-、-CF=CF-、-CH=C(CH₃)-、-C(CH₃)=CH-、-CH=N-、-N=CH-、-N=N-、-C≡C-、-CO-O- 及び / 又は -O-CO- で置換されてもよい。

但し、炭素原子数 1 ~ 20 のアルキレン基が所定の基により置換される場合においては、酸素原子と酸素原子が直接結合することはない。

また、化合物の安定性の観点から、硫黄原子と硫黄原子及び / 又は酸素原子と硫黄原子が直接結合することはないことが好ましい。

30

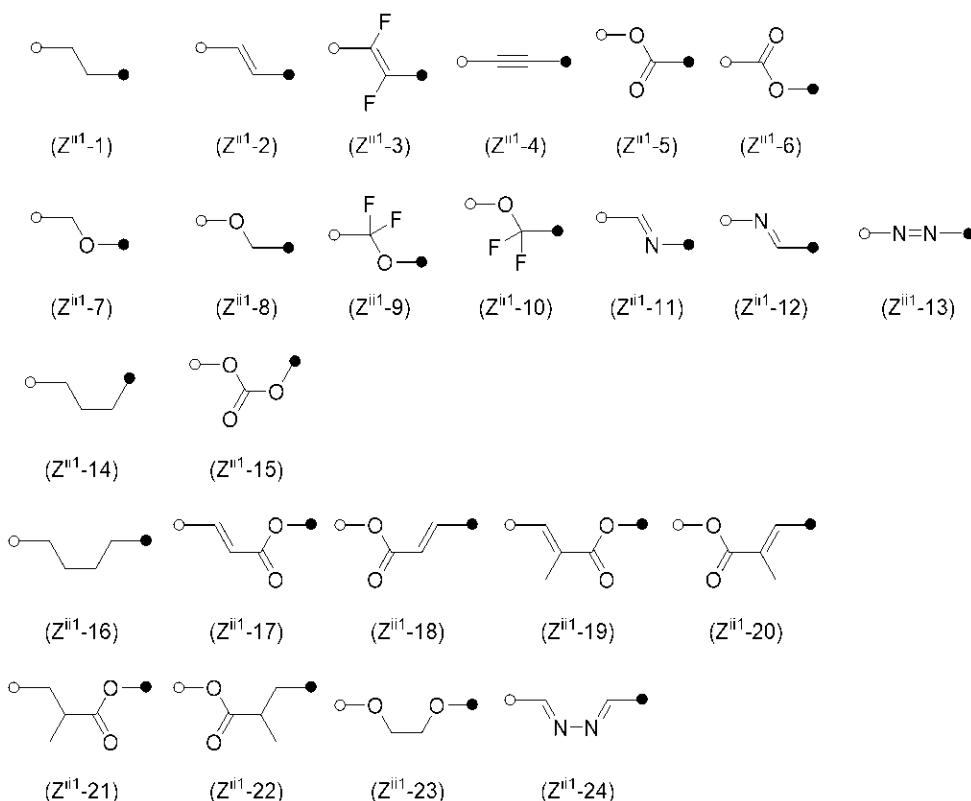
炭素原子数 1 ~ 20 のアルキレン基の具体例 (置換されたものも含む) としては、式 (Zⁱⁱⁱ¹-1) ~ (Zⁱⁱⁱ¹-24) で表される基等が挙げられる。

【0284】

40

50

【化 1 2 3】



10

20

【0 2 8 5】

式 (Zⁱⁱ¹-1) ~ (Zⁱⁱ¹-24) 中、白点は Aⁱⁱ¹ への結合手を表し、黒点は Aⁱⁱ¹ 又は Aⁱⁱ² への結合手を表す。

【0 2 8 6】

一般式 (ii) 中、nⁱⁱ¹ は、1 ~ 4、好ましくは 1 ~ 2 の整数を表す。

nⁱⁱ¹ が 1 である場合においては、Δn 及び / 又は Δε_r の観点から、Zⁱⁱ¹ は単結合又は -C≡C- を表すことが好ましい。

30

また、nⁱⁱ¹ が 2 である場合においては、Δn 及び / 又は Δε_r の観点から、Zⁱⁱ¹ は単結合又は -C≡C- を表すことが好ましい。

なお、一般式 (ii) において、Aⁱⁱ¹ 及び Zⁱⁱ¹ が複数存在する場合は、それらはそれぞれ同一であってもよく、異なってもよい。

【0 2 8 7】

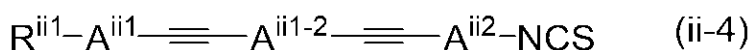
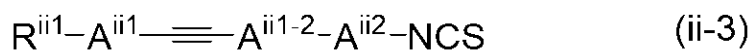
一般式 (ii) で表される化合物としては、下記一般式 (ii-1) ~ (ii-4) で表される化合物であることが好ましい。

【0 2 8 8】

【化 1 2 4】



40



【0 2 8 9】

一般式 (ii-1) ~ (ii-4) 中、Rⁱⁱ¹、Aⁱⁱ¹ 及び Aⁱⁱ² は、上記一般式

50

(ii) 中の R^{ii1} 、 A^{ii1} 及び A^{ii2} とそれぞれ同じ意味を表す。

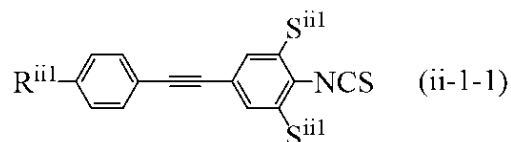
一般式 (ii-3) ~ (ii-4) 中、 A^{ii1-2} の定義は、それぞれ独立して、上記一般式 (ii) 中の A^{ii1} の定義に同じである。

【0290】

一般式 (ii-1) で表される化合物としては、下記一般式 (ii-1-1) で表される化合物であることが好ましい。

【0291】

【化125】



10

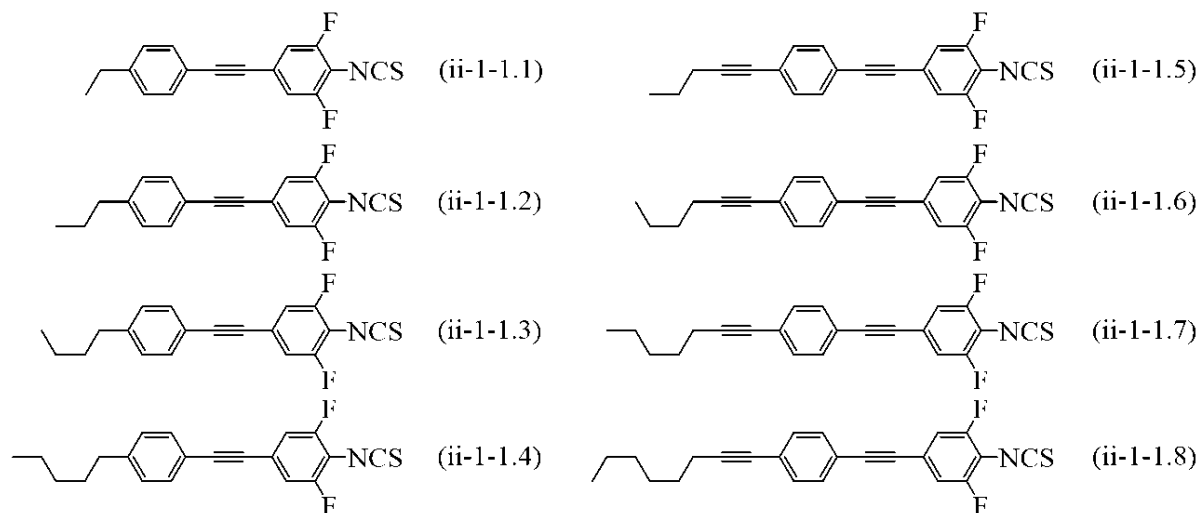
【0292】

一般式 (ii-1-1) 中、 R^{ii1} 及び S^{ii1} は、それぞれ独立して、上記一般式 (ii) 中の R^{ii1} 及び S^{ii1} とそれぞれ同じ意味を表す。

一般式 (ii-1-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (ii-1-1.1) ~ (ii-1-1.8) で表される化合物等が挙げられる。

【0293】

【化126】



20

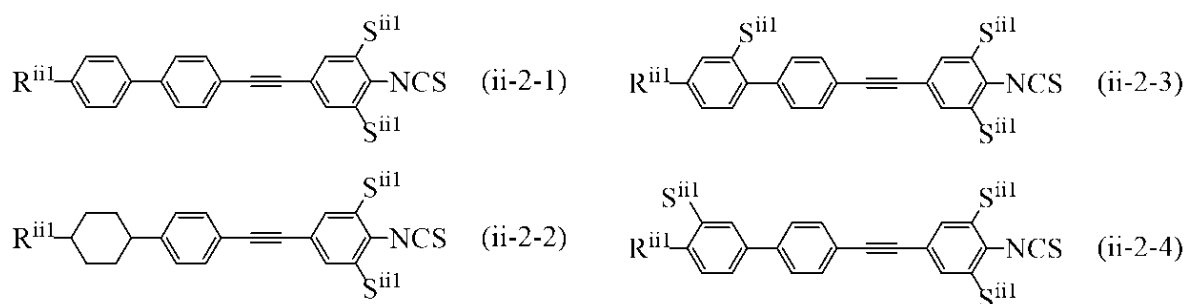
30

【0294】

一般式 (ii-2) で表される化合物としては、下記一般式 (ii-2-1) ~ (ii-2-4) で表される化合物であることが好ましい。

【0295】

【化127】



40

【0296】

一般式 (ii-2-1) ~ (ii-2-4) 中、 R^{ii1} 及び S^{ii1} は、それぞれ独立

50

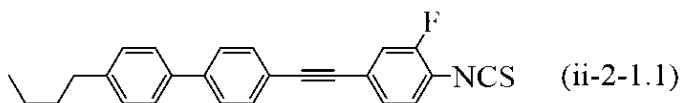
して、上記一般式 (ii) 中の R^{ii1} 及び S^{ii1} とそれぞれ同じ意味を表す。

【0297】

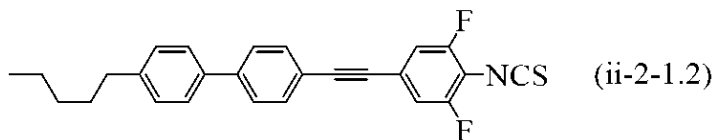
一般式 (ii-2-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (ii-2-1.1) ~ (ii-2-1.2) で表される化合物等が挙げられる。

