

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5577566号
(P5577566)

(45) 発行日 平成26年8月27日(2014.8.27)

(24) 登録日 平成26年7月18日(2014.7.18)

| | |
|--------------|-------------------------|
| (51) Int.Cl. | F 1 |
| C09K 19/42 | (2006.01) C09K 19/42 |
| C09K 19/54 | (2006.01) C09K 19/54 B |
| G02F 1/13 | (2006.01) G02F 1/13 500 |
| C09K 19/12 | (2006.01) C09K 19/12 |
| C09K 19/20 | (2006.01) C09K 19/20 |

請求項の数 34 (全 63 頁)

(21) 出願番号 特願2007-225735 (P2007-225735)
 (22) 出願日 平成19年8月31日 (2007.8.31)
 (65) 公開番号 特開2009-57460 (P2009-57460A)
 (43) 公開日 平成21年3月19日 (2009.3.19)
 審査請求日 平成22年5月26日 (2010.5.26)

(73) 特許権者 311002067
 J N C 株式会社
 東京都千代田区大手町二丁目2番1号
 (73) 特許権者 596032100
 J N C 石油化学株式会社
 東京都千代田区大手町二丁目2番1号
 (74) 代理人 100092783
 弁理士 小林 浩
 (74) 代理人 100095360
 弁理士 片山 英二
 (74) 代理人 100114409
 弁理士 古橋 伸茂
 (74) 代理人 100104282
 弁理士 鈴木 康仁

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 液晶組成物および液晶素子

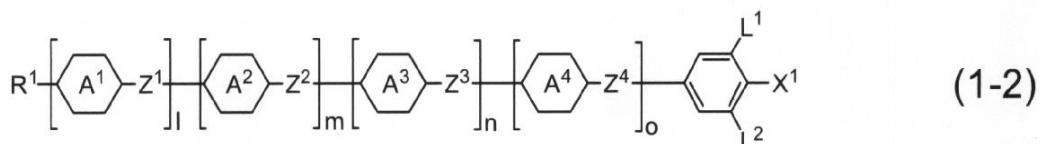
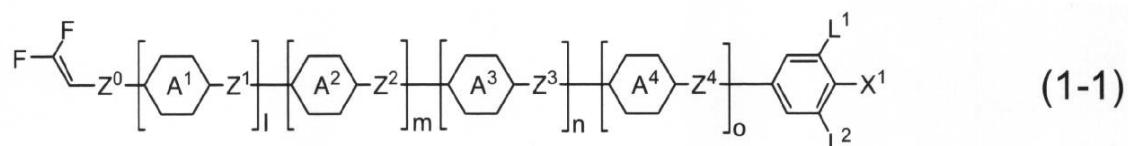
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

一般式(1-1)または(1-2)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分Aを含み、一般式(7)~(9)で表される化合物からなる群から選ばれる1以上である液晶成分Dおよび下記式(A)で表される化合物を含まない液晶成分とキラル剤とを有し、

前記液晶成分中、環構造を3つ以上有する化合物の合計の含有量が15重量%以上である、光学的等方性液晶組成物。

【化1】



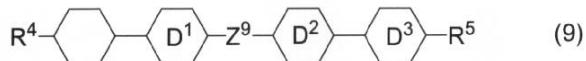
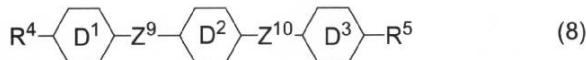
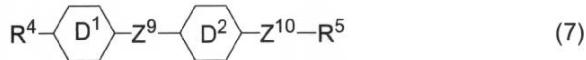
(式(1-1)および(1-2)中、R¹は炭素数2~20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=

10

20

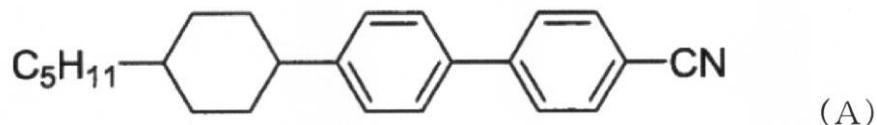
C H - または - C C - で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環 A¹、環 A²、環 A³および環 A⁴はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環またはビシクロオクタン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の - C H₂ - は - O - または - S - で置き換えられてもよく、環中の任意の - C H = は - N = で置き換えられてもよく；Z⁰ は単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - 、 - C S O - 、 - O C S - 、 - C H = C H - 、 - C F = C F - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Z¹、Z²、Z³ および Z⁴ はそれぞれ独立して、単結合、炭素数 1 ~ 4 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - 、 - C S O - 、 - O C S - 、 - C H = C H - 、 - C F = C F - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；L¹ および L² はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり；X¹ はハロゲン、 - C N、 - N = C = S、 - C C - C N、 - S F₅、 - C H F₂、 - C F₃、 - C F₂ C H₂ F、 - C F₂ C H F₂、 - C F₂ C F₃、 - (C F₂)₃ - F、 - C F₂ C H F C F₃、 - C H F C F₂ C F₃、 - (C F₂)₄ - F、 - (C F₂)₅ - F、 - O C H F₂、 - O C F₃、 - O C F₂ C H₂ F、 - O C F₂ C H F₂、 - O C H₂ C F₃、 - O C F₂ C F₃、 - O - (C F₂)₃ - F、 - O C F₂ C H F C F₃、 - O C H F C F₂ C F₃、 - O - (C F₂)₄ - F、 - O - (C F₂)₅ - F、 - C H = C H C F₃、または - C H = C H C F₂ C F₃ であり；1、m、n および o はそれぞれ独立して、0 または 1 であるが、1、m、n および o の少なくとも 1 つは 1 である。) 10 20

【化 2】



(式 (7) ~ (9) 中、R⁴ および R⁵ はそれぞれ独立して、炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり、アルキルおよびアルケニル中の任意の 1 つの水素は 1 つのフッ素で置き換えられてもよく、アルキルおよびアルケニル中の任意の - C H₂ - は - O - で置き換えられてもよく；環 D¹、環 D² および 環 D³ はそれぞれ独立して、1,4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2,5-ジイル、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、3-フルオロ-1,4-フェニレンまたは2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり；Z⁹ および Z¹⁰ はそれぞれ独立して、- C C - 、 - C O O - 、 - (C H₂)₂ - 、 - C H = C H - または単結合である。) 40

【化 3】

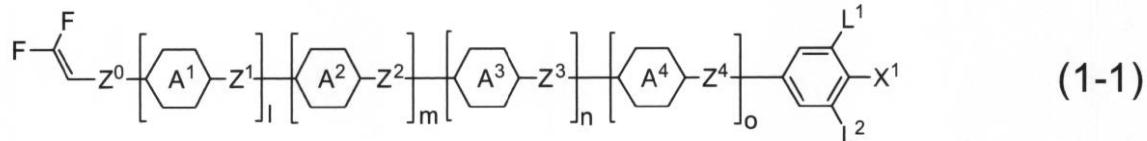


【請求項 2】

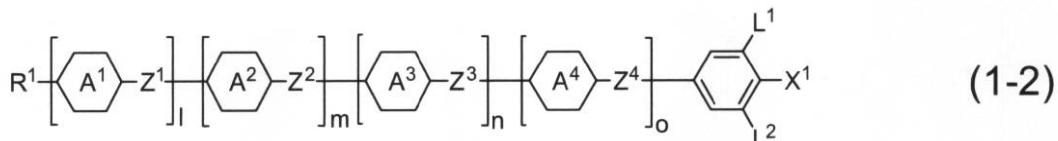
一般式(1-1)または(1-2)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分Aを含み、一般式(7)～(9)で表される化合物からなる群から選ばれる1以上である液晶成分Dおよび下記式(A)で表される化合物を含まない液晶成分とキラル剤とを有し、

前記液晶成分中、液晶成分Aの含有量が15重量%以上である、光学的等方性液晶組成物。

【化4】



10



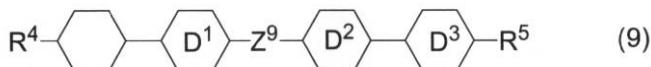
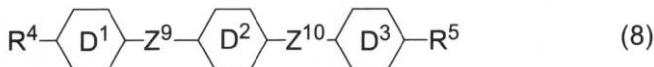
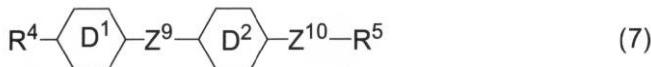
(式(1-1)および(1-2)中、R¹は炭素数2～20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=CH-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環A¹、環A²、環A³および環A⁴はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環またはビシクロオクタン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の-C H₂-は-O-または-S-で置き換えられてもよく、環中の任意の-CH=は-N=で置き換えられてもよく；Z⁰は単結合、炭素数1～20のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Z¹、Z²、Z³およびZ⁴はそれぞれ独立して、単結合、炭素数1～4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；L¹およびL²はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり；X¹はハロゲン、-C=N、-N=C=S、-C-C-N、-SF₅、-CHF₂、-CF₃、-CF₂CH₂F、-CF₂CHF₂、-CF₂CF₃、-(CF₂)₃-F、-CF₂CHFCF₃、-CHFCF₂CF₃、-(CF₂)₄-F、-(CF₂)₅-F、-OCHF₂、-OCF₃、-OCF₂CH₂F、-OCF₂CHF₂、-OCH₂CF₃、-OCF₂CF₃、-O-(CF₂)₃-F、-O-(CF₂)₅-F、-CH=CF₂、-CH=CHCF₃、または-CH=CHCF₂CF₃であり；l、m、nおよびoはそれぞれ独立して、0または1であり、l+m+n+o=2である。)

20

30

40

【化5】

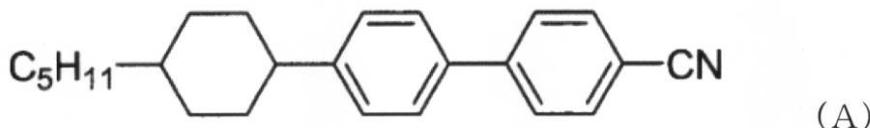


10

(式(7)～(9)中、 R^4 および R^5 はそれぞれ独立して、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、アルキルおよびアルケニル中の任意の1つの水素は1つのフッ素で置き換えられてもよく、アルキルおよびアルケニル中の任意の-C H_2- は-O-で置き換えられてもよく；環D¹、環D²および環D³はそれぞれ独立して、1,4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2,5-ジイル、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、3-フルオロ-1,4-フェニレンまたは2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり； Z^9 および Z^{10} はそれぞれ独立して、-C=C-、-COO-、-(CH₂)₂-、-CH=CH-または単結合である。)

20

【化6】



【請求項3】

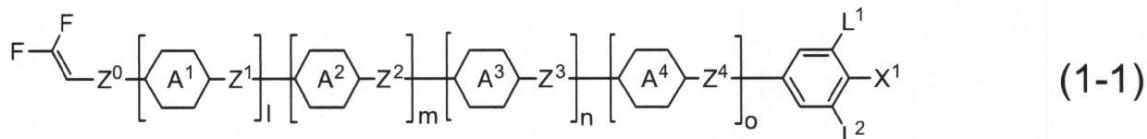
一般式(1-1)または(1-2)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分Aを含み、一般式(7)～(9)で表される化合物からなる群から選ばれる1以上である液晶成分Dおよび下記式(A)で表される化合物を含まない液晶成分とキラル剤とを有し、

30

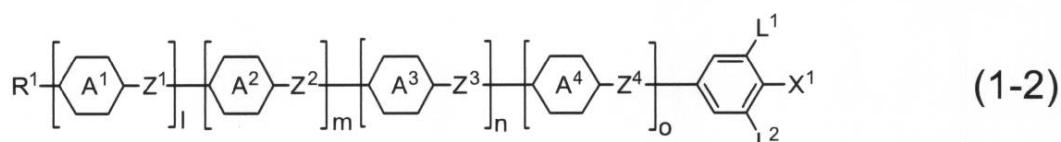
前記液晶成分中、(1-1)または(1-2)式において、 $1+m+n+o=2$ で表される化合物の含有量が15重量%以上であり、 $1+m+n+o=1$ で表される化合物の含有量が0.1～8.5重量%である、

光学的等方性液晶組成物。

【化7】



40

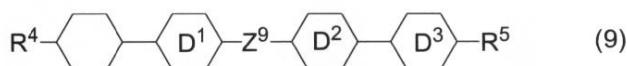
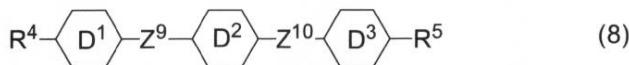
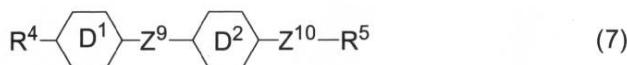


(式(1-1)および(1-2)中、 R^1 は炭素数2～20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の-C H_2- は-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=

50

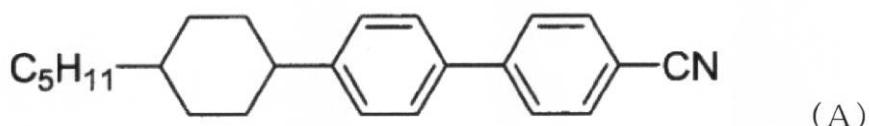
C H - または - C C - で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環 A¹、環 A²、環 A³および環 A⁴はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環またはビシクロオクタン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の - C H₂ - は - O - または - S - で置き換えられてもよく、環中の任意の - C H = は - N = で置き換えられてもよく；Z⁰ は単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - 、 - C S O - 、 - O C S - 、 - C H = C H - 、 - C F = C F - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Z¹、Z²、Z³ および Z⁴ はそれぞれ独立して、単結合、炭素数 1 ~ 4 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - 、 - C S O - 、 - O C S - 、 - C H = C H - 、 - C F = C F - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；L¹ および L² はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり；X¹ はハロゲン、 - C N、 - N = C = S、 - C C - C N、 - S F₅、 - C H F₂、 - C F₃、 - C F₂ C H₂ F、 - C F₂ C H F₂、 - C F₂ C F₃、 - (C F₂)₃ - F、 - C F₂ C H F C F₃、 - C H F C F₂ C F₃、 - (C F₂)₄ - F、 - (C F₂)₅ - F、 - O C H F₂、 - O C F₃、 - O C F₂ C H₂ F、 - O C F₂ C H F₂、 - O C H₂ C F₃、 - O C F₂ C F₃、 - O - (C F₂)₃ - F、 - O C F₂ C H F C F₃、 - O C H F C F₂ C F₃、 - O - (C F₂)₄ - F、 - O - (C F₂)₅ - F、 - C H = C H C F₃、または - C H = C H C F₂ C F₃ であり；1、m、n および o はそれぞれ独立して、0 または 1 であるが、1、m、n および o の少なくとも 1 つは 1 である。) 10 20

【化 8】



(式(7)～(9)中、R⁴ および R⁵ はそれぞれ独立して、炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり、アルキルおよびアルケニル中の任意の 1 つの水素は 1 つのフッ素で置き換えられてもよく、アルキルおよびアルケニル中の任意の - C H₂ - は - O - で置き換えられてもよく；環 D¹、環 D² および 環 D³ はそれぞれ独立して、1,4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2,5-ジイル、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、3-フルオロ-1,4-フェニレンまたは 2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり；Z⁹ および Z¹⁰ はそれぞれ独立して、- C C - 、 - C O O - 、 - (C H₂)₂ - 、 - C H = C H - または単結合である。) 40