【0298】

【化128】



10

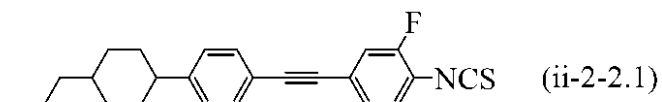


【0299】

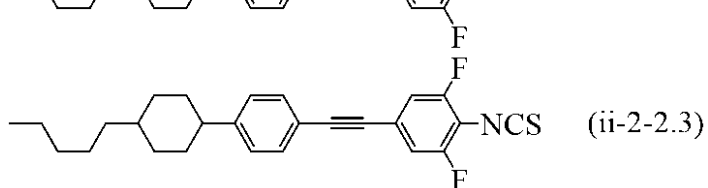
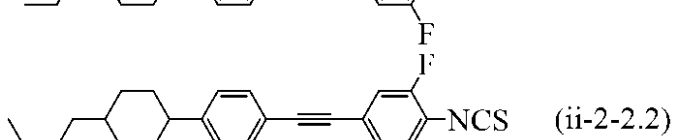
一般式 (ii-2-2) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (ii-2-2.1) ~ (ii-2-2.3) で表される化合物等が挙げられる。

【0300】

【化129】



20



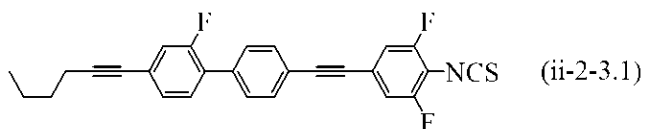
30

【0301】

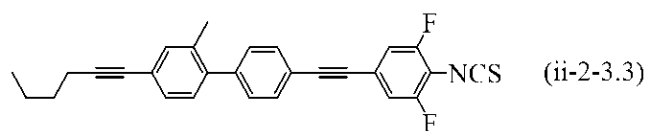
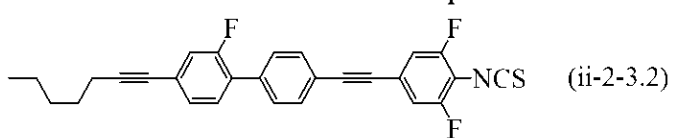
一般式 (ii-2-3) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (ii-2-3.1) ~ (ii-2-3.3) で表される化合物等が挙げられる。

【0302】

【化130】



40



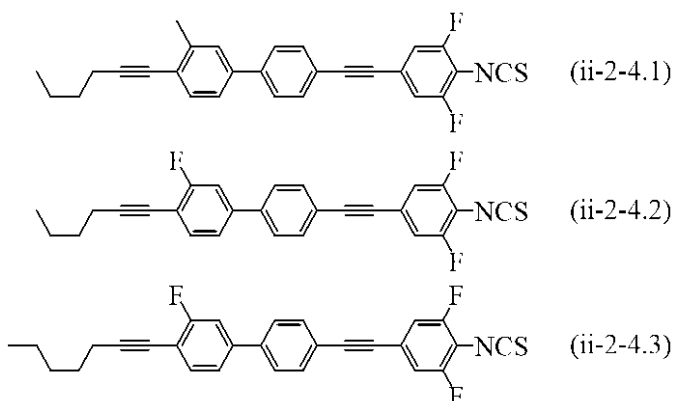
【0303】

50

一般式 (ii-2-4) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (ii-2-4.1) ~ (ii-2-4.3) で表される化合物等が挙げられる。

【0304】

【化131】



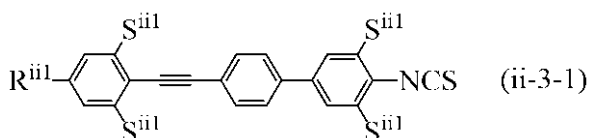
10

【0305】

一般式 (ii-3) で表される化合物としては、下記一般式 (ii-3-1) で表される化合物であることが好ましい。

【0306】

【化132】



20

【0307】

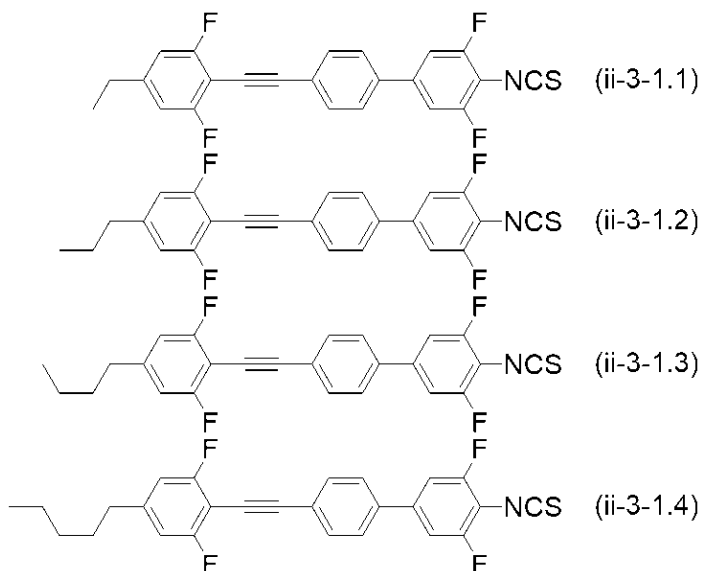
一般式 (ii-3-1) 中、 R^{iii1} 及び S^{iii1} は、それぞれ独立して、上記一般式 (ii) 中の R^{ii1} 及び S^{ii1} とそれぞれ同じ意味を表す。

一般式 (ii-3-1) で表される化合物の具体例としては、下記構造式 (ii-3-1.1) ~ (ii-3-1.4) で表される化合物等が挙げられる。

30

【0308】

【化133】



40

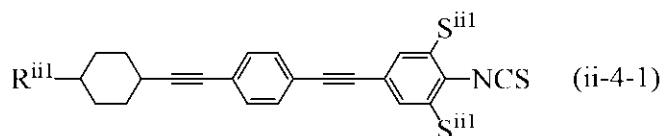
【0309】

50

一般式 (ii-4) で表される化合物としては、下記一般式 (ii-4-1) で表される化合物であることが好ましい。

【0310】

【化134】

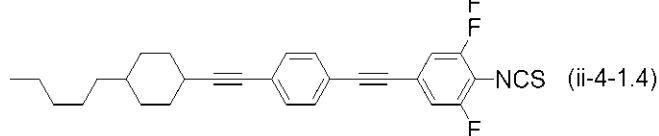
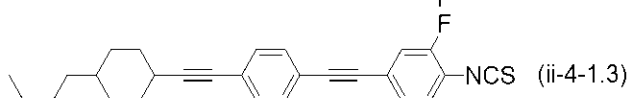
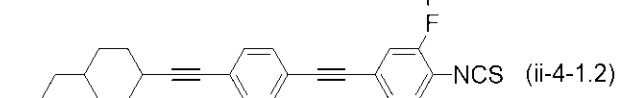
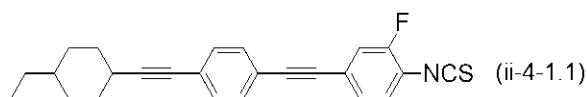


【0311】

一般式 (ii-4-1) 中、 R^{iil} 及び S^{iil} は、それぞれ独立して、上記一般式 (ii) 中の R^{iil} 及び S^{iil} とそれぞれ同じ意味を表す。

【0312】

【化135】



【0313】

一般式 (ii) で表される化合物の液晶組成物に用いる種類は、1種又は2種以上、好ましくは1～15種、好ましくは1～10種、好ましくは1～5種である。

【0314】

一般式 (ii) で表される化合物の液晶組成物100質量%中の合計含有量は、75～95質量%であることが好ましく、80～95質量%であることが好ましく、85～95質量%以上であることが好ましい。

【0315】

一般式 (ii-1)、一般式 (ii-1-1) 又は構造式 (ii-1-1.1) ～ (ii-1-1.8) で表される化合物の液晶組成物に用いる種類は、1種又は2種以上、好ましくは1～10種、好ましくは1～5種、好ましくは1～3種である。

【0316】

一般式 (ii-1)、一般式 (ii-1-1) 又は構造式 (ii-1-1.1) ～ (ii-1-1.8) で表される化合物の液晶組成物100質量%中の合計含有量は、10～50質量%であることが好ましく、15～45質量%であることが好ましく、10～40質量%であることが好ましい。

【0317】

一般式 (ii-2)、一般式 (ii-2-1) ～ (ii-2-4)、構造式 (ii-2-1.1) ～ (ii-2-1.2)、構造式 (ii-2-2.1) ～ (ii-2-2.3)、構造式 (ii-2-3.1) ～ (ii-2-3.3) 又は構造式 (ii-2-4.1) ～ (ii-2-4.3) で表される化合物の液晶組成物に用いる種類は、1種又は2種以上、好ましくは1～15種、好ましくは1～10種、好ましくは1～7種である。

10

20

30

40

50

【0318】

一般式 (ii-2)、一般式 (ii-2-1) ~ (ii-2-4)、構造式 (ii-2-1.1) ~ (ii-2-1.2)、構造式 (ii-2-2.1) ~ (ii-2-2.3)、構造式 (ii-2-3.1) ~ (ii-2-3.3) 又は構造式 (ii-2-4.1) ~ (ii-2-4.3) で表される化合物の液晶組成物 100 質量%中の合計含有量は、1~80 質量%であることが好ましく、3~75 質量%であることが好ましく、5~70 質量%であることが好ましく、5~25 質量%であることが好ましく、5~15 質量%であることが好ましい。

【0319】

一般式 (ii-3)、一般式 (ii-3-1) 又は構造式 (ii-3-1.1) ~ (ii-3-1.4) で表される化合物の液晶組成物に用いる種類は、1 種又は 2 種以上、好ましくは 1~10 種、好ましくは 1~5 種、好ましくは 1~3 種である。

10

【0320】

一般式 (ii-3)、一般式 (ii-3-1) 又は構造式 (ii-3-1.1) ~ (ii-3-1.4) で表される化合物の液晶組成物 100 質量%中の合計含有量は、1~80 質量%であることが好ましく、1~20 質量%であることが好ましく、1~15 質量%であることが好ましく、1~10 質量%であることが好ましい。

【0321】

一般式 (ii-4)、一般式 (ii-4-1) 又は構造式 (ii-4-1.1) ~ (ii-4-1.4) で表される化合物の液晶組成物に用いる種類は、1 種又は 2 種以上、好ましくは 1~10 種、好ましくは 1~5 種、好ましくは 1~3 種である。

20

【0322】

一般式 (ii-4)、一般式 (ii-4-1) 又は構造式 (ii-4-1.1) ~ (ii-4-1.4) で表される化合物の液晶組成物 100 質量%中の合計含有量は、1~25 質量%であることが好ましく、1~20 質量%であることが好ましく、5~15 質量%であることが好ましい。

【0323】

一般式 (ii) で表される化合物 (下位概念を含む) は、公知の合成方法を用いて合成することができる。

【0324】

<液晶組成物の特性値>

30

液晶相上限温度 (T_{ni}) は、液晶組成物がネマチック相から等方相へ相転移する温度である。

T_{ni} は、液晶組成物をスライドガラスとカバーガラスで挟持したプレパラートを作成し、ホットステージ上で加熱しながら偏光顕微鏡観察することで測定する。

また、示差走査熱量測定 (DSC) により測定することもできる。

単位は「℃」を用いる。

T_{ni} が高いほど高温でもネマチック相を維持することができ、駆動温度範囲を広く取ることができるが、製造時に加熱溶解させるため高温過ぎると液晶を加熱劣化させることや、高温溶解設備が必要なため好ましくない。また T_{ni} が高い程、低温での保存安定性が乏しくなる傾向であるため、高 T_{ni} と保存安定性の両立は難しい。

40

本発明に係る液晶組成物の液晶相上限温度 (T_{ni}) は、液晶表示素子の外温のコントロールが可能な屋内や自動車内などで使用する場合や屋外で使用する場合に依って適宜設定することができるが、駆動温度範囲の観点から、100℃以上であることが好ましく、110~170℃であることが好ましく、115℃~165℃であることが好ましい。

【0325】

液晶相下限温度 ($T_{\rightarrow n}$) は、液晶組成物が他の相 (ガラス相、スメクチック相、結晶相) からネマチック相へ相転移する温度である。

$T_{\rightarrow n}$ は、液晶組成物をガラスキャピラリーに充填し、-70℃の冷媒に浸漬させて液

50

晶組成物を他の相に相転移させ、温度を上昇させながら観察することで測定する。

また、示差走査熱量測定（DSC）により測定することもできる。

単位は「℃」を用いる。

$T \rightarrow n$ が低いほど低温でもネマチック相を維持することができるため、駆動温度範囲を広く取ることができる。

本発明に係る液晶組成物の液晶相下限温度（ $T \rightarrow n$ ）は、駆動温度の観点から、 10°C 以下であることが好ましく、 $-70 \sim 0^\circ\text{C}$ であることが好ましく、 $-40 \sim -5^\circ\text{C}$ であることが好ましい。

【0326】

Δn （屈折率異方性）は、後述する光学センサで用いられる近赤外領域の Δn と関連する。

Δn が大きいほど対象とする波長の光の位相変調力が大きくなるため特に光学センサ類に好適である。

25°C 、 589nm における Δn はアッペ屈折計を用いて液晶組成物の異常光屈折率（ n_e ）と常光屈折率（ n_o ）の差（ $n_e - n_o$ ）から求める。

また、位相差測定装置から、 Δn を求めることもできる。

位相差 R_e 、液晶層の厚さ d 及び Δn との間には、 $\Delta n = R_e / d$ の関係が成り立つ。

セルギャップ（ d ）が約 $3.0\text{ }\mu\text{m}$ で、アンチパラレルラビング処理を施したポリイミド配向膜付きガラスセルに液晶組成物を注入し、面内の R_e を位相差フィルム・光学材料検査装置 RETS-100（大塚電子株式会社製）で測定する。

測定は温度 25°C 、 589nm の条件で行い、単位はない。 Δn を大きくしようとする π 共役が伸長した化合物を多用する手法があるが、同時に回転粘度（ γ_1 ）も増大するので、応答速度の観点から多用することは難しい。

本発明に係る液晶組成物の 25°C 、 589nm における Δn は、波長の光の位相変調力の観点から、 0.40 以上であることが好ましく、 $0.40 \sim 0.55$ であることが好ましく、 $0.41 \sim 0.50$ であることが好ましく、 $0.43 \sim 0.48$ であることが好ましい。

【0327】

回転粘度（ γ_1 ）は、液晶分子の回転に関わる粘性率である。

γ_1 は、液晶組成物をセルギャップ約 $10\text{ }\mu\text{m}$ のガラスセルに充填、電圧を 50 V 印可し、LCM-2（東陽テクニカ製）を用いて測定することができる。

誘電率異方性が正の液晶組成物の場合は水平配向セル、誘電率異方性が負の液晶組成物の場合は垂直配向セルを使用する。

測定は温度 25°C で行い、単位は $\text{mPa} \cdot \text{s}$ を用いる。

γ_1 が小さいほど液晶組成物の応答速度が速くなるためいずれの液晶表示素子においても好適である。

本発明に係る液晶組成物の 25°C における液晶組成物の回転粘度（ γ_1 ）は、応答速度の観点から、 $150 \sim 1200\text{ mPa} \cdot \text{s}$ であることが好ましく、 $200 \sim 900\text{ mPa} \cdot \text{s}$ であることが好ましく、 $250 \sim 700\text{ mPa} \cdot \text{s}$ であることが好ましい。

【0328】

高周波数領域における誘電率異方性は、高いほど目的周波数帯の電波に対する位相変調力が大きくなるため、特にアンテナ用途に好適である。

また、アンテナ用途では高周波数領域における誘電正接が小さいほど目的周波数帯のエネルギー損失が小さくなるため好適である。

本発明に係る液晶組成物においては、高周波数領域の特性を代表して 10 GHz における誘電率異方性 $\Delta \epsilon_r$ 及び誘電正接の平均値 $\tan \delta_{iso}$ を測定した。

$\Delta \epsilon_r = (\epsilon_{r\parallel} - \epsilon_{r\perp})$ であり、 $\tan \delta_{iso} = (2\epsilon_{r\perp} \tan \delta_{\perp} + \epsilon_{r\parallel} \tan \delta_{\parallel}) / (2\epsilon_{r\perp} + \epsilon_{r\parallel})$ である。

ここで、「 ϵ_r 」は誘電定数、「 $\tan \delta$ 」は誘電正接であり、添え字の「 $\parallel$ 」は液晶の配向方向に対して並行方向、「 $\perp$ 」は液晶の配向方向に対して垂直方向の成分であるこ

10

20

30

40

50

とを表す。

【0329】

$\Delta \epsilon_r$ 及び $\tan \delta_{iso}$ は以下の方法により測定することができる。

まず、液晶組成物を、ポリテトラフルオロエチレン（PTFE）製の毛細管へと導入する。

ここで用いた毛細管は 0.80 mm の内半径及び 0.835 mm の外半径を有し、有効長は 4.0 cm である。

液晶組成物を封入した毛細管を、10 GHz の共鳴周波数を有する空洞共振器（EMラボ株式会社製）の中心へと導入する。

この空洞共振器は 30 mm の直径、26 mm 幅の外形を有する。

そして信号を入力し、出力された信号の結果を、ネットワーク・アナライザ（キーサイト・テクノロジー株式会社製）を用いて記録する。

液晶組成物を封入しない PTFE 毛細管の共鳴周波数等と液晶組成物を封入した PTFE 毛細管の共鳴周波数等の差を用いて、10 GHz における誘電定数（ ϵ_r ）及び損失角（ δ ）を決定する。

そして、得られた δ の正接が誘電正接（ $\tan \delta$ ）である。

なお、液晶組成物を封入した PTFE 毛細管を用いた共鳴周波数等は、液晶分子の配向制御により、液晶分子の配向方向に垂直な特性成分の値及び平行な特性成分の値として求める。

液晶分子を PTFE 毛細管の垂直方向（有効長方向に対して垂直）に配列させたり、平行方向（有効長方向に対して平行）に配列させたりするために、永久磁石又は電磁石の磁界を用いる。

磁界は、例えば、磁極間距離 45 mm、中央付近の磁界の強さは 0.23 テスラである。

液晶組成物を封入した PTFE 毛細管を磁界に対して並行又は垂直に回転させることで所望の特性成分を得る。

測定は温度 25℃で行い、 $\Delta \epsilon_r$ 及び $\tan \delta_{iso}$ 共に単位はない。

【0330】

本発明に係る液晶組成物の 25℃における $\Delta \epsilon_r$ はより大きいことが好ましいが、GHz 帯における位相変調力の観点から、0.90 以上であることが好ましく、0.90～1.50 であることが好ましく、0.95～1.40 であることが好ましく、1.00～1.35 であることが好ましい。

本発明に係る液晶組成物の 25℃における $\tan \delta_{iso}$ はより小さいことが好ましいが、GHz 帯における損失の観点から、0.025 以下であることが好ましく、0.001～0.025 であることが好ましく、0.003～0.020 であることが好ましく、0.005～0.017 であることが好ましく、0.007～0.015 であることが好ましく、0.008～0.013 であることが好ましく、0.009～0.012 が好ましい。

【0331】

（液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器及びアンテナ）

以下、本発明に係る液晶組成物を用いた液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器、アンテナについて説明する。

【0332】

本発明に係る液晶表示素子は、上述の液晶組成物を用いたことを特徴とし、好ましくはアクティブマトリクス方式又はパッシブマトリクス方式で駆動する。

また、本発明に係る液晶表示素子は、上述の液晶組成物の液晶分子の配向方向を可逆的に変えることにより誘電率を可逆的にスイッチングする液晶表示素子であることが好ましい。

【0333】

本発明に係るセンサは、上述の液晶組成物を用いたことを特徴とし、例えば、その態様として、電磁波、可視光又は赤外光を利用する測距センサ、温度変化を利用する赤外線セ

10

20

30

40

50

ンサ、コレステリック液晶のピッチ変化による反射光波長変化を利用する温度センサ、反射光波長変化を利用する圧力センサ、組成変化による反射光波長変化を利用する紫外線センサ、電圧、電流による温度変化を利用する電気センサ、放射線粒子の飛跡に伴った温度変化を利用する放射線センサ、超音波の機械的振動による液晶分子配列変化を利用する超音波センサ、温度変化による反射光波長変化又は電界による液晶分子配列変化を利用する電磁界センサ等が挙げられる。