【化 9】

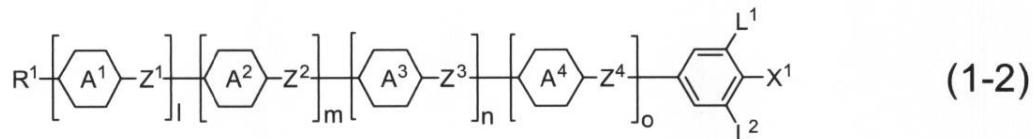
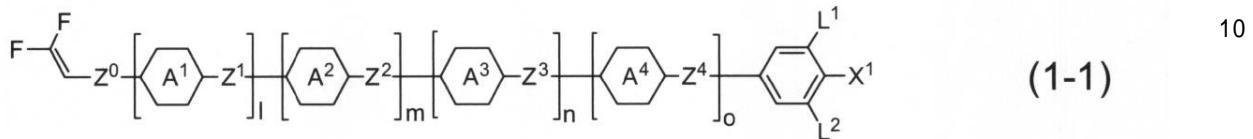


【請求項 4】

一般式(1-1)または(1-2)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分A、および、一般式(1-3)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分Bを含み、一般式(7)～(9)で表される化合物からなる群から選ばれる1以上である液晶成分Dおよび下記式(A)で表される化合物を含まない液晶成分とキラル剤とを有し、

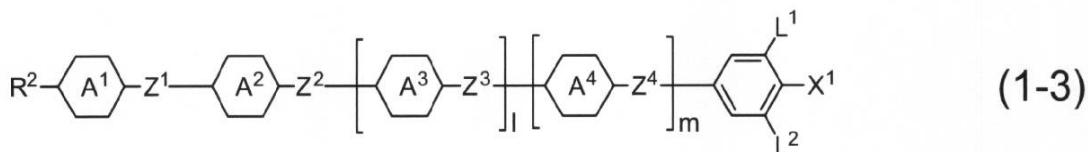
前記液晶成分中、液晶成分Bの含有量が15～99.5重量%である、光学的等方性液晶組成物。

【化10】



(式(1-1)および(1-2)中、R¹は炭素数2～20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=CH-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環A¹、環A²、環A³および環A⁴はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環またはビシクロオクタン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の-C H₂-は-O-または-S-で置き換えられてもよく、環中の任意の-CH=は-N=で置き換えられてもよく；Z⁰は単結合、炭素数1～20のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Z¹、Z²、Z³およびZ⁴はそれぞれ独立して、単結合、炭素数1～4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；L¹およびL²はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり；X¹はハロゲン、-CN、-N=C=S、-CC-CN、-SF₅、-CHF₂、-CF₃、-CF₂CH₂F、-CF₂CHF₂、-CF₂CF₃、-(CF₂)₃-F、-CF₂CHFCF₃、-CHFCF₂CF₃、-(CF₂)₄-F、-(CF₂)₅-F、-OCHF₂、-OCF₃、-OCF₂CH₂F、-OCF₂CHF₂、-OCH₂CF₃、-OCF₂CF₃、-O-(CF₂)₃-F、-O-(CF₂)₅-F、-CH=CF₂、-CH=CHCF₃、または-CH=CHCF₂CF₃；l、m、nおよびoはそれぞれ独立して、0または1であるが、l、m、nおよびoの少なくとも1つは1である。)

【化11】



(一般式(1-3)において、R²は水素、炭素数1～20のアルキルであり、このアル

10

20

30

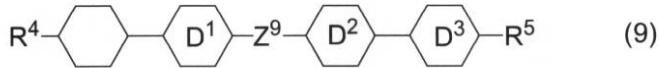
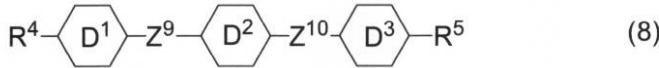
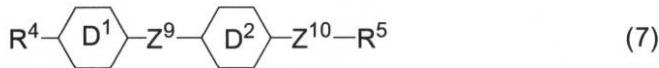
40

50

キル中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - または - C = C - で置き換えられてもよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環 A¹、環 A²、環 A³および環 A⁴は独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環またはビシクロオクタン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の - C H₂ - は - O - または - S - で置き換えられてもよく、環中の任意の - C H = は - N = で置き換えられてもよく；Z¹、Z²、Z³およびZ⁴は独立して、単結合、炭素数1～4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - 、 - C S O - 、 - O C S - 、 - C H = C H - 、 - C F = C F - または - C = C - で置き換えられてもよく、このアルキレン中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；L¹およびL²はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり；X¹はハロゲン、 - C = N、 - N = C = S、 - C = C - N、 - S F₅、 - C H F₂、 - C F₃、 - C F₂ C H₂ F、 - C F₂ C H F₂、 - C F₂ C F₃、 - (C F₂)₃ - F、 - C F₂ C H F C F₃、 - C H F C F₂ C F₃、 - (C F₂)₄ - F、 - (C F₂)₅ - F、 - O C H F₂、 - O C F₃、 - O C F₂ C H₂ F、 - O C F₂ C H F₂、 - O C H₂ C F₃、 - O C F₂ C F₃、 - O - (C F₂)₃ - F、 - O C F₂ C H F C F₃、 - O C H F C F₂ C F₃、 - O - (C F₂)₄ - F、 - O - (C F₂)₅ - F、 - C H = C F₂、 - C H = C H C F₂ C F₃；l およびmは独立して、0 または1である。) 10

【化12】

20

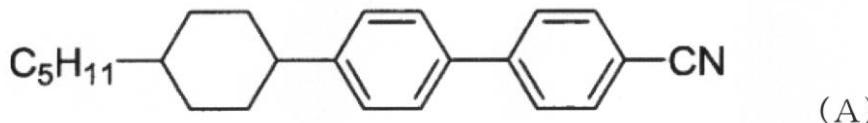


30

(式(7)～(9)中、R⁴およびR⁵はそれぞれ独立して、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、アルキルおよびアルケニル中の任意の1つの水素は1つのフッ素で置き換えられてもよく、アルキルおよびアルケニル中の任意の - C H₂ - は - O - で置き換えられてもよく；環D¹、環D²および環D³はそれぞれ独立して、1,4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2,5-ジイル、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、3-フルオロ-1,4-フェニレンまたは2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり；Z⁹およびZ¹⁰はそれぞれ独立して、 - C = C - 、 - C O O - 、 - (C H₂)₂ - 、 - C H = C H - または単結合である。) 40

【化13】

40



【請求項5】

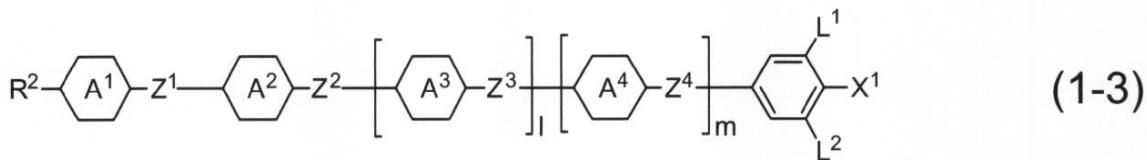
液晶成分が、さらに、前記一般式(1-1)、前記一般式(1-2)および下記一般式(1-3)で表される化合物以外の化合物であり、2以上の誘電率異方性を有する化合物からなる液晶成分Cを含み

前記液晶成分中、液晶成分Cの含有量が0.1～84.5重量%である、

50

請求項 1 ~ 4 のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 1 4】



(一般式(1-3)において、 R^2 は水素、炭素数1~20のアルキルであり、このアルキル中の任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ または $-\text{CC}-$ で置き換えられてもよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環またはビシクロオクタン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、環中の任意の $-\text{CH}=$ は $-\text{N}=$ で置き換えられてもよく； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、炭素数1~4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CSO}-$ 、 $-\text{OCS}-$ 、 $-\text{CH=CH}-$ 、 $-\text{CF=CF}-$ または $-\text{CC}-$ で置き換えられてもよく、このアルキレン中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく； L^1 および L^2 はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり； X^1 はハロゲン、 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 、 $-\text{N=C=S}$ 、 $-\text{CC}\equiv\text{N}$ 、 $-\text{SF}_5$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{CF}_2\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CF}_2\text{CF}_3$ 、 $-(\text{CF}_2)_3\text{F}$ 、 $-\text{CF}_2\text{CHFCF}_3$ 、 $-\text{CHFCF}_2\text{CF}_3$ 、 $-(\text{CF}_2)_4\text{F}$ 、 $-(\text{CF}_2)_5\text{F}$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{O}-(\text{CF}_2)_3\text{F}$ 、 $-\text{O}-(\text{CF}_2)_5\text{F}$ 、 $-\text{CH=CF}_2$ 、 $-\text{CH=CHCF}_3$ 、または $-\text{CH=CHCF}_2\text{CF}_3$ ；1およびmは独立して、0または1である。)

【請求項 6】

液晶成分A中、一般式(1-1)で表される化合物の含有量が5~85重量%である、請求項1~5のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【請求項 7】

液晶成分中、液晶成分Aの含有量が40~85重量%である、請求項1~6のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【請求項 8】

液晶成分中、液晶成分Aの含有量が70~85重量%である、請求項1~6のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

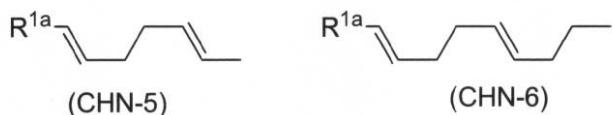
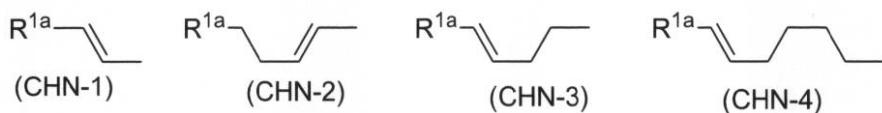
【請求項 9】

光学的等方性液晶組成物中、液晶成分Aの含有量が70~84重量%である、請求項1~8のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

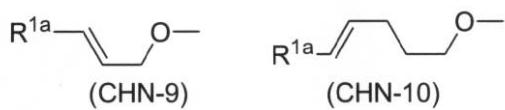
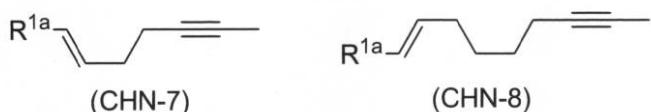
【請求項 10】

一般式(1-2)中の R^1 が、下記式($\text{CHN}-1$)~($\text{CHN}-12$)からなる群から選ばれるいずれかで表される、請求項1~9のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

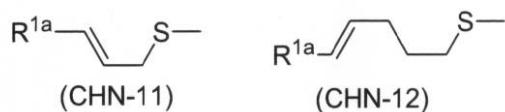
【化15】



10



20



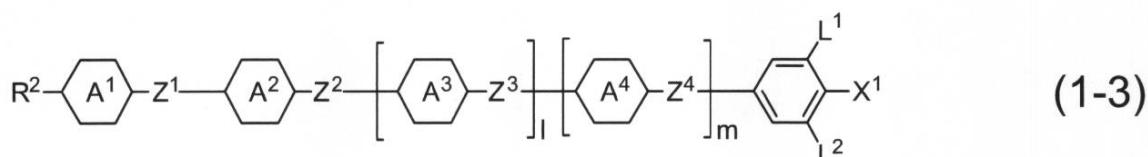
(式(ChN-1)～(ChN-12)中、 R^{1a} はそれぞれ独立して水素または炭素数1～10のアルキルである。)

【請求項11】

前記一般式(1-1)、前記一般式(1-2)および下記一般式(1-3)中の環A¹、環A²、環A³および環A⁴がそれぞれ独立して、下記式(RG-1)～(RG-9)のいずれか1つで表される請求項1～10に記載の光学的等方性液晶組成物。

30

【化16】



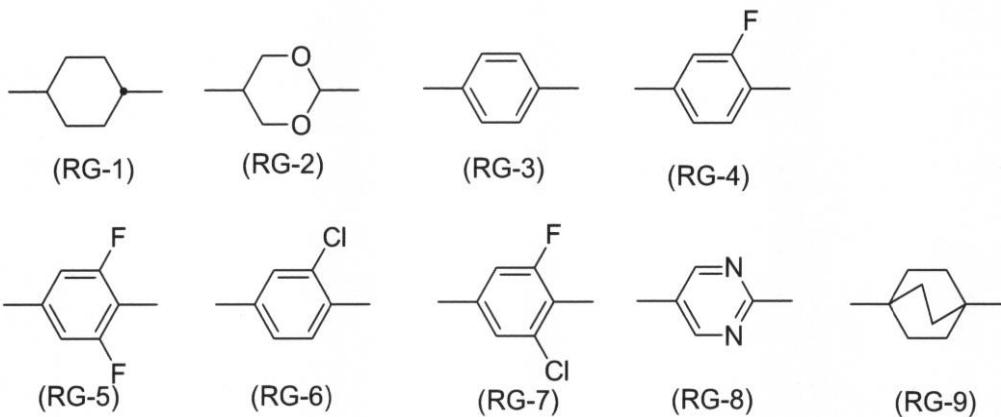
(一般式(1-3)において、 R^2 は水素、炭素数1～20のアルキルであり、このアルキル中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環A¹、環A²、環A³および環A⁴は独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環またはビシクロオクタン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の-CH₂-は-O-または-S-で置き換えられてもよく、環中の任意の-CH=は-N=で置き換えられてもよく；Z¹、Z²、Z³およびZ⁴は独立して、単結合、炭素数1～4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルキレン中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；L¹およびL²はそれぞれ独

40

50

立して、水素またはハロゲンであり； X^1 はハロゲン、-C-N、-N=C=S、-C-C-N、-SF₅、-CHF₂、-CF₃、-CF₂CH₂F、-CF₂CHF₂、-CF₂CF₃、-(CF₂)₃-F、-CF₂CHFCF₃、-CHFCF₂CF₃、-(CF₂)₄-F、-(CF₂)₅-F、-OCHF₂、-OCF₃、-OCF₂CH₂F、-OCF₂CF₃、-O-(CF₂)₃-F、-OCF₂CHFCF₃、-OCHFCF₂CF₃、-O-(CF₂)₄-F、-O-(CF₂)₅-F、-CH=CF₂、-CH=CHCF₃、または-CH=CHCF₂CF₃； l および m は独立して、0 または 1 である。)

【化17】



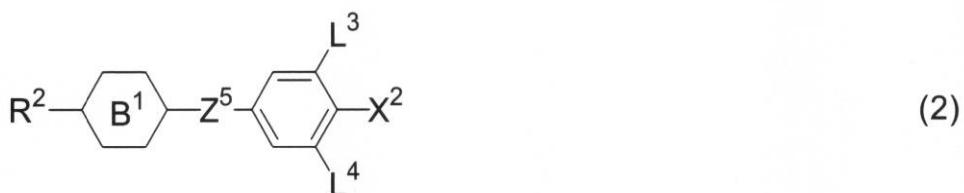
10

20

【請求項12】

液晶成分 C が、一般式(2)で表される化合物を含有する、請求項 5～11 のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化18】



30

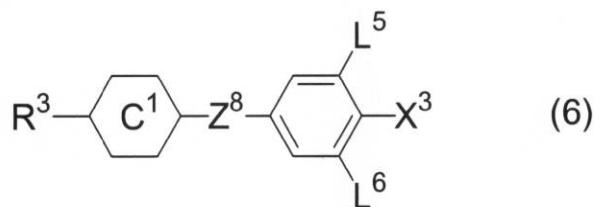
(式中、R² は炭素数 1～10 のアルキルまたは炭素数 2～10 のアルキニルであり、アルキルおよびアルキニルにおいて任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく、任意の-CH₂-は-O-で置き換えられてもよく；X² はフッ素、塩素、-SF₅、-OCF₃、-OCHF₂、-CF₃、-CHF₂、-CH₂F、-OCF₂CHF₂、または-OCF₂CHFCF₃であり；環 B¹ は 1,4-シクロヘキシレン、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、ピペリジン-1,4-ジイル、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイルまたは任意の水素がフッ素または塩素で置き換えられた 1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイルであり；Z⁵ は-(CH₂)₂-、-(CH₂)₄-、-COO-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH=CH-、-C-C-、-CH₂O- または単結合であり；L³ および L⁴ は独立して、水素またはフッ素である。)

40

【請求項13】

液晶成分 C が、一般式(6)で表される化合物の群から選択される少なくとも 1 つの化合物を含有する、請求項 5～11 のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 1 9】



(式中、 R^3 は炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、アルキルにおいて任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく； X^3 は $-C-N$ または $-C-C-C-N$ であり；環 C^1 は、1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、ナフタレン - 2, 6 - ジイル、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル、テトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイルまたはピリミジン - 2, 5 - ジイル、任意の水素がフッ素で置き換えられた 1, 4 - フェニレン、ナフタレン - 2, 6 - ジイルであり； Z^8 は $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-C-C-$ 、 $-CH_2O-$ 、または単結合であり； L^5 および L^6 は独立して、水素またはフッ素である。)

【請求項14】

液晶成分において、ネマチック相と非液晶等方相とが共存する上限温度と下限温度との差が3~150である請求項1~13のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【請求項 15】

液晶組成物の全重量に対して、キラル剤を1～40重量%含む、請求項1～14のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

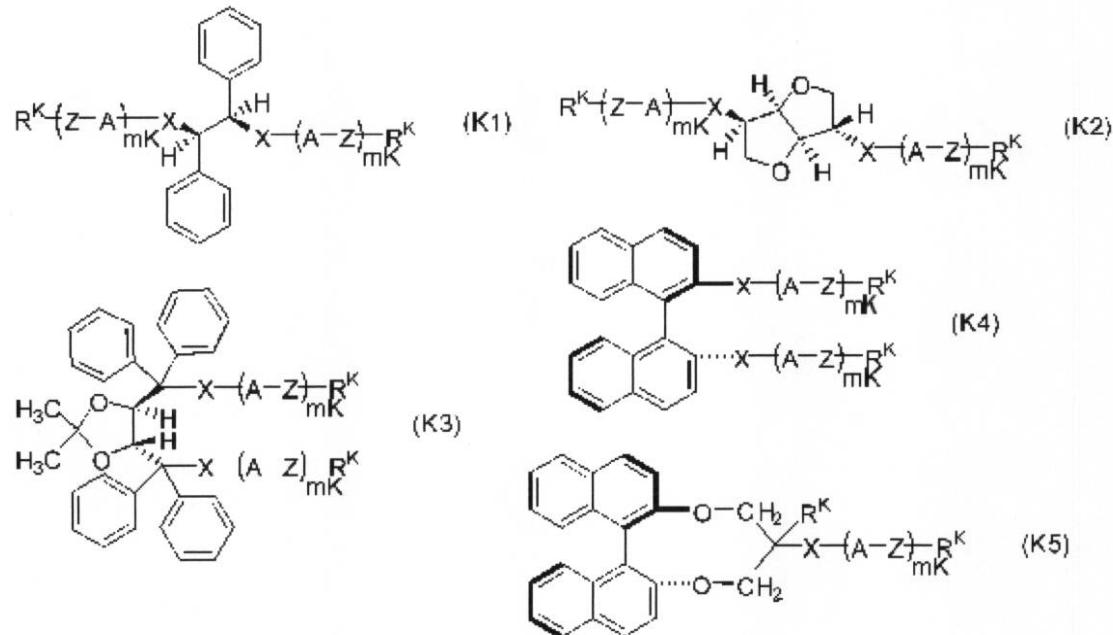
【請求項 16】

液晶組成物の全重量に対して、キラル剤を5～15重量%含む、請求項1～14のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【請求項 17】

キラル剤が、下記式（K1）～（K5）のいずれかで表される化合物を1種以上含む、請求項1～16のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 2 0】



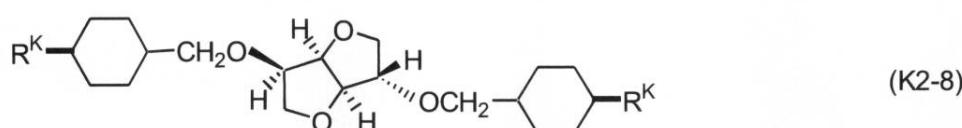
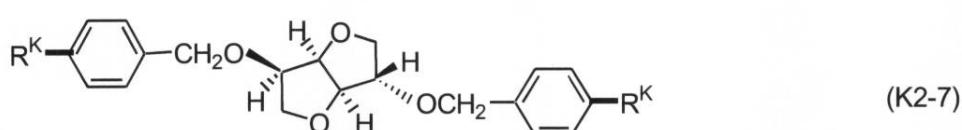
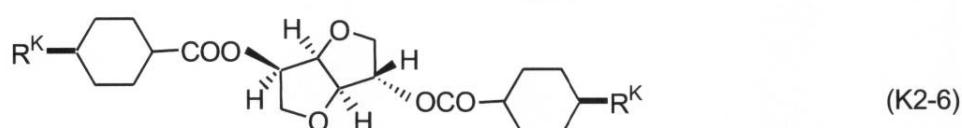
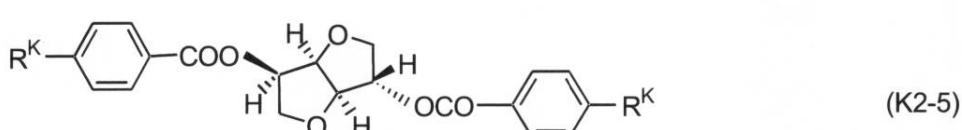
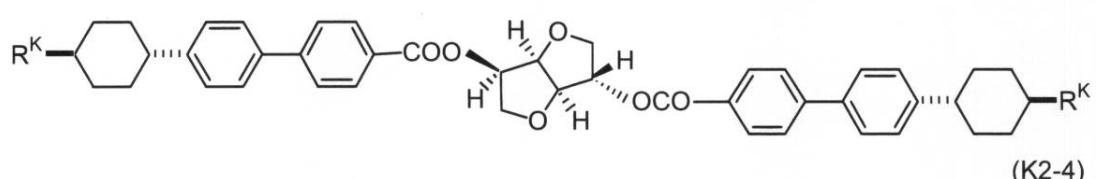
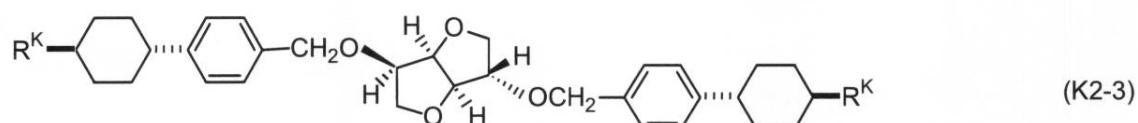
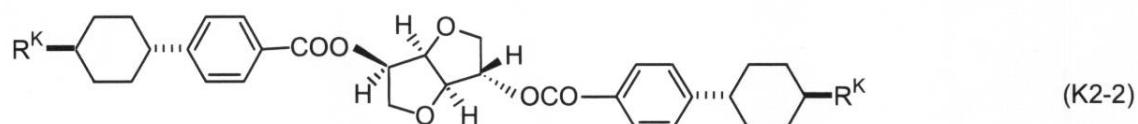
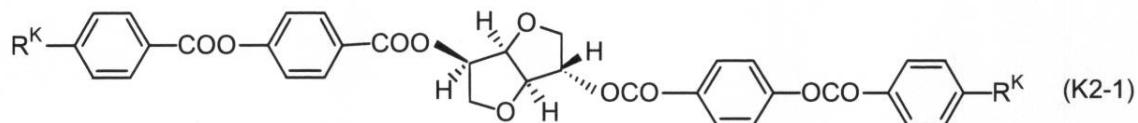
(式(K 1) ~ (K 5) 中、 R^k はそれぞれ独立して、水素、ハロゲン、-C-N、-N 50

= C = O、 - N = C = S または炭素数 1 ~ 20 のアルキルであり、このアルキル中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - 、 - C H = C H - 、 - C F = C F - または - C C - で置き換えられてもよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく； A はそれぞれ独立して、芳香族性あるいは非芳香族性の 3 ないし 8 員環、または、炭素数 9 以上の縮合環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲン、炭素数 1 ~ 3 のアルキルまたはハロアルキルで置き換えられてもよく、これらの環中の C H₂ - は - O - 、 - S - または - N H - で置き換えられてもよく、これらの環中の C H = は - N = で置き換えられてもよく； Z はそれぞれ独立して、単結合または炭素数 1 ~ 8 のアルキレンであるが、アルキレン中の任意の - C H₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - C O O - 、 - O C O - 、 - C S O - 、 - O C S - 、 - N = N - 、 - C H = N - 、 - N = C H - 、 - N (O) = N - 、 - N = N (O) - 、 - C H = C H - 、 - C F = C F - または - C C - で置き換えられてもよく、アルキレン中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく； X は単結合、 - C O O - 、 - C H₂ O - 、 - C F₂ O - または - C H₂ C H₂ - であり； m K はそれぞれ独立して 1 ~ 4 の整数である。)

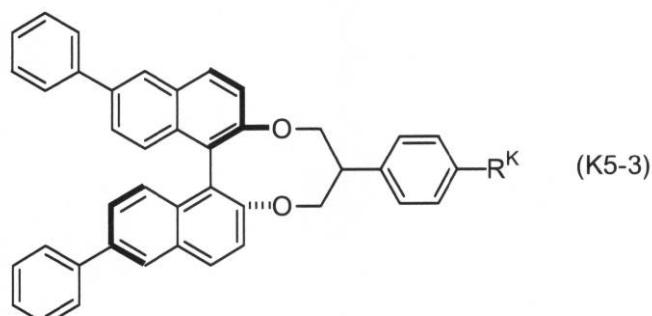
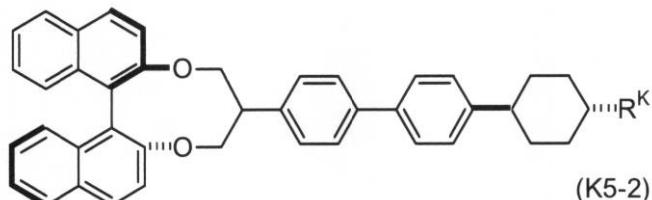
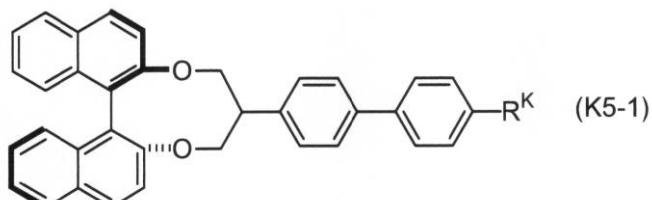
【請求項 18】

キラル剤が、下記式 (K 2 - 1) ~ (K 2 - 8) および (K 5 - 1) ~ (K 5 - 3) のいずれかで表される化合物を 1 種以上含む、請求項 1 ~ 16 のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 2 1】



【化 2 2】



(式(K2-1)～(K2-8)および(K5-1)～(K5-3)中、R^Kはそれぞれ独立して、炭素数3～10のアルキルであり、このアルキル中の環に隣接する-C H₂-は-O-で置き換えられてもよく、アルキル中の任意の-C H₂-は、-C H=C H-で置き換えられてもよい。)

【請求項19】

酸化防止剤および紫外線吸収剤からなる群から選ばれる1以上をさらに含む、請求項1～18のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。
30

【請求項20】

光学的に等方性の液晶相が二色以上の回折光を示さない、請求項1～19のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【請求項21】

光学的に等方性の液晶相が二色以上の回折光を示す、請求項1～19のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【請求項22】

-20～70の温度においてキラルネマチック相を示し、この温度範囲の少なくとも一部において螺旋ピッチが700nm以下である、請求項1～21のいずれか記載の光学的等方性液晶組成物。
40

【請求項23】

請求項1～22のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物と、重合性モノマーとを含む混合物。

【請求項24】

重合性モノマーが光重合性モノマーまたは熱重合性モノマーである、請求項23に記載の混合物。

【請求項25】

請求項23または24に記載の混合物を重合して得られる、光学的に等方性の液晶相で駆動される素子に用いられる高分子／液晶複合材料。
50

【請求項 2 6】

請求項 2 3 または 2 4 に記載の混合物を非液晶等方相または光学的に等方性の液晶相で重合させて得られる、光学的に等方性の液晶相で駆動される素子に用いられる高分子 / 液晶複合材料。

【請求項 2 7】

高分子 / 液晶複合材料に含まれる高分子がメソゲン部位を有する、請求項 2 5 または 2 6 に記載の高分子 / 液晶複合材料。

【請求項 2 8】

高分子 / 液晶複合材料に含まれる高分子が架橋構造を有する、請求項 2 5 ~ 2 7 のいずれかに記載の高分子 / 液晶複合材料。 10

【請求項 2 9】

液晶組成物を 60 ~ 99 重量 %、高分子を 1 ~ 40 重量 % 含む、請求項 2 5 ~ 2 8 のいずれかに記載の高分子 / 液晶複合材料。

【請求項 3 0】

一方または両方の面に電極が配置され、基板間に配置された液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料、および電極を介して液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料に電界を印加する電界印加手段を備えた液晶素子であって、前記液晶組成物が、請求項 1 ~ 2 3 のいずれかに記載の液晶組成物であり、前記高分子 / 液晶複合材料が請求項 2 5 ~ 2 9 のいずれかに記載の高分子 / 液晶複合材料である液晶素子。

【請求項 3 1】

一方または両方の面に電極が配置され、少なくとも一方が透明な一組の基板、基板間に配置された液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料、および基板の外側に配置された偏光板を有し、電極を介して液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料に電界を印加する電界印加手段を備えた液晶素子であって、前記液晶組成物が、請求項 1 ~ 2 2 のいずれかに記載の液晶組成物であり、前記高分子 / 液晶複合材料が請求項 2 5 ~ 2 9 のいずれかに記載の高分子 / 液晶複合材料である液晶素子。 20

【請求項 3 2】

一組の基板の少なくとも一方の基板上において、少なくとも 2 方向に電界を印加できるように電極が構成されている請求項 3 0 または 3 1 に記載の液晶素子。

【請求項 3 3】

互いに平行に配置された一組の基板の一方または両方に、少なくとも 2 方向に電界を印加できるように電極が構成されている請求項 3 0 または 3 1 に記載の液晶素子。 30

【請求項 3 4】

電極がマトリックス状に配置されて、画素電極を構成し、各画素がアクティブ素子を備え、このアクティブ素子が薄膜トランジスター (TFT) である請求項 3 0 ~ 3 3 のいずれかに記載の液晶素子。

【発明の詳細な説明】**【技術分野】****【0 0 0 1】**

本発明は、液晶組成物およびその液晶組成物を用いた液晶素子に関する。 40

【背景技術】**【0 0 0 2】**

ネマチック液晶材料における等方相（以下「非液晶等方相」ということがある。）と同様に、光学的に等方性の液晶相の一種であるブルー相においても電気複屈折値（等方性媒体に電界を印加した時に誘起される複屈折値） n_E が電場 E の二乗に比例する現象であるカーポロ効果 [$n_E = K \cdot E^2$ (K : カーポロ係数 (カーポロ定数) 、 λ : 波長)] が観測される。

【0 0 0 3】

近年、ブルー相などの光学的等方性の液晶相において電場を印加し、電気複屈折を発現

50

させるモードも盛んに研究されている（特許文献1～11、非特許文献1～3）。さらにこのモードの表示素子への応用のみならず、電気複屈折を利用した波長可変フィルター、波面制御素子、液晶レンズ、収差補正素子、開口制御素子、光ヘッド装置などへの応用が提案されている（特許文献6、10、11）。