測距センサとしては、光源を用いる L i D A R (L i g h t D e t e c t i o n A n d R a n g i n g) 用であることが好ましい。

L i D A R としては、人工衛星用、航空機用、無人航空機（ドローン）用、自動車用、鉄道用、船舶用が好ましい。

自動車用としては、自動運転自動車用が特に好ましい。

光源は L E D 又はレーザであることが好ましく、レーザであることが好ましい。

L i D A R に用いられる光は赤外光であることが好ましく、波長は 8 0 0 ~ 2 0 0 0 n m であることが好ましい。

特に、9 0 5 n m 又は 1 5 5 0 n m の波長の赤外レーザが好ましい。

用いる光検出器のコストや全天候における感度を重視する場合は 9 0 5 n m の赤外レーザが好ましく、人間の視覚に関する安全性を重視する場合には 1 5 5 0 n m の赤外レーザが好ましい。

本発明に係る液晶組成物は、高い Δn を示すことから、可視光、赤外光及び電磁波領域での位相変調力が大きく、検出感度に優れたセンサを提供できる。

【 0 3 3 4 】

本発明に係る液晶レンズは、上述の液晶組成物を用いたことを特徴とし、例えば、その態様の一つとして、第 1 の透明電極層と、第 2 の透明電極層と、前記第 1 の透明電極層及び前記第 2 の透明電極層の間に設けられた上述の液晶組成物を含む液晶層と、前記第 2 の透明電極層及び前記液晶層の間に設けられた絶縁層と、前記絶縁層及び前記液晶層の間に設けられた高抵抗層とを有する。

本発明に係る液晶レンズは、例えば、2 D、3 D の切り替えレンズ、カメラの焦点調節用のレンズなどとして利用される。

【 0 3 3 5 】

本発明に係る光通信機器は、上述の液晶組成物を用いたことを特徴とし、例えば、その態様の一つとして、反射層（電極）の上に、複数の画素の各々を構成する液晶が 2 次元状に配置された液晶層を有する構成の L C O S (L i q u i d c r y s t a l o n s i l i c o n) が挙げられる。

本発明に係る光通信機器は、例えば、空間位相変調器として利用される。

【 0 3 3 6 】

本発明に係るアンテナは、上述の液晶組成物を用いたことを特徴とする。

本発明に係るアンテナは、より具体的には、複数のスロットを備えた第 1 基板と、前記第 1 基板と対向し、給電部が設けられた第 2 基板と、前記第 1 基板と前記第 2 基板との間に設けられた第 1 誘電体層と、前記複数のスロットに対応して配置される複数のパッチ電極と、前記パッチ電極が設けられた第 3 基板と、前記第 1 基板と前記第 3 基板との間に設けられた液晶層とを備え、前記液晶層が、上述の液晶組成物を含有する。

本発明に係る液晶組成物を用いることにより、熱等の外部刺激に対して高い信頼性を有するアンテナを提供できる。

これにより、マイクロ波又はミリ波の電磁波に対してより大きな位相制御を可能とするアンテナを提供できる。

本発明に係るアンテナは、衛星通信に使用される K a 帯周波数又は K 帯周波数もしくは K u 帯周波数において動作することが好ましい。

本発明に係るアンテナは、ラジアルラインスロットアレイと、パッチアンテナアレイとを組み合わせた構成であることが好ましい。

本発明に係るアンテナの構造としては、例えば国際公開第 2 0 2 1 / 1 5 7 1 8 9 号パ

10

20

30

40

50

ンフレット等に記載されている事項等を参酌し、適用することができる。

【実施例】

【0337】

以下、実施例を挙げて本発明を更に記述するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

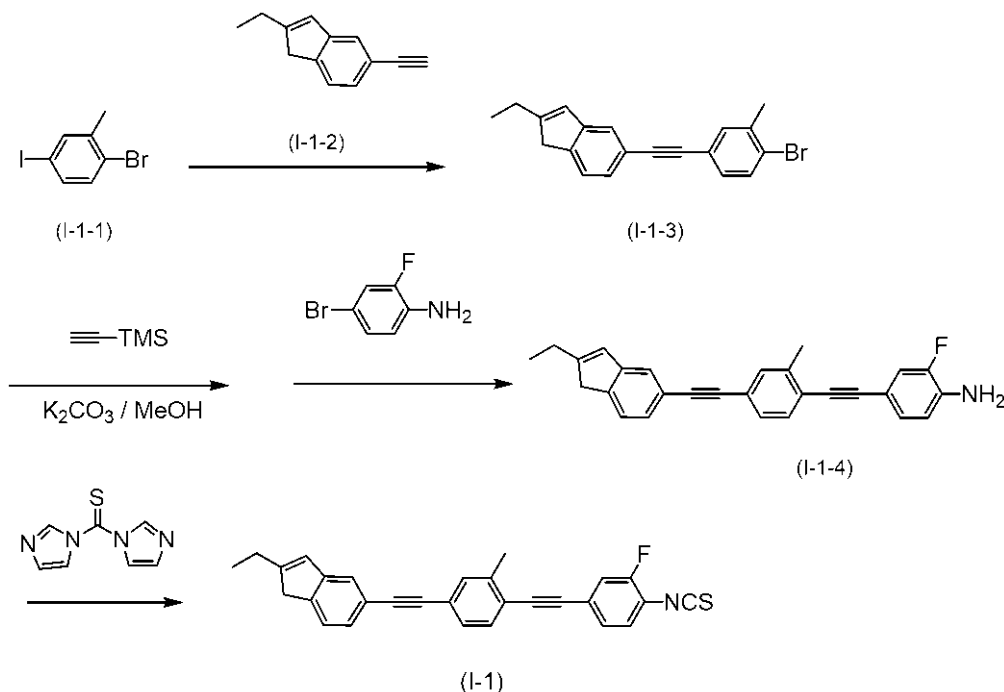
以下の実施例及び比較例の組成物は各化合物を表中の割合で含有し、含有量は「質量％」で記載した。

なお、シス体とトランス体を取りうる化合物は特に断りがない限りトランス体を表す。

(実施例1) 式(I-1)で表される化合物の製造

【0338】

【化136】



【0339】

窒素雰囲気下、反応容器に式(I-1-1)で表される化合物30.0g、ヨウ化銅(I)0.75g、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド1.5g、トリエチルアミン50mL、テトラヒドロフラン100mLを加えた。次に、室温で攪拌しながら、式(I-1-2)で表される化合物20gをテトラヒドロフラン100mLに溶解させた溶液を滴下し、室温で2時間攪拌した。そして、反応終了後、反応液に10質量％塩酸を注ぎ、トルエンで抽出した。有機層を食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、トルエン)及び再結晶(トルエン/ヘキサン=1/3)により精製を行うことによって、式(I-1-3)で表される化合物29.0gを得た。

次に、窒素雰囲気下、反応容器に式(I-1-3)で表される化合物29.0g、ヨウ化銅(I)0.7g、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド1.25g、トリエチルアミン50mL、N,N-ジメチルホルムアミド150mLを加えた。そして、70℃で加熱しながら、トリメチルシリルアセチレン8.4gをN,N-ジメチルホルムアミド25mLに溶解させた溶液を滴下し、70℃で2時間攪拌した。反応終了後、反応液に10質量％塩酸を注ぎ、トルエンで抽出した。有機層を食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、トルエン)及び溶媒留去を行った。更に炭酸カリウム10gを加え、メタノール200mLを加えた後、反応容器を50℃に加熱し2時間反応させた。そして、反応液をトルエンで抽出し、有機層を食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、トルエン)及び溶媒留去を行った。ついで、この反応物に4-ブロモ-2-フルオロアニリン16.5g、ヨウ化銅(I)0.65g、

テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム 2.0 g、トリエチルアミン 50 mL、N, N-ジメチルホルムアミド 150 mL を加えた。反応容器を 85℃ に加熱し、更に 3 時間撹拌した。反応終了後、反応液に飽和塩化アンモニウム水溶液を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を食塩水で洗浄した後、トルエンによる再結晶を行うことによって、式（I-1-4）で表される化合物 9.3 g を得た。

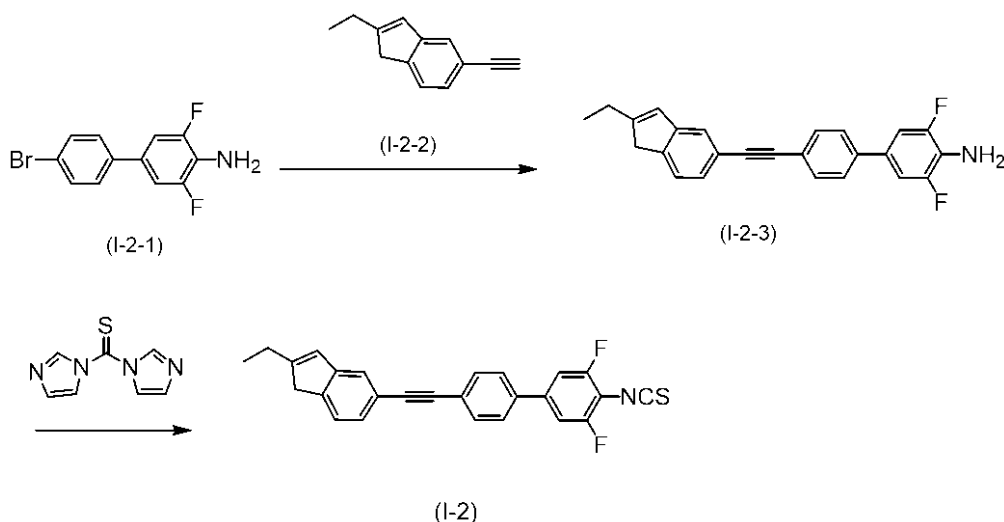
反応容器に式（I-1-4）で表される化合物 27 g、ジクロロメタン 100 mL、1, 1-チオカルボニルジイミダゾール 23 g 加え、2 時間加熱還流行った。反応終了後、有機層を食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、トルエン）及び再結晶（トルエン／ヘキサン＝2／1）により精製を行うことによって、式（I-1）で表される化合物 25.5 g を得た。