【0004】

- 【特許文献1】特開2003-327966
- 【特許文献2】国際公開2005/90520
- 【特許文献3】特開2005-336477
- 【特許文献4】特開2006-89622
- 【特許文献5】特開2006-299084
- 【特許文献6】国際公開2005/080529
- 【特許文献7】特表2005-537520
- 【特許文献8】特表2006-506477
- 【特許文献9】特表2007-503487
- 【特許文献10】特開2005-157109
- 【特許文献11】特開2006-127707
- 【非特許文献1】Nature Materials, 1, 64, (2002)
- 【非特許文献2】Adv. Mater., 17, 96, (2005)
- 【非特許文献3】Journal of the SID, 14, 551, (2006)

10

【発明の開示】

20

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

電気複屈折が大きい、すなわち駆動電圧が低い液晶材料が求められている。また、大きなカーポジットを発現する光学的に等方性の液晶材料が求められていた。

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明者らは、鋭意研究の結果、アルケニルやジフルオロアルケニルを有する化合物を含む液晶成分とキラル剤を有する光学的等方性液晶組成物等を見出した。

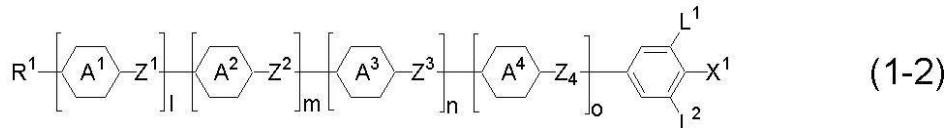
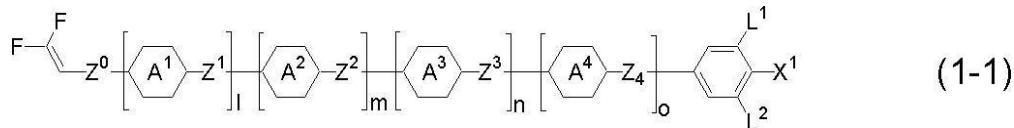
【0007】

[1] 一般式(1-1)または(1-2)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分Aを含む液晶成分とキラル剤とを有し、

30

前記液晶成分中、環構造を3つ以上有する化合物の合計の含有量が15重量%以上である、光学的等方性液晶組成物。

【化14】



40

(式(1-1)および(1-2)中、R¹は炭素数2～20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=CH-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環A¹、環A²、環A³および環A⁴はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環、ビシクロオクタン環またはシクロヘキサン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の-C H₂-は-O-または-S-で置き換えられてもよく、環中の任意の-C H=は

50

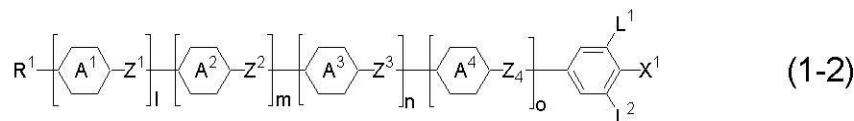
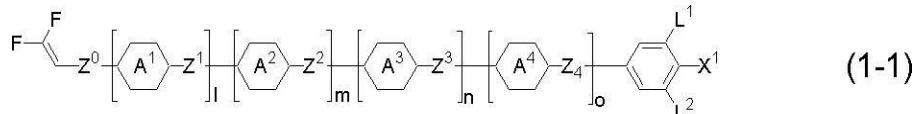
- N = で置き換えられてもよく ; Z⁰ は単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - CH₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - COO - 、 - OCO - 、 - CSO - 、 - OCS - 、 - OCS - 、 - CH = CH - 、 - CF = CF - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく ; Z¹ 、 Z² 、 Z³ および Z⁴ はそれぞれ独立して、単結合、炭素数 1 ~ 4 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - CH₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - COO - 、 - OCO - 、 - CSO - 、 - OCS - 、 - CH = CH - 、 - CF = CF - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく ; L¹ および L² はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり ; X¹ はハロゲン、 - C N 、 - N = C = S 、 - C C - C N 、 - SF₅ 、 - CHF₂ 、 - CF₃ 、 - CF₂CH₂F 、 - CF₂CHF₂ 、 - CF₂CF₃ 、 - (CF₂)₃-F 、 - CF₂CHFCF₃ 、 - CHFCF₂CF₃ 、 - (CF₂)₄-F 、 - (CF₂)₅-F 、 - OCHF₂ 、 - OCF₃ 、 - OCF₂CH₂F 、 - OCF₂CHF₂ 、 - OCH₂CF₃ 、 - OCF₂CF₃ 、 - O-(CF₂)₃-F 、 - OCF₂CHFCF₃ 、 - OCHFCF₂CF₃ 、 - O-(CF₂)₄-F 、 - O-(CF₂)₅-F 、 - CH = CF₂ 、 - CH = CHCF₃ 、 または - CH = CHCFCF₂CF₃ であり ; 1 、 m 、 n および o はそれぞれ独立して、0 または 1 である。)

[2] 一般式 (1-1) または (1-2) で表される 1 種以上の化合物からなる液晶成分 A を含む液晶成分とキラル剤とを有し、

前記液晶成分中、液晶成分 A の含有量が 15 重量 % 以上である、

光学的等方性液晶組成物。

【化 15】



(式 (1-1) および (1-2) 中、R¹ は炭素数 2 ~ 20 のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の - CH₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - COO - 、 - OCO - 、 - CH = CH - または - C C - で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく ; 環 A¹ 、環 A² 、環 A³ および環 A⁴ はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環、ビシクロオクタン環またはシクロヘキサン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の - CH₂ - は - O - または - S - で置き換えられてもよく、環中の任意の - CH = は - N = で置き換えられてもよく ; Z⁰ は単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - CH₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - COO - 、 - OCO - 、 - CSO - 、 - OCS - 、 - CH = CH - 、 - CF = CF - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく ; Z¹ 、 Z² 、 Z³ および Z⁴ はそれぞれ独立して、単結合、炭素数 1 ~ 4 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の - CH₂ - は、 - O - 、 - S - 、 - COO - 、 - OCO - 、 - CSO - 、 - OCS - 、 - CH = CH - 、 - CF = CF - または - C C - で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく ; L¹ および L² はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり ; X¹ はハロゲン、 - C N 、 - N = C = S 、 - C C - C N 、 - SF₅ 、 - CHF₂ 、 - CF₃ 、 - CF₂CH₂F 、 - CF₂CHF₂ 、 - CF₂CF₃ 、 - (CF₂)₃-F 、 - CF₂CHFCF₃ 、 - CHFCF₂CF₃ 、 - (CF₂)₄-F 、 - (CF₂)₅-F 、 - OCHF₂ 、 - OCF₃ 、 - OCF₂CH₂F 、 - OCF₂CHF₂ 、 - OCH₂CF₃ 、 - OCF₂CF₃ 、 - O-(CF₂)₃-F 、 - OCF₂CHFCF₃ 、 - OCHFCF₂CF₃ 、 - O-(CF₂)₄-F 、 - O-(CF₂)₅-F 、 - CH = CF₂ 、 - CH = CHCF₃ 、 または - CH = CHCFCF₂CF₃ であり ; 1 、 m 、 n および o はそれぞれ独立して、0 または 1 である。)

10

20

40

50

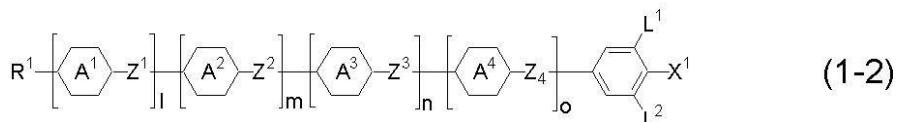
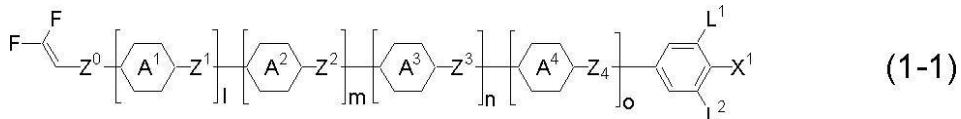
F、-CH=CF₂、-CH=CHCF₃、または-CH=CHCF₂CF₃であり；l、m、nおよびoはそれぞれ独立して、0または1であり、l+m+n+o=2である。)

[3] 一般式(1-1)または(1-2)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分Aを含む液晶成分とキラル剤とを有し、

前記液晶成分中、(1-1)または(1-2)式において、l+m+n+o=2で表される化合物の含有量が15重量%以上であり、l+m+n+o=1で表される化合物の含有量が0.1~85重量%である、

光学的等方性液晶組成物。

【化16】

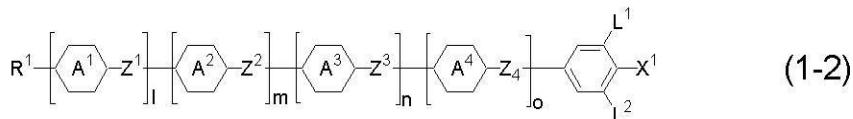
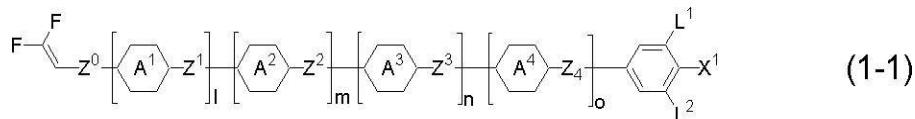


(式(1-1)および(1-2)中、R¹は炭素数2~20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=CH-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環A¹、環A²、環A³および環A⁴はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環、ビシクロオクタン環またはシクロヘキサン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の-CH₂-は-O-または-S-で置き換えられてもよく、環中の任意の-CH=は-N=で置き換えられてもよく；Z⁰は単結合、炭素数1~20のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Z¹、Z²、Z³およびZ⁴はそれぞれ独立して、単結合、炭素数1~4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；L¹およびL²はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり；X¹はハロゲン、-C≡N、-N=C=S、-C≡C-C≡N、-SF₅、-CHF₂、-CF₃、-CF₂CH₂F、-CF₂CHF₂、-CF₂CF₃、-(CF₂)₃-F、-CF₂CHFCF₃、-CHFCF₂CF₃、-(CF₂)₄-F、-(CF₂)₅-F、-OCHF₂、-OCF₃、-OCF₂CH₂F、-OCF₂CHF₂、-OCH₂CF₃、-OCF₂CF₃、-O-(CF₂)₃-F、-O-(CF₂)₅-F、-CH=CF₂、-CH=CHCF₃、または-CH=CHCF₂CF₃であり；l、m、nおよびoはそれぞれ独立して、0または1である。)

[4] 一般式(1-1)または(1-2)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分A、および、一般式(1-3)で表される1種以上の化合物からなる液晶成分Bを含む液晶成分とキラル剤とを有し、

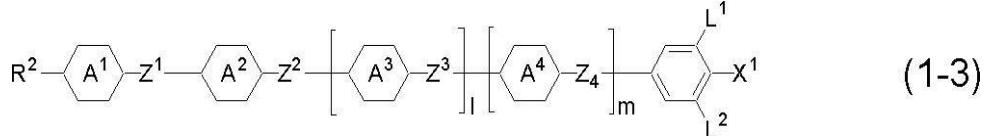
前記液晶成分中、液晶成分Bの含有量が15~99.5重量%以上である、光学的等方性液晶組成物。

【化17】



(式(1-1)および(1-2)中、 R^1 は炭素数2~20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく、このアルケニル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 はそれぞれ独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環、ビシクロオクタン環またはシクロヘキサン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、環中の任意の $-\text{CH}=$ は $-\text{N}=$ で置き換えられてもよく； Z^0 は単結合、炭素数1~20のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CSO}-$ 、 $-\text{OCS}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 および Z^4 はそれぞれ独立して、単結合、炭素数1~4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CSO}-$ 、 $-\text{OCS}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく； L^1 および L^2 はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり； X^1 はハロゲン、 $-\text{C}=\text{N}$ 、 $-\text{N}=\text{C}=\text{S}$ 、 $-\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{N}$ 、 $-\text{SF}$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{CF}_2\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CF}_2\text{CF}_3$ 、 $-(\text{CF}_2)_3-\text{F}$ 、 $-\text{CF}_2\text{CHFCF}_3$ 、 $-\text{CHFCF}_2\text{CF}_3$ 、 $-(\text{CF}_2)_4-\text{F}$ 、 $-(\text{CF}_2)_5-\text{F}$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{O}-(\text{CF}_2)_3-\text{F}$ 、 $-\text{O}-(\text{CF}_2)_4-\text{F}$ 、 $-\text{O}-(\text{CF}_2)_5-\text{F}$ 、 $-\text{CH}=\text{CF}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCF}_3$ 、または $-\text{CH}=\text{CHCF}_2\text{CF}_3$ ； l 、 m 、 n および o はそれぞれ独立して、0または1である。)

【化18】



(一般式(1-3)において、 R^2 は水素、炭素数1~20のアルキルであり、このアルキル中の任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環、ビシクロオクタン環、またはシクロヘキサン環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環中の任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、環中の任意の $-\text{CH}=$ は $-\text{N}=$ で置き換えられてもよく； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、炭素数1~4のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CSO}-$ 、 $-\text{OCS}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく、このアルキレン中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく； L^1 お

および L^2 はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンであり； X^1 はハロゲン、 -C-N、 -N=C=S、 -C-C-N、 -S-F₅、 -CH-F₂、 -CF₃、 -CF₂CH₂F、 -CF₂CHF₂、 -CF₂CF₃、 -(CF₂)₃-F、 -CF₂CHFCF₃、 -CHFCF₂CF₃、 -(CF₂)₄-F、 -(CF₂)₅-F、 -OCHF₂、 -OC、 -OCF₂CH₂F、 -OCF₂CHF₂、 -OCH₂CF₃、 -OCF₂CF₃、 -O-(CF₂)₃-F、 -OCF₂CHFCF₃、 -OCHFCF₂CF₃、 -O-(CF₂)₄-F、 -O-(CF₂)₅-F、 -CH=CF₂、 -CH=CHCF₃、 または -CH=CHCF₂CF₃； 1 および m は独立して、 0 または 1 である。)

【0008】

[5] 液晶成分が、さらに、一般式(1-1)～(1-3)で表される化合物以外の化合物であり、2以上の誘電率異方性を有する化合物からなる液晶成分 C、および、一般式(1-1)～(1-3)で表される化合物以外の化合物であり、-2以上かつ2未満の誘電率異方性を有する化合物からなる液晶成分 D を含み 10

前記液晶成分中、液晶成分 C の含有量が 0.1～84.5 重量 % であり、液晶成分 D の含有量が 0～84.5 重量 % である。

[1]～[4]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

[6] 液晶成分 A 中、一般式(1-1)で表される化合物の含有量が 5～85 重量 % である、[1]～[5]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

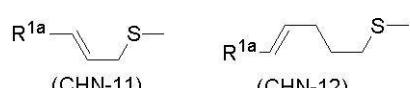
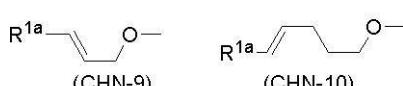
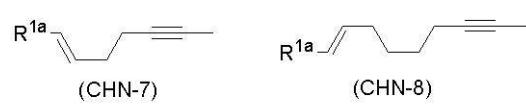
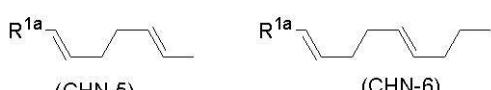
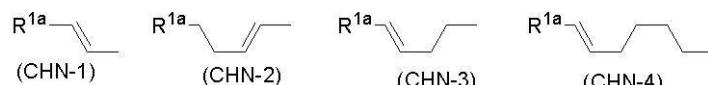
[7] 液晶成分中、液晶成分 A の含有量が 40～85 重量 % である、[1]～[6]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。 20

[8] 液晶成分中、液晶成分 A の含有量が 70～85 重量 % である、[1]～[6]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

[9] 光学的等方性液晶組成物中、液晶成分 A の含有量が 70～84 重量 % である、[1]～[8]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

[10] 一般式(1-2)中の R¹ が、下記式(CHN-1)～(CHN-12)からなる群から選ばれるいずれかで表される、[1]～[9]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化19】

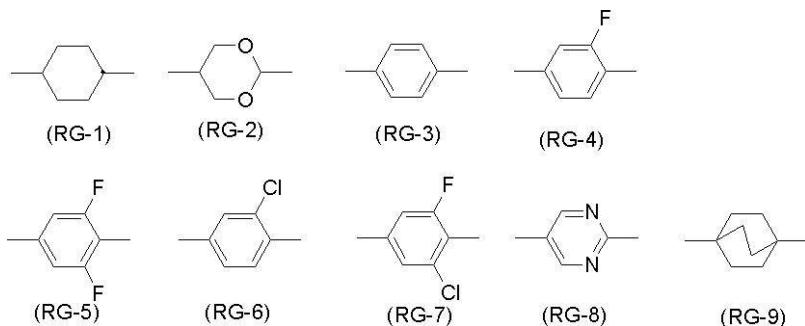


(式(CHN-1)～(CHN-12)中、R^{1a} はそれぞれ独立して水素または炭素数 1～10 のアルキルである。)

[11] 一般式(1-1)～(1-3)中の環 A¹、環 A²、環 A³ および環 A⁴ がそれぞれ独立して、下記式(RG-1)～(RG-9)のいずれか 1 つで表される [1]～ 50

[10] に記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 20】

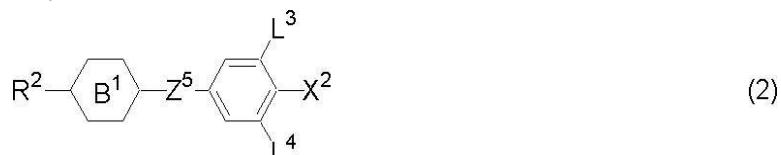


10

[12]

液晶成分 C が、一般式 (2) で表される化合物を含有する、[5] ~ [11] のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 21】



20

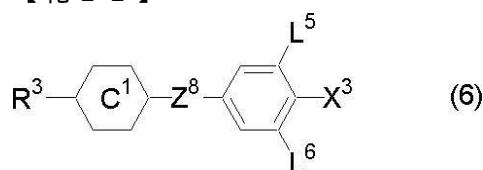
(式中、 R^2 は炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルキニルであり、アルキルおよびアルキニルにおいて任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく； X^2 はフッ素、塩素、 $-SF_5$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 または $-OCF_2CHFCF_3$ であり； 環 B^1 は 1,4-シクロヘキシレン、 1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、 ピリミジン-2,5-ジイル、 テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、 ピペリジン-1,4-ジイル、 1,4-フェニレン、 ナフタレン-2,6-ジイルまたは任意の水素がフッ素または塩素で置き換えられた 1,4-フェニレン、 ナフタレン-2,6-ジイルであり； Z^5 は $-CH_2-$ 、 $-CH_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C=C-$ 、 $-CH_2O-$ または単結合であり； L^3 および L^4 は独立して、水素またはフッ素である。)

30

【0009】

[13] 液晶成分 C が、一般式 (6) で表される化合物の群から選択される少なくとも 1 つの化合物を含有する、[5] ~ [11] のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 22】



40

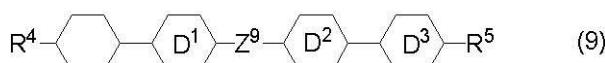
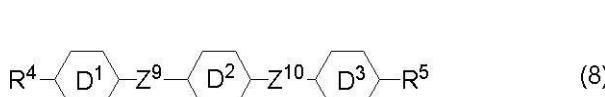
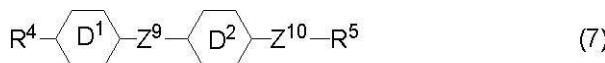
(式中、 R^3 は炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、アルキルにおいて任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく； X^3 は $-CN$ または $-C=C-N$ であり； 環 C^1 は、 1,4-シクロヘキシレン、 1,4-フェニレン、 ナフタレン-2,6-ジイル、 1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、 テトラヒドロピラン-2,5-ジイルまたはピリミジン-2,5-ジイル、 任意の水素がフッ

50

素で置き換えられた 1 , 4 - フェニレン、ナフタレン - 2 , 6 - ジイルであり ; Z⁸ は - (C H₂)₂ - 、 - C O O - 、 - C F₂ O - 、 - O C F₂ - 、 - C C - 、 - C H₂ O - 、または単結合であり ; L⁵ および L⁶ は独立して、水素またはフッ素である。)

[14] 液晶成分 D が、一般式 (7) ~ (9) で表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を含有する、 [5] ~ [13] のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 2 3 】



(式中、 R⁴ および R⁵ はそれぞれ独立して、炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり、アルキルおよびアルケニル中の任意の 1 つの水素は 1 つのフッ素で置き換えられてもよく、アルキルおよびアルケニル中の任意の - C H₂ - は - O - で置き換えられてもよく；環 D¹ 、環 D² および環 D³ はそれぞれ独立して、 1 , 4 - シクロヘキシレン、ピリミジン - 2 , 5 - ジイル、 1 , 4 - フェニレン、 2 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレン、 3 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレンまたは 2 , 5 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレンであり； Z⁹ および Z¹⁰ はそれぞれ独立して、 - C C - 、 - C O O - 、 - (C H₂)₂ - 、 - C H = C H - または単結合である。)

[15] 液晶成分において、ネマチック相と非液晶等方相とが共存する上限温度と下限温度との差が 3 ~ 150 である [1] ~ [14] のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

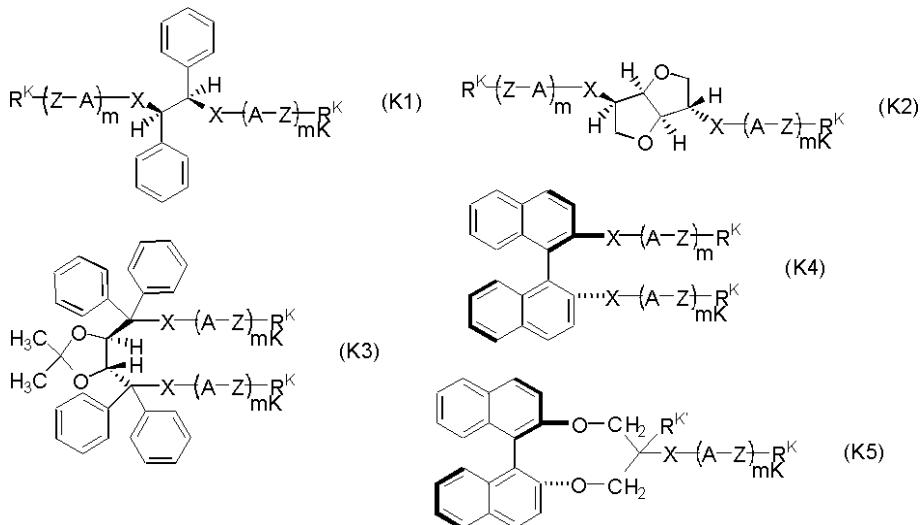
[16] 液晶組成物の全重量に対して、キラル剤を 1 ~ 40 重量 % 含む、 [1] ~ [15] のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

[17] 液晶組成物の全重量に対して、キラル剤を 5 ~ 15 重量 % 含む、 [1] ~ [15] のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【 0010 】

[18] キラル剤が、下記式 (K1) ~ (K5) のいずれかで表される化合物を 1 種以上含む、 [1] ~ [17] のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化 2 4 】



10

20

30

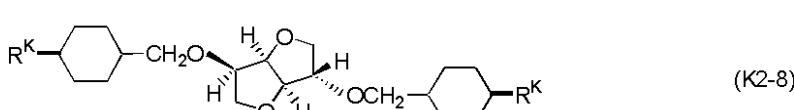
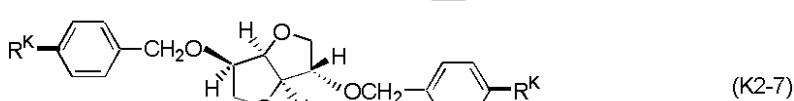
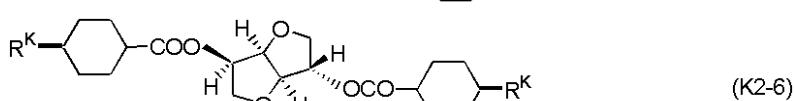
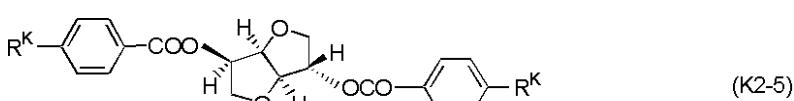
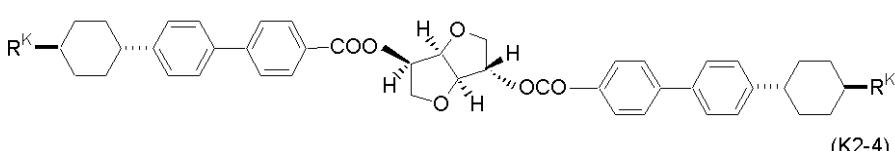
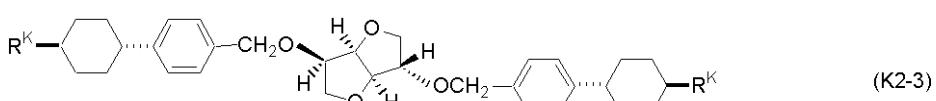
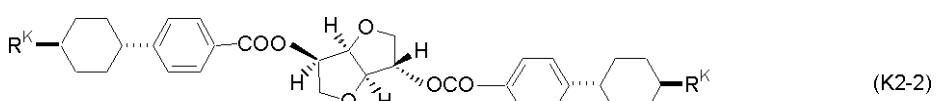
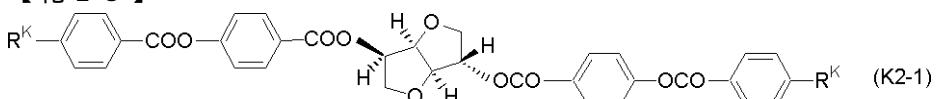
40

50

(式(K1)～(K5)中、R^Kはそれぞれ独立して、水素、ハロゲン、-C-N、-N=C=O、-N=C=Sまたは炭素数1～20のアルキルであり、このアルキル中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C-C-で置き換えられてもよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Aはそれぞれ独立して、芳香族性あるいは非芳香族性の3ないし8員環、または、炭素数9以上の縮合環であり、これらの環中の任意の水素がハロゲン、炭素数1～3のアルキルまたはハロアルキルで置き換えられてもよく、これらの環中のCH₂-は-O-、-S-または-NH-で置き換えられてもよく、これらの環中のCH=は-N=で置き換えられてもよく；Zはそれぞれ独立して、単結合または炭素数1～8のアルキレンであるが、アルキレン中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-N=N-、-CH=NH-、-N=CH-、-N(O)=N-、-N=N(O)-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C-C-で置き換えられてもよく、アルキレン中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Xは単結合、-COO-、-CH₂O-、-CF₂O-または-CH₂CH₂-であり；m^Kはそれぞれ独立して1～4の整数である。)

[19] キラル剤が、下記式(K2-1)～(K2-8)および(K5-1)～(K5-3)のいずれかで表される化合物を1種以上含む、[1]～[17]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

【化25】



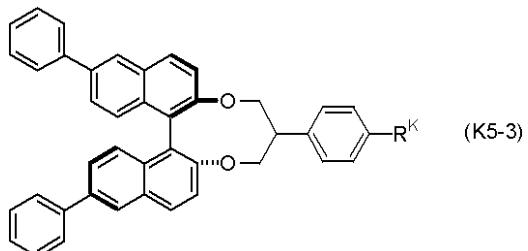
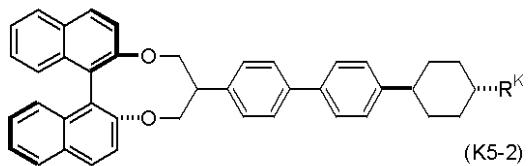
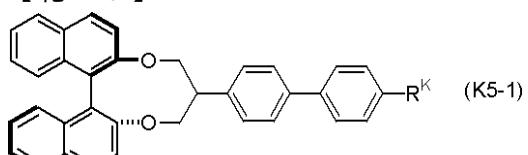
10

20

30

40

【化26】



10

(式(K2-1)～(K2-8)および(K5-1)～(K5-3)中、R^Kはそれぞれ独立して、炭素数3～10のアルキルであり、このアルキル中の環に隣接する-CH₂-は-O-で置き換えられてもよく、アルキル中の任意の-CH₂-は、-CH=CH-で置き換えられてもよい。)

20

【0011】

[20] 酸化防止剤および紫外線吸収剤からなる群から選ばれる1以上をさらに含む、[1]～[19]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

[21] 光学的に等方性の液晶相が二色以上の回折光を示さない、[1]～[20]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

[22] 光学的に等方性の液晶相が二色以上の回折光を示す、[1]～[20]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物。

30

[23] -20～70の温度においてキラルネマチック相を示し、この温度範囲の少なくとも一部において螺旋ピッチが700nm以下である、[1]～[22]のいずれか記載の光学的等方性液晶組成物。

【0012】

[24] [1]～[23]のいずれかに記載の光学的等方性液晶組成物と、重合性モノマーとを含む混合物。

[25] 重合性モノマーが光重合性モノマーまたは熱重合性モノマーである、[24]に記載の混合物。

[26] [24]または[25]に記載の混合物を重合して得られる、光学的に等方性の液晶相で駆動される素子に用いられる高分子／液晶複合材料。

40

[27] [24]または[25]に記載の混合物を非液晶等方相または光学的に等方性の液晶相で重合させて得られる、光学的に等方性の液晶相で駆動される素子に用いられる高分子／液晶複合材料。

[28] 高分子／液晶複合材料に含まれる高分子がメソゲン部位を有する、[26]または[27]に記載の高分子／液晶複合材料。

[29] 高分子／液晶複合材料に含まれる高分子が架橋構造を有する、[26]～[28]のいずれかに記載の高分子／液晶複合材料。

[30] 液晶組成物を60～99重量%、高分子を1～40重量%含む、[26]～[29]のいずれかに記載の高分子／液晶複合材料。

【0013】

50

[3 1] 一方または両方の面に電極が配置され、基板間に配置された液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料、および電極を介して液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料に電界を印加する電界印加手段を備えた液晶素子であって、前記液晶組成物が、[1] ~ [2 3] のいずれかに記載の液晶組成物であり、前記高分子 / 液晶複合材料が [2 6] ~ [3 0] のいずれかに記載の高分子 / 液晶複合材料である液晶素子。

[3 2] 一方または両方の面に電極が配置され、少なくとも一方が透明な一組の基板、基板間に配置された液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料、および基板の外側に配置された偏光板を有し、電極を介して液晶組成物または高分子 / 液晶複合材料に電界を印加する電界印加手段を備えた液晶素子であって、前記液晶組成物が、[1] ~ [2 3] のいずれかに記載の液晶組成物であり、前記高分子 / 液晶複合材料が [2 6] ~ [3 0] のいずれかに記載の高分子 / 液晶複合材料である液晶素子。
10

[3 3] 一組の基板の少なくとも一方の基板上において、少なくとも 2 方向に電界を印加できるように電極が構成されている [3 1] または [3 2] に記載の液晶素子。

[3 4] 互いに平行に配置された一組の基板の一方または両方に、少なくとも 2 方向に電界を印加できるように電極が構成されている [3 1] または [3 2] に記載の液晶素子。
。

[3 5] 電極がマトリックス状に配置されて、画素電極を構成し、各画素がアクティブ素子を備え、このアクティブ素子が薄膜トランジスター (TFT) である [3 1] ~ [3 4] のいずれかに記載の液晶素子。
20