MS（EI）：m/z = 433

（実施例 2）式（I-2）で表される化合物の製造

【0340】

【化137】



【0341】

窒素雰囲気下、反応容器に式（I-2-1）で表される化合物 28.0 g、ヨウ化銅（I）0.75 g、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム 2.0 g、トリエチルアミン 50 mL、N, N-ジメチルホルムアミド 150 mL を加えた。反応容器を 85℃ で加熱しながら、式（I-2-2）で表される化合物 20.0 g を N, N-ジメチルホルムアミド 50 mL に溶解させた溶液を滴下し、85℃ で 3 時間撹拌した。反応終了後、反応液に飽和塩化アンモニウム水溶液を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、トルエン）及び再結晶（トルエン／ヘキサン＝3／1）により、式（I-2-3）で表される化合物 28 g を得た。

次いで、反応容器に式（I-2-3）で表される化合物 28 g、ジクロロメタン 100 mL、1, 1-チオカルボニルジイミダゾール 18 g 加え、2 時間加熱還流行った。反応終了後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、トルエン）及び再結晶（トルエン／ヘキサン＝2／1）により精製を行うことによって、式（I-2）で表される化合物 28.5 g を得た。

MS（EI）：m/z = 413

（実施例 3）式（I-3）で表される化合物の製造

【0342】

10

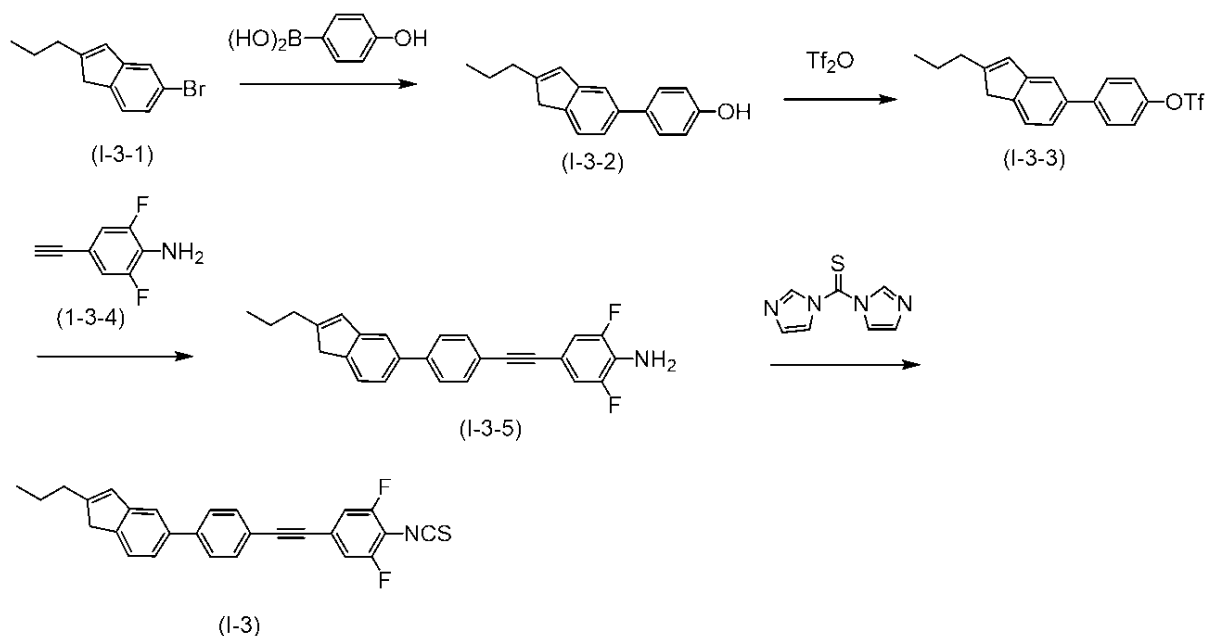
20

30

40

50

【化 1 3 8】



10

【0 3 4 3】

窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-3-1) で表される化合物 22.0 g、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 1.1 g、炭酸カリウム 20 g、p-ヒドロキシフェニルホウ酸 14 g、テトラヒドロフラン 150 mL、水 25 mL を加え、反応容器を 70℃ に加熱した。反応終了後、反応液に 10 質量% 塩酸を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、溶媒を留去し、ヘキサンによる分散洗浄を行うことによって、式 (I-3-2) で表される化合物 20 g を得た。

20

次に、窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-3-2) で表される化合物 20 g、ジクロロメタン 150 mL、ピリジン 10 g を加え、氷水バスにより 10℃ 以下に冷却した。次いで、トリフルオロメタンスルホン酸無水物 25 g のジクロロメタン溶液 50 mL をゆっくり滴下した。滴下終了後、室温で 2 時間攪拌した。反応終了後、反応液に 10 質量% 塩酸を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を食塩水で洗浄した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン) により精製し、式 (I-3-3) で表される化合物 30.0 g を得た。

30

更に、窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-3-3) で表される化合物 30.0 g、ヨウ化銅 (I) 0.6 g、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 1.5 g、トリエチルアミン 75 mL、N, N-ジメチルホルムアミド 150 mL を加えた。反応容器を 85℃ で加熱しながら、式 (I-3-4) で表される化合物 14.7 g を N, N-ジメチルホルムアミド 50 mL に溶解させた溶液を滴下し、85℃ で 3 時間攪拌した。反応終了後、反応液に飽和塩化アンモニウム水溶液を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、トルエン) 及び再結晶 (トルエン/ヘキサン = 3/1) により、式 (I-3-5) で表される化合物 23.7 g を得た。

40

次いで、反応容器に式 (I-3-5) で表される化合物 23.7 g、ジクロロメタン 100 mL、1, 1-チオカルボニルジイミダゾール 18 g を加え、2 時間加熱還流を行った。反応終了後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、トルエン) 及び再結晶 (トルエン/ヘキサン = 2/1) により精製を行うことによって、式 (I-3) で表される化合物 22.5 g を得た。

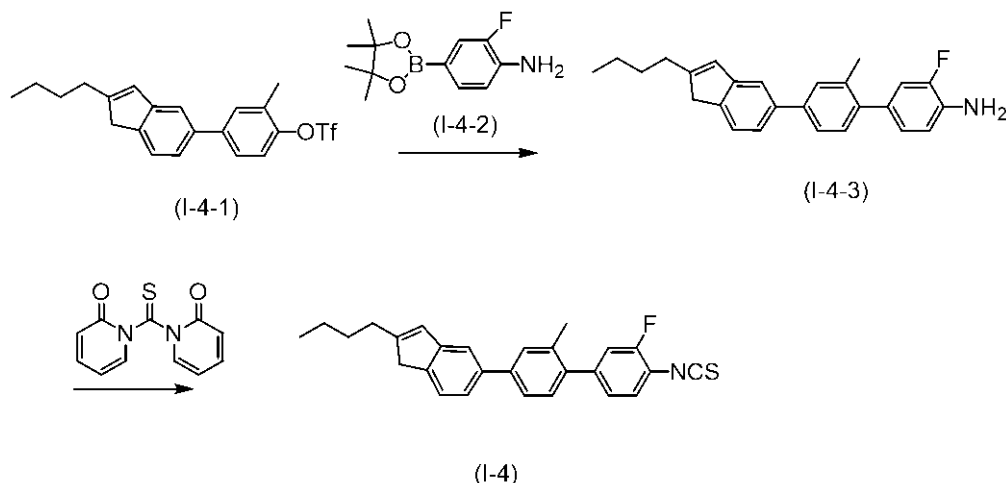
MS (EI) : $m/z = 427$

(実施例 4) 式 (I-4) で表される化合物の製造

【0 3 4 4】

50

【化 1 3 9】



10

【0 3 4 5】

窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-4-1) で表される化合物 10.0 g、式 (I-4-2) で表される化合物 6.4 g、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 0.3 g、炭酸カリウム 5 g、テトラヒドロフラン 50 mL、水 10 mL を加え、反応容器を 70 °C に加熱した。反応終了後、反応液に 10 質量% 塩酸を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、トルエン)、及び再結晶 (トルエン/ヘキサン = 1/1) を行うことによって、式 (I-4-3) で表される化合物 7.2 g を得た。

20

次に、反応容器に式 (I-4-3) で表される化合物 7.2 g、ジクロロメタン 50 mL、1,1-チオカルボニルジ 2 (1H) ピリドン 5.4 g を加え、2 時間室温で反応させた。反応終了後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、トルエン) 及び再結晶 (トルエン/ヘキサン = 2/1) により精製を行うことによって、式 (I-4) で表される化合物 6.6 g を得た。

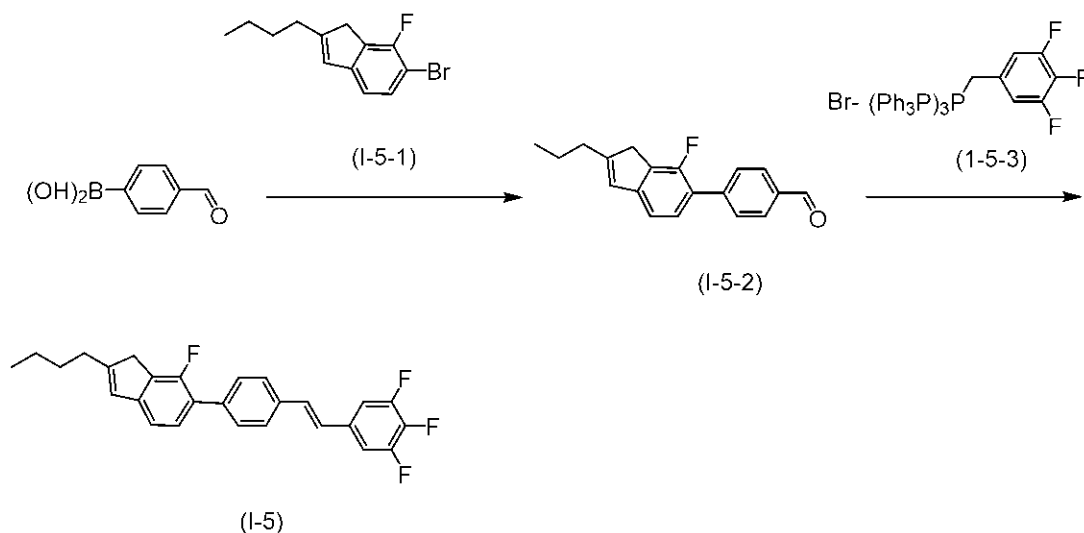
MS (EI) : m/z = 413

(実施例 5) 式 (I-5) で表される化合物の製造

30

【0 3 4 6】

【化 1 4 0】



40

【0 3 4 7】

窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-5-1) で表される化合物 15.0 g、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 0.6 g、炭酸カリウム 12 g、4- (ホルミル

50

フェニル) ホウ酸 8 g、テトラヒドロフラン 100 mL、水 15 mL を加え、反応容器を 70 °C に加熱した。反応終了後、反応液に 10 質量% 塩酸を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、溶媒を留去し、ヘキサンによる分散洗浄を行うことによって、式 (I-5-2) で表される化合物 12.5 g を得た。

次に、窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-5-3) で表される化合物 57 g、テトラヒドロフラン 150 mL を加え、反応液は 0 °C 以下に冷却した。ターシャリーブトキシカリウム 7 g を加え、30 分攪拌した。ジクロロメタン 150 mL、ピリジン 10 g を加え、氷水バスにより 10 °C 以下に冷却した。次いで、式 (I-5-2) で表される化合物 12.5 g を溶解性させたテトラヒドロフラン溶液 50 mL をゆっくり滴下した。滴下終了後、室温で 2 時間攪拌した。反応終了後、反応液に 10 質量% 塩酸を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、トルエン) 及び再結晶 (トルエン/ヘキサン = 2/1) により、式 (I-5)

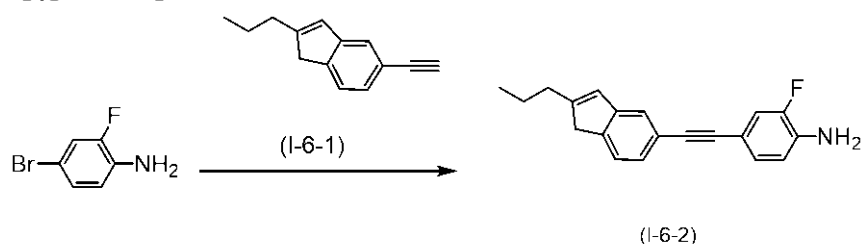
10

MS (EI) : m/z = 422

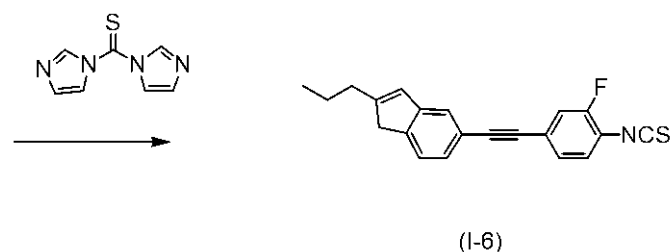
(実施例 6) 式 (I-6) で表される化合物の製造

【0348】

【化141】



20



30

【0349】

実施例 2 において式 (I-2-1) で表される化合物を 4-ブromo-3-フルオロアニリン、式 (I-2-2) で表される化合物を式 (I-6-1) で表される化合物に置き換えた以外は同様の方法によって、式 (I-6) で表される化合物を製造した。

MS (EI) : m/z = 333

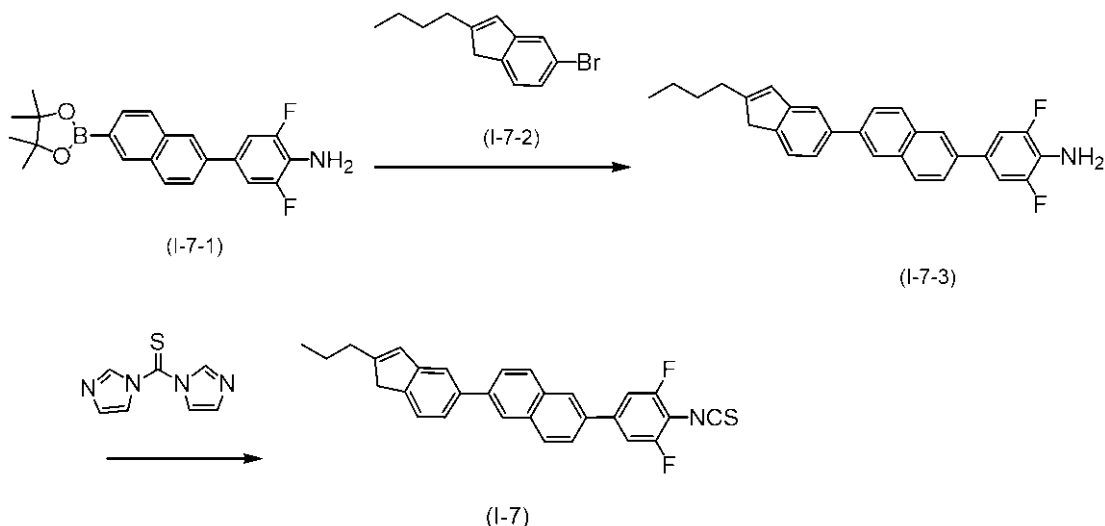
(実施例 7) 式 (I-7) で表される化合物の製造

【0350】

40

50

【化 1 4 2】



10

【0 3 5 1】

窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-7-1) で表される化合物 10.0 g、(I-7-2) で表される化合物 6.6 g、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 300 mg、炭酸カリウム 5.5 g、テトラヒドロフラン 75 mL、水 10 mL を加え、反応容器を 70℃ に加熱した。反応終了後、反応液に飽和塩化アンモニウム水溶液を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、トルエンによる再結晶を行うことによって、式 (I-7-3) で表される化合物 8.0 g を得た。

20

次に、反応容器に式 (I-7-3) で表される化合物 8.0 g、ジクロロメタン 40 mL、1,1-チオカルボニルジイミダゾール 3.6 g を加え、2 時間加熱還流を行った。反応終了後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、トルエン)及び再結晶(トルエン/ヘキサン=3/1)により精製を行うことによって、式 (I-7) で表される化合物 8.8 g を得た。

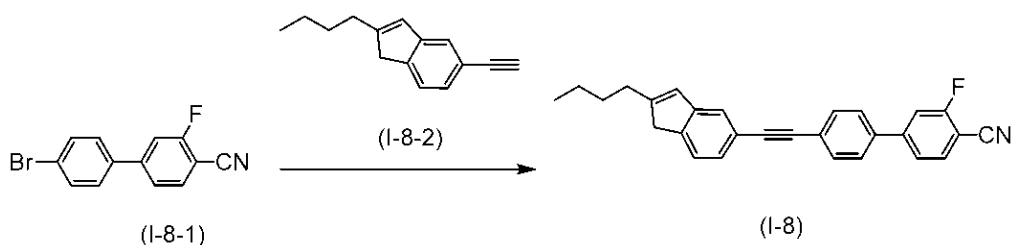
MS (EI) : $m/z = 453$

(実施例 8) 式 (I-8) で表される化合物の製造

30

【0 3 5 2】

【化 1 4 3】



【0 3 5 3】

40

窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-8-1) で表される化合物 27.0 g、ヨウ化銅 (I) 0.75 g、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 2.1 g、トリエチルアミン 75 mL、N,N-ジメチルホルムアミド 100 mL を加えた。反応容器を 85℃ で加熱しながら、式 (I-8-2) で表される化合物 22.0 g を N,N-ジメチルホルムアミド 50 mL に溶解させた溶液を滴下し、85℃ で 6 時間攪拌した。反応終了後、反応液に飽和塩化アンモニウム水溶液を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、トルエン)及び再結晶(トルエン/ヘキサン=2/1)により精製を行うことによって、式 (I-8) で表される化合物 30.5 g を得た。

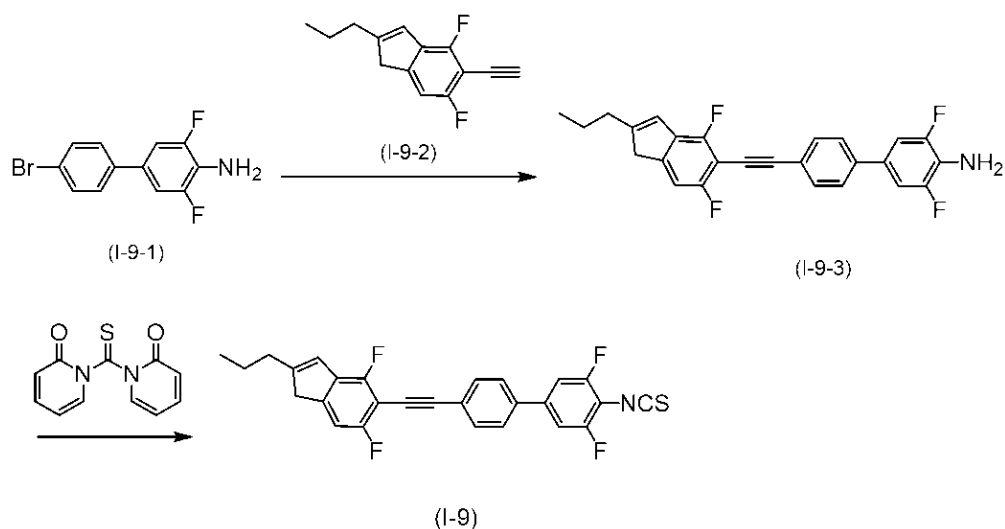
MS (EI) : $m/z = 391$

50

(実施例 9) 式 (I-9) で表される化合物の製造

【0354】

【化144】



10

【0355】

窒素雰囲気下、反応容器に式 (I-9-1) で表される化合物 29.0 g、ヨウ化銅 (I) 0.75 g、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 2.0 g、トリエチルアミン 50 mL、N, N-ジメチルホルムアミド 150 mL を加えた。反応容器を 85 °C で加熱しながら、式 (I-9-2) で表される化合物 24.0 g を N, N-ジメチルホルムアミド 50 mL に溶解させた溶液を滴下し、85 °C で 3 時間攪拌した。反応終了後、反応液に飽和塩化アンモニウム水溶液を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、トルエン) 及び再結晶 (トルエン/ヘキサン = 3/1) により、式 (I-9-3) で表される化合物 33 g を得た。

20

次いで、反応容器に式 (I-9-4) で表される化合物 33 g、ジクロロメタン 120 mL、1, 1-チオカルボニルジ 2 (1H) ピリドン 22 g 加え、2 時間室温で反応させた。反応終了後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、トルエン) 及び再結晶 (トルエン/ヘキサン = 2/1) により精製を行うことによって、式 (I-9) で表される化合物 28 g を得た。