【 0 0 1 4 】

本明細書中、「液晶化合物」は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物および液晶相を有しないが液晶組成物の成分として有用な化合物の総称である。液晶化合物、液晶組成物、液晶表示素子をそれぞれ化合物、組成物、素子と略すことがある。
。

【 0 0 1 5 】

本明細書中、「液晶素子」は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。ネマチック相の上限温度はネマチック相 - 等方相の相転移温度であり、そして単に透明点または上限温度と略すことがある。ネマチック相の下限温度を単に下限温度と略すことがある。
30

【 0 0 1 6 】

本明細書中、式 (1) で表わされる化合物を化合物 (1) と略すことがある。この略記は式 (2) などで表される化合物にも適用することがある。化学式において、六角形で囲んだ A 、 B などの記号はそれぞれ環構造 A 、環構造 B などに対応する。これらは、「環 A 」、「環 B 」と略すことがある。「環構造」とは、環状の基を言い、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環、ビシクロオクタン環またはシクロヘキサン環などを含む。ここで、ナフタレン環のような縮合多環炭化水素やビシクロオクタン環のような橋かけ環炭化水素などの複数の環を含む環構造も、環構造としては 1 つと数える。

環 A¹ 、 Y¹ 、 B など複数の同じ記号を同一の式または異なった式に記載したが、これらはそれぞれが同一であってもよいし、または異なってもよい。
40

【 0 0 1 7 】

「任意の」は、位置だけでなく個数についても任意であることを示すが、個数が 0 である場合を含まない。任意の A が B 、 C または D で置き換えられてもよいという表現は、任意の A が B で置き換えられる場合、任意の A が C で置き換えられる場合および任意の A が D で置き換えられる場合に加えて、複数の A が B ~ D の少なくとも 2 つで置き換えられる場合をも含むことを意味する。例えば、任意の - CH₂ - が - O - または - CH = CH - で置き換えられてもよいアルキルには、アルキル、アルケニル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシアルケニル、アルケニルオキシアルキルなどが含まれる。なお、本発明においては、連続する 2 つの - CH₂ - が - O - で置き換えられて、 - O - O - のようになることは好ましくない。そして、アルキルにおける末端の - CH₂ - が - O - で置き換えられることも好ましくない。
50

【0018】

また、本明細書中、特に言及しない限り、「%」は「重量%」を意味する。

【発明の効果】

【0019】

本発明の好ましい態様に係る光学的に等方性の液晶組成物および高分子／液晶複合材料は、比較的大きなカーラー係数を発現する。本発明の好ましい態様に係る光学的に等方性の液晶組成物および高分子／液晶複合材料は、応答速度が速い。本発明の好ましい態様に係る光学的に等方性の液晶組成物および高分子／液晶複合材料は、広い温度範囲使用できる。

そして、本発明の好ましい態様に係る光学的に等方性の液晶組成物および高分子／液晶複合材料は、これらの効果に基づいて表示素子等の液晶素子等に好適に用いることができる。10

【発明を実施するための最良の形態】

【0020】

1 本発明の光学的等方性液晶組成物

本発明の第1の態様は、光学的に等方性の液晶相で駆動される液晶素子に用いることのできる液晶組成物であり、光学的等方性の液晶相を発現する組成物である。

本発明の光学的等方性液晶組成物は、ジフルオロアルケニルを有する上記式(1-1)で表される化合物またはアルケニルを有する上記式(1-2)で表される化合物からなる液晶成分Aを含む液晶成分とキラル剤とを有する液晶組成物である。前記液晶成分Aを含む液晶成分には、環構造を3つ以上有する化合物が合計15重量%以上含まれる。液晶相の上限範囲および駆動電圧の観点から当該環構造を3つ以上有する化合物は好ましくは30重量%以上であり、より好ましくは50重量%以上である。20

一般的に、これらの式(1-1)または(1-2)で表される化合物は、 $n \times \times K_{3,3} / K_{1,1}$ の値を大きくすることにより、カーラー係数を大きくすることができるので、光学的に等方性の液晶相で駆動される組成物の駆動電圧を下げるための成分として有用である。したがって、一般的に、光学的等方性液晶組成物中に可能な限り含有させることが好ましい。

なお、式(1-1)と(1-2)で表される化合物は、これらの構造式において左の末端に二重結合を有するが、重合性モノマーとしては作用しない。

【0021】

本発明の液晶組成物に含まれる化合物は、一般的に、公知の方法、例えば必要な成分を高温度下で反応させる方法などにより合成される。

また、本発明に使用される液晶組成物を構成する化合物の各元素は、同位体元素からなる類縁体でも、その物理特性に大きな差異がない限り使用できる。

【0022】

1.1 光学的に等方性の液晶相

本発明の液晶組成物は光学的に等方性である。ここで、液晶組成物が光学的に等方性を有するとは、巨視的には液晶分子配列は等方的であるため光学的に等方性を示すが、微視的には液晶秩序が存在することをいう。

そして、本明細書において「光学的に等方性の液晶相」とは、ゆらぎではなく光学的に等方性の液晶相を発現する相を表し、たとえばプレートレット組織を発現する相（狭義のブルー相）はその一例である。40

【0023】

本発明の光学的に等方性の液晶組成物において、光学的に等方性の液晶相ではあるが、偏光顕微鏡観察下、ブルー相に典型的なプレートレット組織が観測されないことがある。そこで本明細書において、プレートレット組織を発現する相をブルー相と称し、ブルー相を含む光学的に等方性の液晶相を光学的に等方性の液晶相と称する。すなわち、本明細書において、ブルー相は光学的に等方性の液晶相に包含される。

【0024】

一般的に、ブルー相は3種類に分類され（ブルー相I、ブルー相II、ブルー相III50

)、これら3種類のブルー相はすべて光学活性であり、かつ、等方性である。ブルー相Iやブルー相IIのブルー相では異なる格子面からのプラッタ反射に起因する2種以上の回折光が観測される。

光学的に等方性の液晶相が二色以上の回折光を示さない状態とは、ブルー相I、ブルー相IIに観測されるプレートレット組織が観測されず、概ね一面単色であることを意味する。二色以上の回折光を示さない光学的に等方性の液晶相では、色の明暗が面内で均一であることまでは不要である。

【0025】

二色以上の回折光を示さない光学的に等方性の液晶相は、プラッタ反射による反射光強度が抑えられる、あるいは低波長側にシフトするという利点がある。

10

また、可視光の光を反射する液晶材料では、表示素子として利用する場合に色味が問題となることがあるが、二色以上の回折光を示さない液晶では、反射波長が低波長シフトするため、狭義のブルー相（プレートレット組織を発現する相）より長いピッチで可視光の反射を消失させることができる。

【0026】

なお、本発明の液晶組成物において、光学的に等方性の性質を示す温度範囲は、ネマチック相またはキラルネマチック相と等方相との共存温度範囲が広い液晶組成物に、キラル剤を添加し、光学的に等方性の液晶相を発現させることにより、広くすることができる。例えば、透明点の高い液晶化合物と透明点の低い液晶化合物とを混合し、広い温度範囲でネマチック相と等方相の共存温度範囲が広い液晶組成物を調製し、これにカイラル剤を添加することで、広い温度範囲で光学的に等方性の液晶相を発現する組成物を調製することができる。

20

【0027】

本発明の光学的等方性液晶組成物が微視的に有する液晶秩序に基づくピッチ（以下、単に「ピッチ」ということがある）は700nm以下であることが好ましく、500nm以下であることがさらに好ましく、350nm以下であることが特に好ましい。

【0028】

光学的に等方性の液晶相における電気複屈折はピッチが長くなるほど大きくなるので、所望の光学特性（透過率、回折波長など）が満たされる限り、キラル剤の種類と含有量を調整して、ピッチを長く設定することにより、電気複屈折を大きくすることができる。

30

【0029】

また、本明細書において、「非液晶等方相」とは一般的に定義される等方相、すなわち、無秩序相であり、局所的な秩序パラメーターがゼロでない領域が生成したとしても、その原因がゆらぎによるものである等方相である。たとえばネマチック相の高温側に発現する等方相は、本明細書では非液晶等方相に該当する。本明細書におけるキラルな液晶についても、同様の定義があてはまるものとする。

【0030】

1.2 液晶成分A

本発明の光学的等方性液晶組成物は、ジフルオロアルケニルを有する化合物（1-1）またはアルケニルを有する化合物（1-2）からなる液晶成分Aを必須成分とする。

40

液晶成分Aは、式（1-1）もしくは式（1-2）のどちらか一方で表される化合物だけからなる構成であっても、式（1-1）で表される化合物と式（1-2）で表される化合物とを含む構成であってもよい。

【0031】

（1）化合物（1-1）および化合物（1-2）

上記式（1-2）において、R¹は炭素数2～20のアルケニルであり、このアルケニル中の任意の-C H₂-は、-O-、-S-、-C O O-、-O C O-、-C H=C H-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルケニル基中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

【0032】

50

このような R¹において分岐よりも直鎖の方が好ましい。R¹は分岐の基であっても光学活性であるときは好ましい。アルケニルにおける -CH=CH- の好ましい立体配置は、二重結合の位置に依存する。-CH=CHCH₃、-CH=CHC₂H₅、-CH=CHC₃H₇、-CH=CHC₄H₉、-C₂H₄CH=CHCH₃、および -C₂H₄CH=CHC₂H₅ のような奇数位に二重結合をもつアルケニルにおいてはトランス配置が好ましい。-CH₂CH=CHCH₃、-CH₂CH=CHC₂H₅、および -CH₂CH=CHC₃H₇ のような偶数位に二重結合をもつアルケニルにおいてはシス配置が好ましい。好ましい立体配置を有するアルケニル化合物は、高い上限温度または液晶相の広い温度範囲を有する。Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 109 および Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 327 に詳細な説明がある。

10

【0033】

R¹は炭素数 2 ~ 20 のアルケニルの中でも、上記式 (CHN-1) ~ (CHN-12) で表される基が好ましい。

【0034】

また、式 (1-2) 中において、環 A¹ が芳香族である場合は、R¹ は式 (CHN-3)、(CHN-4)、および (CHN-6) ~ (CHN-8) からなる群から選ばれるいずれか 1 つで表される基であることが好ましい。他方、環 A¹ が非芳香族である場合は、R¹ は式 (CHN-1) ~ (CHN-6) からなる群から選ばれるいずれか 1 つで表される基であることが好ましい。

20

【0035】

上記式 (1-1) および (1-2) において、環 A¹、環 A²、環 A³ および 環 A⁴ は独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、シクロヘキセン環、ビシクロオクタン環、またはシクロヘキサン環であり、これらの環の任意の水素がハロゲンで置き換えられてもよく、環の -CH₂- は -O- または -S- で置き換えられてもよく、-CH= は -N= で置き換えられてもよい。

【0036】

環 A¹、環 A²、環 A³ および 環 A⁴ は、それぞれ独立して、上記式 (RG-1) ~ (RG-9) からなる群から選ばれるいずれか 1 つで表される環であることが好ましい。これらの環の中でも、環 A¹、環 A²、環 A³ および 環 A⁴ は、それぞれ独立して、上記式 (RG-1)、(RG-3)、(RG-4)、(RG-5) または (RG-8) で表される環であることが好ましい。

30

【0037】

上記式 (1-1) において、Z⁰ は単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の -CH₂- は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF- または -CC- で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

【0038】

式 (1-1) において、環 A¹ が芳香族の場合は、Z⁰ は炭素数 2、4、6 もしくは 8 のアルキレンまたはアルケニレン（但し二重結合が環 A¹ と隣接することはない）が好ましい。他方、式 (1-1) において、環 A¹ が非芳香族の場合は、Z⁰ は炭素数 2、4、6、8 のアルキレンまたはアルケニレンが好ましい。

40

【0039】

上記式 (1-1) および (1-2) において、Z¹、Z²、Z³ および Z⁴ はそれぞれ独立して、単結合、炭素数 1 ~ 4 のアルキレンであり、このアルキレン中の任意の -CH₂- は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-CH=CH-、-CF=CF- または -CC- で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

【0040】

Z¹、Z²、Z³ および Z⁴ は、単結合、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、-CC-、-COO-、-CF₂O-、-CH₂O- または -OCH₂- が好ましく、これら

50

の中でも、単結合、-COO-または-CF₂O-が好ましい。

また、これらの結合において、-CH=CH-、-CF=CF-、-CH=CH-(CH₂)₂-、および-(CH₂)₂-CH=CH-等のような二重結合を有する結合基では、その立体配置はシスよりもトランスが好ましい。

【0041】

上記式(1-1)および(1-2)において、L¹およびL²はそれぞれ独立して、水素またはハロゲンである。これらの中でも、L¹およびL²はそれぞれ独立して、水素またはフッ素であることが好ましい。

【0042】

上記式(1-1)および(1-2)において、X¹はハロゲン、-C≡N、-N=C=S、-CC≡N、-SF₅、-CHF₂、-CF₃、-CF₂CH₂F、-CF₂CHF₂、-CF₂CF₃、-(CF₂)₃-F、-CF₂CHFCF₃、-CHFCF₂CF₃、-(CF₂)₄-F、-(CF₂)₅-F、-OCHF₂、-OCF₃、-OCF₂CH₂F、-OCF₂CH₂CF₃、-OCF₂CF₃、-O-(CF₂)₃-F、-OCF₂CHFCF₃、-OCHFCF₂CF₃、-O-(CF₂)₄-F、-O-(CF₂)₅-F、-CH=CF₂、-CH=CHCF₃、または-CH=CHCF₂CF₃であり

【0043】

好ましいX¹の例は、フッ素、塩素、-C≡N、-N=C=S、-CF₃、-CHF₂、-OCF₃および-OCHF₂である。最も好ましいX¹の例は、フッ素、塩素、-C≡N、-N=C=S、-CF₃および-OCF₃である。