30

MS (EI) : m/z = 463

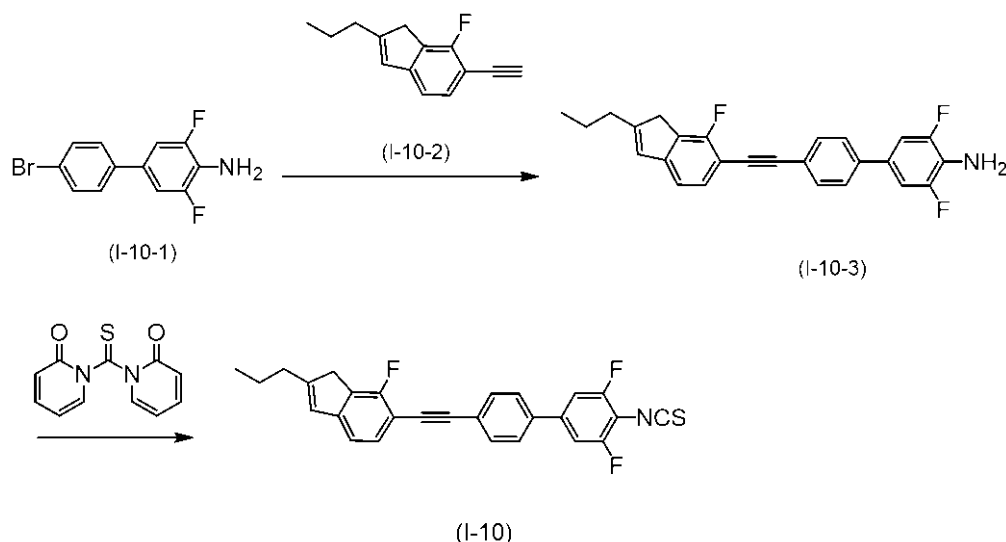
(実施例 10) 式 (I-10) で表される化合物の製造

【0356】

40

50

【化 1 4 5】



【0 3 5 7】

窒素雰囲気下、反応容器に式（I-10-1）で表される化合物 29.0 g、ヨウ化銅（I）0.75 g、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム 2.0 g、トリエチルアミン 50 mL、N,N-ジメチルホルムアミド 150 mL を加えた。反応容器を 85℃ で加熱しながら、式（I-10-2）で表される化合物 20.0 g を N,N-ジメチルホルムアミド 50 mL に溶解させた溶液を滴下し、85℃ で 3 時間攪拌した。反応終了後、反応液に飽和塩化アンモニウム水溶液を注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、トルエン）及び再結晶（トルエン／ヘキサン＝3／1）により、式（I-10-3）で表される化合物 31 g を得た。

次いで、反応容器に式（I-10-3）で表される化合物 33 g、ジクロロメタン 120 mL、1,1-チオカルボニルジ（1H）ピリドン 21 g を加え、2 時間室温で反応させた。反応終了後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、トルエン）及び再結晶（トルエン／ヘキサン＝2／1）により精製を行うことによって、式（I-10）で表される化合物 23 g を得た。

MS（EI）：m/z = 445

【0 3 5 8】

（液晶組成物の調製と評価）

以下の物性値を示す母体液晶（LC-1）を調製した。値はいずれも実測値である。

T_{n-i} （ネマチック相－等方性液体相転移温度）：74.0℃

$\Delta\epsilon$ （25℃、1 kHz における誘電率異方性）：5.11

Δn （25℃、589 nm における屈折率異方性）：0.141

γ_1 （25℃ における回転粘性係数）：107 mPa・s

【0 3 5 9】

母体液晶（LC-1）に対して、実施例で得た化合物（I-1）～（I-10）及びインデン構造を採用しない式（C-1）～（C-2）で表される化合物を添加し、液晶組成物 100 質量％中に各化合物をそれぞれ 0 質量％、5 質量％、10 質量％含む液晶組成物を調製した。

そして、最小二乗法を用いて各化合物 100 質量％における Δn 及び $\Delta\epsilon_r$ の外挿値を求めた。結果を表 1 に示す。

【0 3 6 0】

（保存安定性試験）

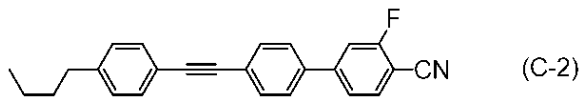
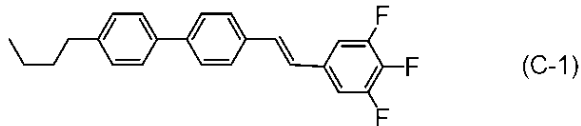
母体液晶（LC-1）に対して、実施例で得た化合物（I-1）～（I-10）及びインデン構造を採用しない式（C-1）～（C-2）で表される化合物を添加し、液晶組成

物 1 0 0 質量%中に各化合物をそれぞれ 5 質量%含む液晶組成物を調整した。

1 mL のサンプル瓶（マルエム社製）に調整した液晶組成物を 0.5 g 秤量し、150℃、250 Pa で 10 分間脱気による脱泡を実施した。その後乾燥窒素を用いてパージし、備え付けの蓋をした。これを 0℃の温度制御式恒温槽（エスベック社製、SH-241）の中で 2 週間にわたって保存し、1 週間ごとに目視にて液晶組成物の結晶化の発生を確認した。1 週目の目視にて結晶化が確認されなかったものを「○」、結晶化が確認されたものを「×」とした。結果を表 1 に示す。

【0361】

【化146】



【0362】

【表1】

表1	化合物	Δn	$\Delta \varepsilon_r$	保存安定性
実施例9	(I-1)	0.552	0.392	○
実施例10	(I-2)	0.525	0.380	○
実施例11	(I-3)	0.521	0.379	○
実施例12	(I-4)	0.375	0.345	○
実施例13	(I-5)	0.332	0.330	○
実施例14	(I-6)	0.440	0.363	○
実施例15	(I-7)	0.395	0.355	○
実施例16	(I-8)	0.382	0.331	○
実施例17	(I-9)	0.485	0.365	○
実施例18	(I-10)	0.510	0.368	○
比較例1	(C-1)	0.305	0.275	○
比較例2	(C-2)	0.295	0.260	×

【0363】

実施例 13 及び比較例 1、実施例 16 及び比較例 2 より、インデン構造とイソチオシアネート基（-NCS）基をはじめとする所定の側鎖構造を有する一般式（i）で表される化合物は、 Δn 及び $\Delta \varepsilon_r$ が大きいことが確認された。

とりわけ、イソチオシアネート基（-NCS）を有する化合物は、 Δn として 0.35 以上を示した。

また、インデン構造とイソチオシアネート基（-NCS）基をはじめとする所定の側鎖構造を有する一般式（i）で表される化合物は、低温での保存性が良好であることも確認された。

【0364】

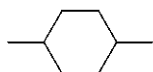
また、一般式（i）で表される化合物を用いて表 4 に記載の LC-01～02 を調製した。

なお、化合物の記載は以下の略号を用い、シス体とトランス体を取りうる化合物は特に断りがない限りトランス体を表す。

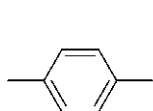
<環構造>

【0 3 6 5】

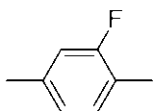
【化 1 4 7】



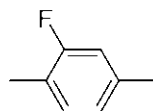
Cy



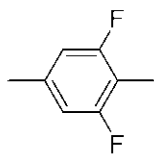
Ph



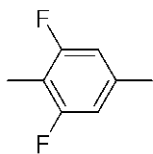
Ph1



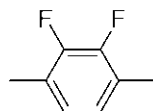
Ph2



Ph3

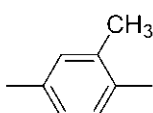


Ph4

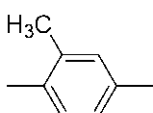


Ph5

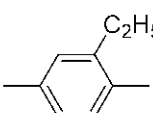
10



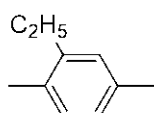
Pm1



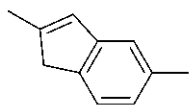
Pm2



Pe1



Pe2



le

20

【0 3 6 6】

<末端構造>

【0 3 6 7】

30

40

50

【表 2】

略号	化学構造
$-n$	$-C_nH_{2n+1}$
$n-$	$C_nH_{2n+1}-$
$-On$	$-O-C_nH_{2n+1}$
$nO-$	$C_nH_{2n+1}-O-$
$-Sn$	$-S-C_nH_{2n+1}$
$nS-$	$C_nH_{2n+1}-S-$
$-V$	$-CH=CH_2$
$V-$	$CH_2=CH-$
$-V1$	$-CH=CH-CH_3$
$1V-$	$CH_3-CH=CH-$
$-2V$	$-CH_2-CH_2-CH=CH_2$
$V2-$	$CH_2=CH-CH_2-CH_2-$
$-2V1$	$-CH_2-CH_2-CH=CH-CH_3$
$1V2-$	$CH_3-CH=CH-CH_2-CH_2-$
$-OCF_3$	$-O-CF_3$
CF_3O-	CF_3-O-
$-H$	$-H$
$H-$	$H-$
$-CN$	$-CN$
$CN-$	$CN-$
$-NCS$	$-NCS$
$NCS-$	$NCS-$
$-(1)4$	$-CH_2CH_2CH(CH_3)CH_3$
$4(1)-$	$CH_3CH(CH_3)CH_2CH_2-$

10

20

(ただし、表中の n は自然数である。)

【0368】

30

<連結構造>

【0369】

【表 3】

略号	化学構造
$-n-$	$-C_nH_{2n}-$
$-nO-$	$-C_nH_{2n}-O-$
$-On-$	$-O-C_nH_{2n}-$
$-COO-$	$-C(=O)-O-$
$-OCO-$	$-O-C(=O)-$
$-V-$	$-CH=CH-$
$-nV-$	$-C_nH_{2n}-CH=CH-$
$-Vn-$	$-CH=CH-C_nH_{2n}-$
$-T-$	$-C\equiv C-$
$-CF_2O-$	$-CF_2-O-$
$-OCF_2-$	$-O-CF_2-$
$-Az-$	$-N=N-$

40

(ただし、表中の n は自然数である。)