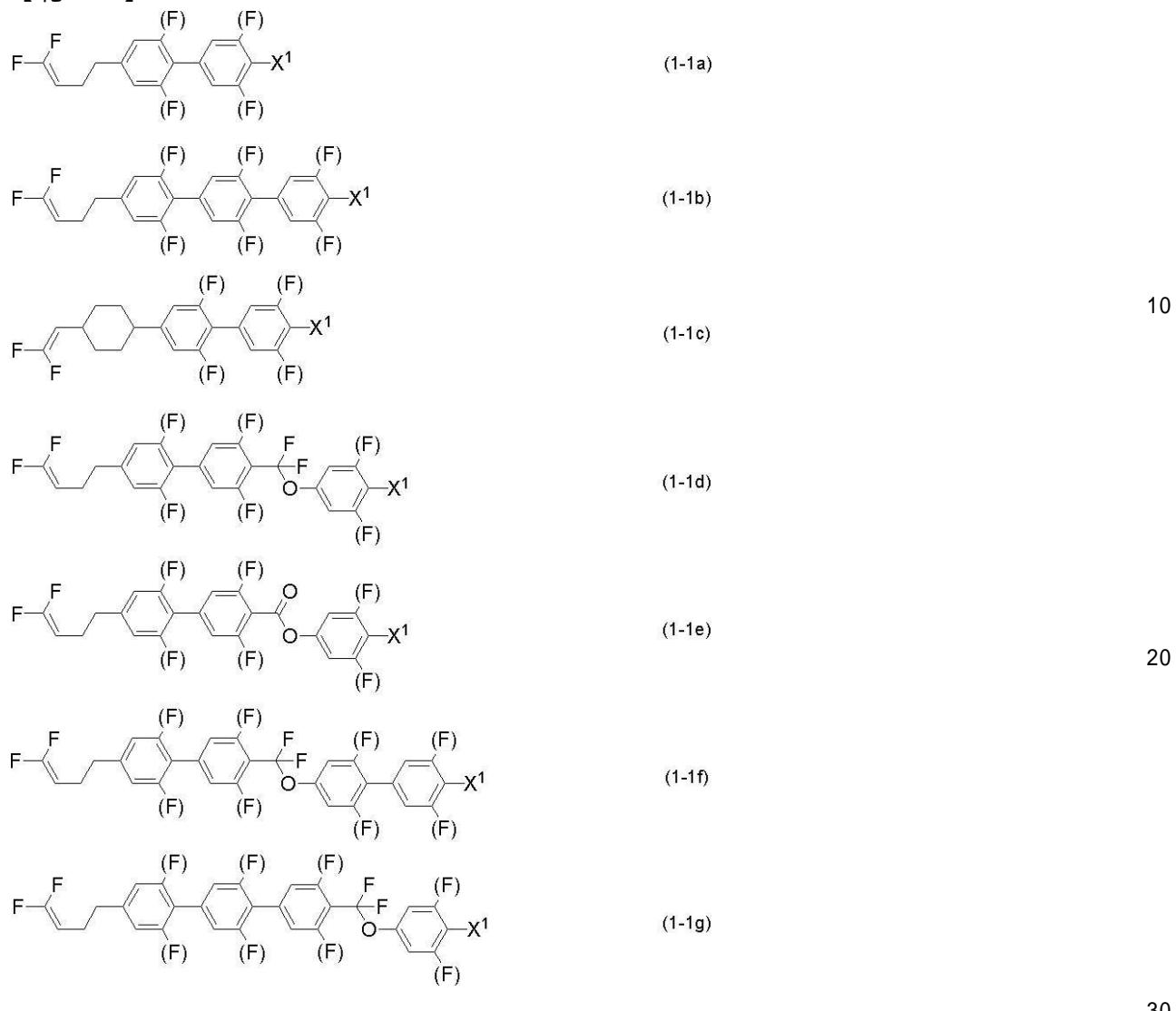
【0044】

式(1-1)および(1-2)においてl、m、nおよびoは独立して、0または1である。

【0045】

上記式(1-1)で表される化合物として、特に好ましいのは、下記式(1-1a)～(1-1g)で表される化合物である。

【化27】

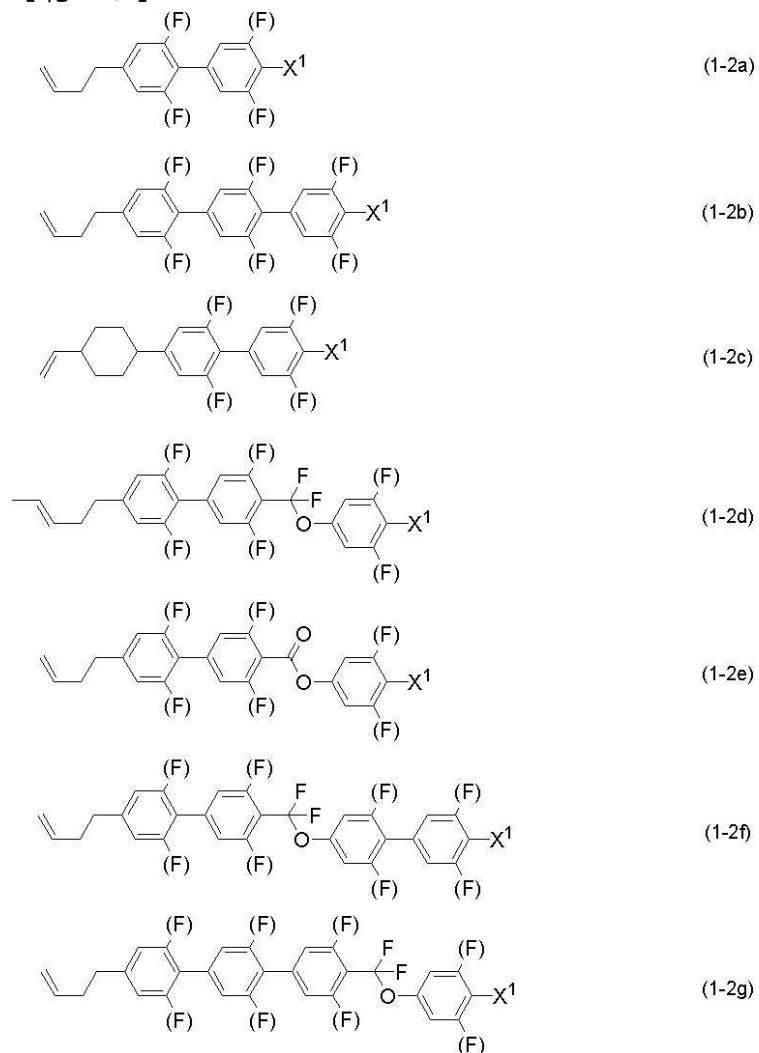


(式(1-1a)～(1-1g)中、 X^1 はフッ素、塩素、-C≡N、-CF₃、-CH₂F₂、-CH₂HF₂、-OCF₃、-OCHF₂、-OCH₂Fまたは-C≡C-CF₃であり、(F)は水素またはフッ素である。)

【0046】

上記式(1-2)で表される化合物として、特に好ましいのは、下記式(1-2a)～(1-2g)で表される化合物である。

【化28】



10

20

30

(式(1-2a)～(1-2g)中、X¹はフッ素、塩素、-C≡N、-CF₃、-CH₂F₂、-CH₂F、-OCF₃、-OCHF₂、-OCH₂Fまたは-C≡C-CH₂F₃であり、(F)は水素またはフッ素である。)

【0047】

(2) 化合物(1-1)および(1-2)の性質

化合物(1-1)および(1-2)におけるl、m、n、およびoの組み合わせ、環A¹～A⁴の種類、Z⁰、末端基R¹、末端のベンゼン環上の基およびその置換位置(L¹、L²およびX¹)、結合基Z¹～Z⁴等を適切に選択することによって、液晶成分Aの透明点、屈折率異方性、誘電率異方性等の物性を調整することが可能である。

l、m、nおよびoの組み合わせ、環A¹～A⁴、Z⁰、末端基R¹、末端基X¹、結合基Z¹～Z⁴、L¹およびL²の種類等と、化合物(1-1)および(1-2)の物性との一般的な関係を以下に説明する。

【0048】

一般的に、l+m+n+oが大きいほど、化合物(1-1)および(1-2)の透明点が高く、l+m+n+oが小さいほど化合物(1-1)および(1-2)の融点が低い。

【0049】

一般的に、環A¹～A⁴に芳香族環が多く含まれるほど、化合物(1-1)および(1-2)の屈折率異方性が大きくなる。任意の水素がハロゲンにより置き換えられた1,4-フェニレン、ピリミジン環、ピリジン環、テトラヒドロピラン環、1,3-ジオキサン-2,5-ジイルは大きな誘電率異方性発現に効果があり、シクロヘキサン環、テトラヒ

40

50

ドロピラン環は、化合物(1-1)および(1-2)の良好な相溶性発現に寄与する。

【0050】

一般的に、Z⁰とR¹がそれぞれ直鎖であるときは、化合物(1-1)および(1-2)の液晶相の温度範囲が広くそして粘度が小さくなる。他方、Z⁰とR¹がそれぞれ分岐鎖であるときは、化合物(1-1)および(1-2)は他の液晶化合物との相溶性が向上する。

【0051】

一般的に、結合基Z¹、Z²、Z³およびZ⁴がそれぞれ単結合、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH₂O-、-OCH₂-、-CF=C¹⁰F-、-(CH₂)₃-O-、-O-(CH₂)₃-、-(CH₂)₂-CF₂O-、-OCF₂-、-(CH₂)₂-または-(CH₂)₄-であるとき、化合物(1-1)および(1-2)の粘度が小さい。また、一般的に、結合基Z¹、Z²、Z³およびZ⁴がそれぞれ単結合、-(CH₂)₂-、-CF₂O-、-OCF₂-または-CH=CH-であるとき、化合物(1-1)および(1-2)の粘度がさらに小さくなる。一般的に、結合基Z¹、Z²、Z³およびZ⁴がそれ-Z-C-のとき、化合物(1-1)および(1-2)の屈折率異方性が大きい。一般的に、結合基が-COO-、-CF₂O-であるとき、化合物(1-1)および(1-2)の誘電率異方性が大きい。一般的に、Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴が単結合、-(CH₂)₂-、-CH₂O-、-CF₂O-、-OCF₂-または-(CH₂)₄-であるとき、化合物(1-1)および(1-2)は、比較的、化学的に安定であって、劣化が生じにくい。²⁰

一般的に、屈折率異方性または誘電率異方性が大きい場合、本発明の液晶素子が低電圧になる傾向があり、粘度が低いと応答速度が速くなる。

【0052】

一般的に、X¹がフッ素、塩素、-C-N、-N=C=S、-SF₅、-CF₃、-CHF₂、-CH₂F、-OCF₃、-OCHF₂または-OCH₂Fであるとき、化合物(1-1)および(1-2)の誘電率異方性が大きい。また、一般的に、X¹が-C-N、または-N=C=Sであるとき、化合物(1-1)および(1-2)の光学異方性が大きい。X¹がフッ素、-OCF₃またはアルキルであるときは、化学的に安定である。

【0053】

一般的に、L¹およびL²が共にフッ素であり、X¹がフッ素、塩素、-C-N、-N=C=S、-SF₅、-CF₃、-CHF₂、-CH₂F、-OCF₃、-OCHF₂³⁰または-OCH₂Fであるとき、化合物(1-1)および(1-2)の誘電率異方性が大きい。また、一般的に、L¹がフッ素でありX¹が-CF₃、-OCF₃であるとき、L¹およびL²が共にフッ素でありX¹が-CF₃、-OCF₃であるとき、または、L¹、L²およびX¹が全てフッ素であるとき、化合物(1-1)および(1-2)の誘電率異方性値が大きく、液晶相の温度範囲が広く、さらに、化学的に安定であり劣化を起こしにくい。

【0054】

1.3 液晶成分B

本発明の光学的等方性液晶組成物は、さらに、化合物(1-3)からなる液晶成分Bを含んでもよい。⁴⁰

【0055】

(1) 化合物(1-3)

式(1-3)において、環A¹、環A²、環A³および環A⁴、Z¹、Z²、Z³、Z⁴、L¹およびL²、X¹およびm、化合物(1-2)と化合物(1-3)と同様である。

【0056】

また、R²は、水素、炭素数1~20のアルキルであり、このアルキル中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-または-C-C-で置き換えられてよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよい。⁵⁰

このような R^2 において分岐よりも直鎖の方が好ましい。

【0057】

(2) 化合物(1-3)の性質

化合物(1-3)は環構造を3~5つ有する化合物であり、特に液晶成分Aが環構造を1および2つ有する化合物で構成される場合は、光学的等方性液晶組成物の温度範囲を高温側に拡大するために用いられる。

【0058】

化合物(1-3)におけるlおよびmの組み合わせ、環 $A^1 \sim A^4$ の種類、末端基 R^2 、末端のベンゼン環上の基およびその置換位置(L^1 、 L^2 および X^1)、結合基 $Z^1 \sim Z^4$ 等を適切に選択することによって、液晶成分Bの透明点、屈折率異方性、誘電率異方性等の物性を調整することが可能である。 10

【0059】

式(1-3)中の、環 $A^1 \sim A^4$ 、結合基 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 、末端基 X^1 、ならびに、 L^1 および L^2 は、式(1-1)または式(1-2)におけるそれらと同様である。

【0060】

lおよびmの組み合わせ、環 $A^1 \sim A^4$ 、 Z^0 、末端基 R^2 、末端基 X^1 、結合基 $Z^1 \sim Z^4$ 、 L^1 および L^2 の種類等と、化合物(1-3)の物性との一般的な関係を以下に説明する。

【0061】

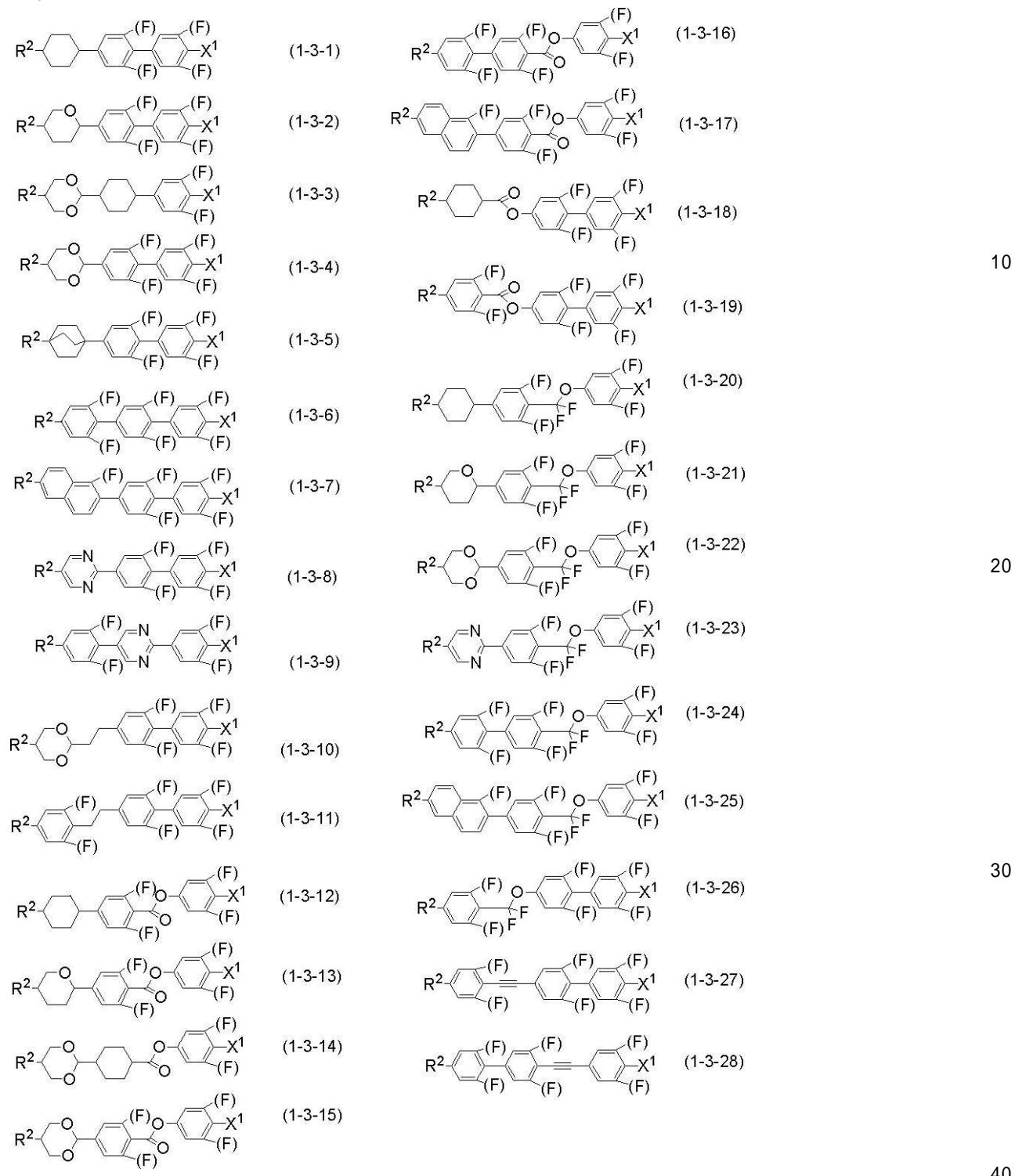
一般的に、l+mが大きいほど、化合物(1-3)の透明点が高く、l+mが小さいほど化合物(1-3)の融点が低い。

【0062】

一般的に、 R^2 が直鎖であるとき、化合物(1-3)の液晶相の温度範囲が広くそして粘度が小さくなる。他方、 R^2 がそれぞれ分岐鎖であるときは、化合物(1-3)は他の液晶化合物との相溶性が向上する。