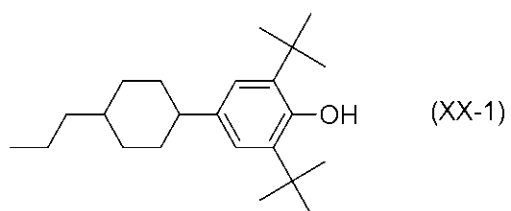
【0370】

50

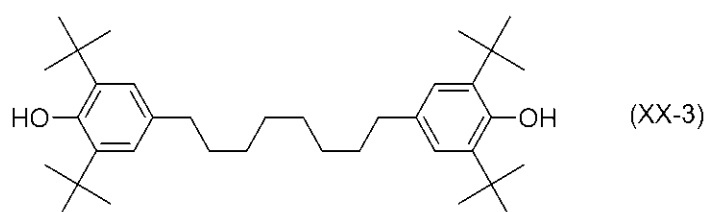
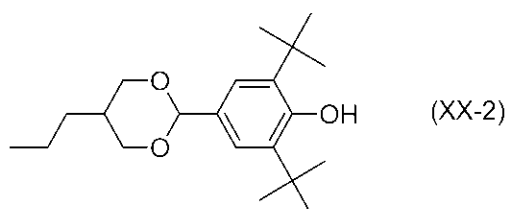
(ヒンダードフェノール系酸化防止剤)

【 0 3 7 1 】

【 化 1 4 8 】



10



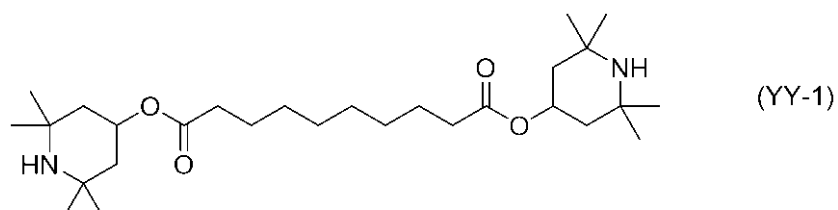
20

【 0 3 7 2 】

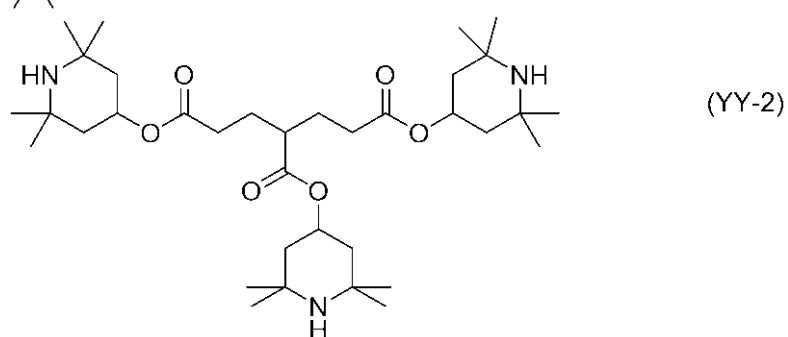
(ヒンダードアミン系光安定剤)

【 0 3 7 3 】

【 化 1 4 9 】



30



40

【 0 3 7 4 】

50

【表 4】

表4	L C - 0 1	L C - 0 2
2-le-Ph-T-Ph3-NCS		6
3-le-Ph-T-Ph3-NCS	10	
2-le-T-Ph-Ph3-NCS		4
2-Ph-T-Ph3-NCS		8
3-Ph-T-Ph3-NCS	15	17
5-Ph-T-Ph3-NCS	10	10
4-Ph-Ph-T-Ph3-NCS	10	
5-Ph-Ph-T-Ph3-NCS	20	
3-Cy-Ph-T-Ph3-NCS	15	
4-Cy-Ph-T-Ph3-NCS	10	
5-Cy-Ph-T-Ph3-NCS	10	
3-Cy-T-Ph-T-Ph3-NCS		5
4-Cy-T-Ph-T-Ph3-NCS		5
5-Ph3-T-Ph-Ph3-NCS		5
4-T-Ph1-Ph-T-Ph3-NCS		8
5-T-Ph1-Ph-T-Ph3-NCS		8
4-T-Pm2-Ph-T-Ph3-NCS		10
4-T-Ph2-Ph-T-Ph3-NCS		7
5-T-Ph2-Ph-T-Ph3-NCS		7
合計(質量%)	100	100

【 0 3 7 5 】

(実施例 1 8 ～ 3 1)

L C - 0 1 ～ 0 2 と、ヒンダードフェノール系酸化防止剤 (X X - 1) ～ (X X - 3) と、ヒンダードアミン系光安定剤 (Y Y - 1) ～ (Y Y - 2) とを用いて表 5 ～ 7 に記載された液晶組成物を調製し、その物性値を測定し、＜保存性試験＞を行った。結果を表 5 ～ 7 に示す。

＜保存性試験＞

1 m L のサンプル瓶 (マルエム社製) に液晶組成物を 0 . 5 g 秤量し 1 5 0 ～ 2 5 0 P a で 1 0 分間脱気による脱泡を実施した。その後乾燥窒素を用いてパージし、備え付けの蓋をした。これを 2 5 ° C の温度制御式恒温槽 (エスペック社製、 S H - 2 4 1) の中で 2 週間にわたって保存し、 1 週間ごとに目視にて液晶組成物の結晶化の発生を確認した。

【 0 3 7 6 】

【表 5】

表5	実施例18	実施例19
液晶組成物	L C - 0 1	L C - 0 2
T_{ni} [°C]	131	163
Δn	0.463	0.444
$\Delta \varepsilon_r$	1.265	1.250
$\tan \delta_{iso}$	0.013	0.011
保存性(25°C)	2週間 結晶化なし	2週間 結晶化なし

【 0 3 7 7 】

【表 6】

表 6		実施例 2 0	実施例 2 1	実施例 2 2	実施例 2 3	実施例 2 4	実施例 2 5
液晶組成物 [質量%]	L C - 0 1	99.70	99.80	99.80	99.80	99.75	99.75
添加剤 [質量%]	X X - 1			0.20			
	X X - 2				0.20	0.20	
	X X - 3	0.30	0.15				0.20
	Y Y - 1					0.05	0.05
	Y Y - 2		0.05				
合計[質量%]		100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
T_{ni} [°C]		131	131	131	131	131	131
Δn		0.463	0.463	0.463	0.463	0.463	0.463
$\Delta \epsilon_r$		1.265	1.265	1.265	1.265	1.265	1.265
$\tan \delta_{iso}$		0.013	0.013	0.013	0.013	0.013	0.013
保存性(25°C)		2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし

10

【 0 3 7 8 】

【表 7】

表 7		実施例 2 6	実施例 2 7	実施例 2 8	実施例 2 9	実施例 3 0	実施例 3 1
液晶組成物 [質量%]	L C - 0 2	99.70	99.80	99.80	99.80	99.75	99.75
添加剤 [質量%]	X X - 1			0.20			
	X X - 2				0.20	0.20	
	X X - 3	0.30	0.15				0.20
	Y Y - 1					0.05	0.05
	Y Y - 2		0.05				
合計[質量%]		100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
T_{ni} [°C]		163	163	163	163	163	163
Δn		0.444	0.444	0.444	0.444	0.444	0.444
$\Delta \epsilon_r$		1.250	1.250	1.250	1.250	1.250	1.250
$\tan \delta_{iso}$		0.011	0.011	0.011	0.011	0.011	0.011
保存性(25°C)		2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし	2 週間 結晶化なし

20

30

【 0 3 7 9 】

実施例 1 8 ~ 1 9 より、一般式 (i) で表される化合物を用いた液晶組成物は、 T_{ni} が高く、 Δn が大きく、 $\Delta \epsilon_r$ が大きく、 $\tan \delta_{iso}$ が小さく、室温での保存性が良好な液晶組成物であった。

更に、実施例 2 0 ~ 3 1 より、ヒンダードフェノール系酸化防止剤やヒンダードアミン系光安定剤を併用した場合においても、 T_{ni} が高く、 Δn が大きく、 $\Delta \epsilon_r$ が大きく、 $\tan \delta_{iso}$ が小さく、室温での保存性が良好であることが確認された。

【産業上の利用可能性】

【 0 3 8 0 】

本発明の化合物は、液晶組成物、液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器及びアンテナに利用することができる。

40

50

【要約】

本発明は、 Δn が大きく、 $\Delta \epsilon_r$ が大きく、低温又は室温における保存性が良好な液晶組成物を提供することができる化合物並びにこれを用いた液晶組成物、液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器及びアンテナを提供することを課題とする。

具体的には、所定のインデン構造とイソチオシアネート基（ $-\text{NCS}$ ）基をはじめとする所定の側鎖構造を有する一般式（i）で表される化合物並びにこれを用いた液晶組成物、液晶表示素子、センサ、液晶レンズ、光通信機器及びアンテナである。

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

G 0 2 F	1/137(2006.01)	G 0 2 F	1/137	5 0 0
G 0 2 F	1/13 (2006.01)	G 0 2 F	1/13	5 0 0
H 0 1 Q	3/44 (2006.01)	H 0 1 Q	3/44	
H 0 1 Q	3/34 (2006.01)	H 0 1 Q	3/34	
H 0 1 Q	13/22 (2006.01)	H 0 1 Q	13/22	
H 0 1 Q	21/06 (2006.01)	H 0 1 Q	21/06	

埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1

D I C 株式会社 埼玉工場内

(72)発明者 野呂 大樹

埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1

D I C 株式会社 埼玉工場内

(72)発明者 高崎 美花

埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1

D I C 株式会社 埼玉工場内

審査官 奥谷 暢子

(56)参考文献

特開平 0 5 - 2 6 2 6 7 8 (J P , A)

国際公開第 2 0 2 2 / 0 3 0 3 4 3 (W O , A 1)

特表 2 0 1 7 - 5 2 8 4 2 9 (J P , A)

国際公開第 2 0 1 2 / 0 2 6 4 0 3 (W O , A 1)

中国特許出願公開第 1 0 3 3 6 1 0 7 4 (C N , A)

LEHMANN,R.B. et al, Lifetime, fluorescence efficiency, and scintillation studies on some trans-1,2-diarylethylenes, Org. Scintill. Liquid Scintill. Counting, Proc. Int. Conf, 1971年, 44
1-57

(58)調査した分野 (Int.Cl., D B 名)

C 0 7 C

C 0 9 K

G 0 2 F

H 0 1 Q

C a p l u s / R E G I S T R Y (S T N)