化合物(1-3)の好ましい具体例としては、下記式(1-3-1)~(1-3-28)で表される化合物が挙げられる。

【化 2 9】



(式(1-3-1)～(1-3-28)中、R²とX¹は式(1-3)のR²とX¹と同じ意味を表し、(F)は水素またはフッ素を表す。)

【0063】

1.4 液晶成分C

本発明の光学的等方性液晶組成物は、さらに、化合物(2)および化合物(6)からなる群から選ばれる1以上である液晶成分Cを含んでもよい。

本発明の光学的等方性液晶組成物は、液晶成分Cを含むことによって、液晶相温度範囲、屈折率異方性値、誘電率異方性値および粘度等の自由度を増すことができる。

10

20

30

40

50

【0064】

一般的に、化合物(2)は、誘電率異方性値が正であり、熱安定性や化学的安定性が非常に優れているので、TFT駆動などのアクティブ駆動用の液晶組成物を調製する場合に好ましく用いられる。

特に、化合物(6)は、誘電率異方性値が正であり、その値が大きいので光学的に等方性の液晶相で駆動される素子を低駆動電圧化する場合に主として用いられることが好ましい。一般的に、化合物(6)は、粘度の調整、屈折率異方性値の調整および液晶相温度範囲を広げることができる。

【0065】

本発明の液晶組成物における成分Cの含有量は、液晶組成物の全重量に対して、0.1~99重量%であることが好ましく、1~99重量%がさらに好ましく、10~97重量%が特に好ましい。

【0066】

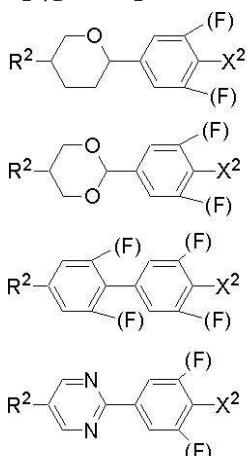
(1) 化合物(2)

式(2)において、R²は炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルキニルであり、アルキルおよびアルキニルにおいて任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく、任意の-C₂H₂-は-O-で置き換えられてもよく；X²はフッ素、塩素、-SF₅、-OCF₃、-OCHF₂、-CF₃、-CHF₂、-CH₂F、-OCF₂CHF₂、または-OCF₂CHFCF₃であり；環B¹は1,4-シクロヘキシレン、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、ピペリジン-1,4-ジイル、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイルまたは任意の水素がフッ素または塩素で置き換えられた1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイルであり；Z⁵は-(CH₂)₂-、-(CH₂)₄-、-COO-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH=CH-、-C=C-、-CH₂O-または単結合であり；L³およびL⁴は独立して、水素またはフッ素である。

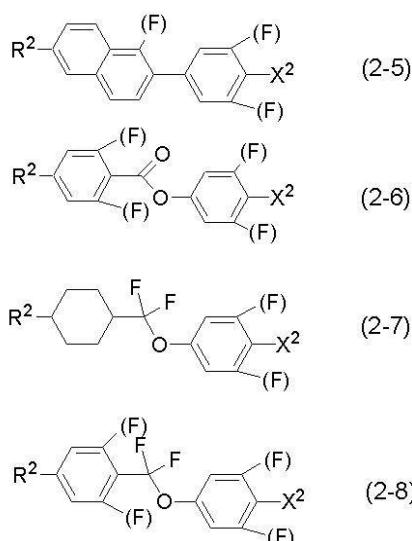
【0067】

化合物(2)の好ましい具体例としては、下記式(2-1)~(2-8)で表わされる化合物が挙げられる。

【化30】



(2-1) (2-2) (2-3) (2-4)



(2-5) (2-6) (2-7) (2-8)

(式(2-1)~(2-8)中、R²とX²は式(2)のR²とX²と同じ意味を表し、(F)は水素またはフッ素を表す。)

【0068】

(2) 化合物(6)

式(6)において、R³は炭素数1~10のアルキルであり、アルキルにおいて任意の

10

20

30

40

50

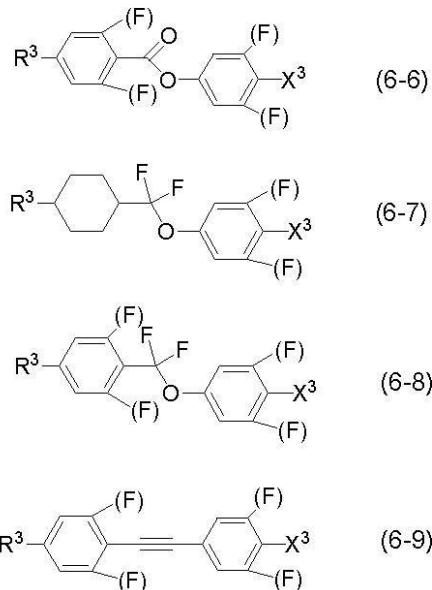
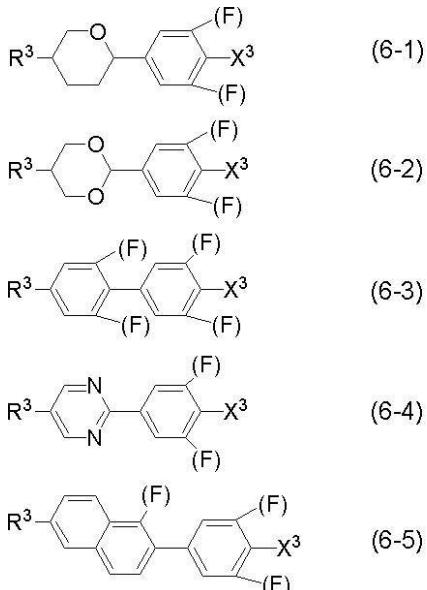
水素はフッ素で置き換えられてもよく、任意の - C H₂ - は - O - で置き換えられてもよく；X³ は - C N または - C C - C N であり；環C¹ は、1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、ナフタレン - 2, 6 - ジイル、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル、テトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイルまたはピリミジン - 2, 5 - ジイル、任意の水素がフッ素で置き換えられた 1, 4 - フェニレン、ナフタレン - 2, 6 - ジイルであり；Z⁸ は - (C H₂)₂ - 、- C O O - 、- C F₂ O - 、- O C F₂ - 、- C C - 、- C H₂ O - 、または単結合であり；L⁵ および L⁶ は独立して、水素またはフッ素である。

【0069】

化合物(6)の好ましい具体例としては、下記式(6-1)～(6-9)で表わされる化合物が挙げられる。

10

【化31】



(式(6-1)～(6-9)中、R³とX³は式(6)のR³とX³と同じ意味を表し、(F)は水素またはフッ素を表す。)

20

【0070】

1.5 液晶成分D

本発明の光学的等方性液晶組成物は、さらに、化合物(7)～化合物(9)からなる群から選ばれる1以上である液晶成分Dを含んでもよい。一般的に、液晶成分Dは、誘電率異方性値の絶対値が小さく、中性に近い化合物である。また、一般的に、化合物(9)は、主として粘度調整または屈折率異方性値の調整の効果がある。

【0071】

本発明の光学的等方性液晶組成物は、液晶成分Dを含むことによって、通常、液晶組成物を用いた液晶素子の駆動電圧が高くなり、応答速度が速くなる。したがって、液晶成分Dの含有量が多いほうが望ましいが、液晶組成物の駆動電圧の要求値を満たす必要があるので、一般的に、液晶成分Dの含有量は、液晶組成物全体に対して40重量%以下が好ましく、20重量%以下が好ましい。

40

【0072】

式(7)～(9)において、R⁴およびR⁵はそれぞれ独立して、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、アルキルおよびアルケニル中の任意の1つの水素は1つのフッ素で置き換えられてもよく、アルキルおよびアルケニル中の任意の-C H₂-は-O-で置き換えられてもよく；環D¹、環D²および環D³はそれぞれ独立して、1, 4 - シクロヘキシレン、ピリミジン - 2, 5 - ジイル、1, 4 - フェニレン、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレンまたは2,

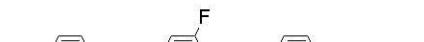
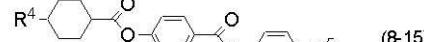
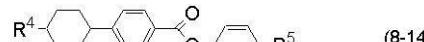
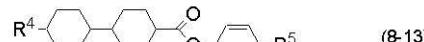
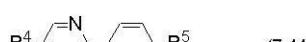
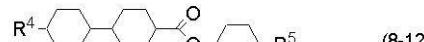
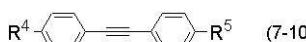
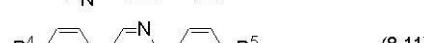
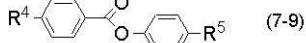
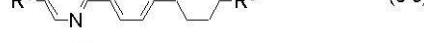
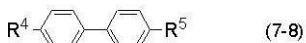
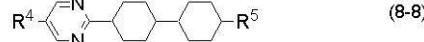
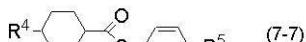
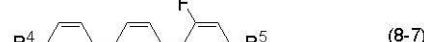
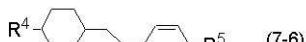
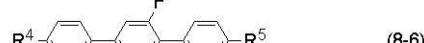
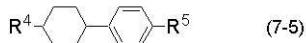
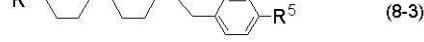
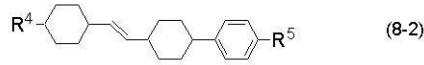
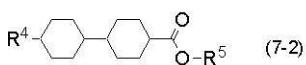
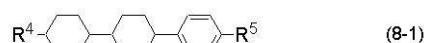
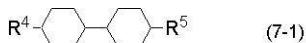
50

5 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレンであり ; Z⁹ および Z¹⁰ はそれぞれ独立して、 - C - C - 、 - COO - 、 - (CH₂)₂ - 、 - CH = CH - または単結合である。

【 0073 】

化合物(7)の好ましい具体例としては、下記式(7-1)～(7-11)で表わされる化合物が挙げられ、化合物(8)の好ましい具体例としては、下記式(8-1)～(8-18)で表わされる化合物が挙げられ、化合物(9)の好ましい具体例としては、下記式(9-1)～(9-6)で表わされる化合物が挙げられる。

【 化 32 】



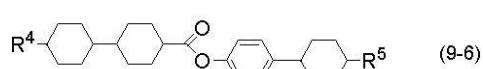
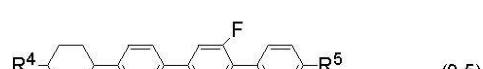
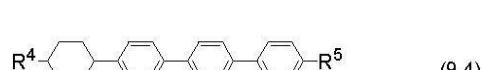
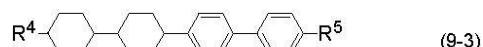
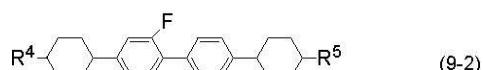
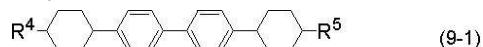
10

20

30

40

【化33】



10

20

(上記式中、R⁴およびR⁵は式(7)～式(9)のR⁴およびR⁵と同じ意味を表す)

【0074】

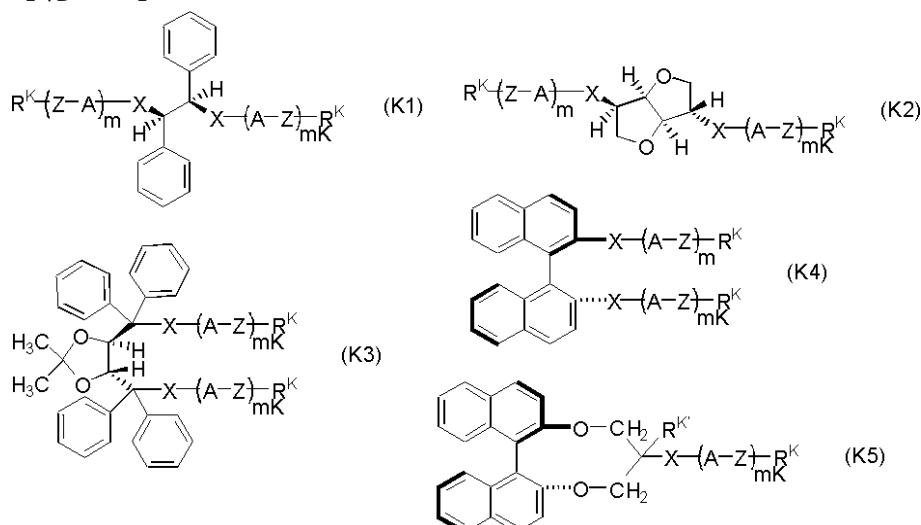
1.6 キラル剤

本発明の光学的等方性液晶組成物に含まれるキラル剤は特に限定されるものではないが、ねじり力(Helical Twisting Power)が大きい化合物が好ましい。ねじり力が大きい化合物は所望のピッチを得るために必要な添加量が少なくできるので、駆動電圧の上昇を抑えられ、実用上有利である。

具体的には、下記式(K1)～(K5)で表される化合物をキラル剤として用いることが好ましい。

【化34】

30



40

【0075】

式(K1)～(K5)中、R^Kは独立に、水素、ハロゲン(F, Cl, Br, I等)、-C-N、-N=C=O、-N=C=Sまたは炭素数1～20のアルキルであり、このアルキル中の任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、このアルキル中の任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Aは独立に、芳香族性あるいは非芳香族性の

50

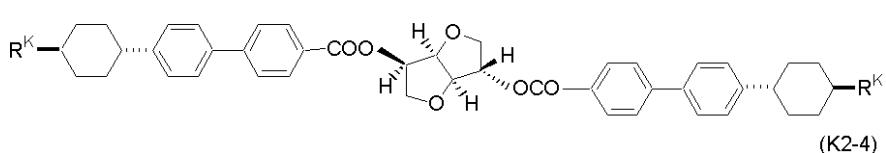
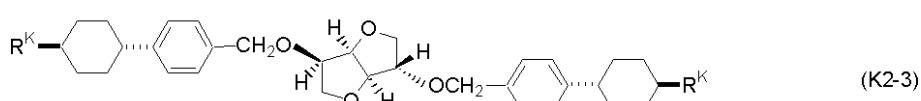
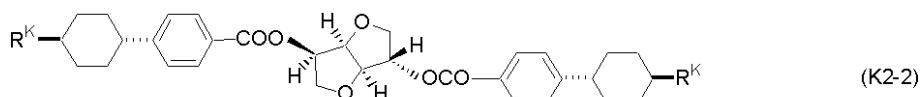
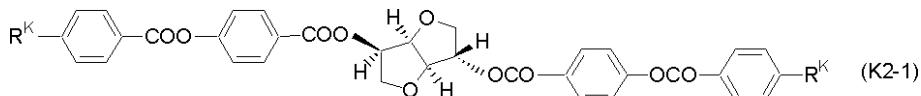
3ないし8員環、または、炭素数9以上の縮合環であり、これらの環の任意の水素がハロゲン、炭素数1～3のアルキルまたはハロアルキルで置き換えられてもよく、-CH₂-は-O-、-S-または-NH-で置き換えられてもよく、-CH=は-N=で置き換えられてもよく；Zは独立に、単結合、炭素数1～8のアルキレンであるが、任意の-CH₂-は、-O-、-S-、-COO-、-OCO-、-CSO-、-OCS-、-N=N-、-CH=N-、-N=CH-、-N(O)=N-、-N=N(O)-、-CH=CH-、-CF=CF-または-C=C-で置き換えられてもよく、任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；Xは単結合、-COO-、-CH₂O-、-CF₂O-、-CH₂CH₂-であり；mKは1～4である。

【0076】

10

これらの中でも、液晶組成物に添加されるキラル剤としては、式(K2)に含まれる式(K2-1)～式(K2-8)、および、式(K5)に含まれる式(K5-1)～式(K5-3)が好ましい。

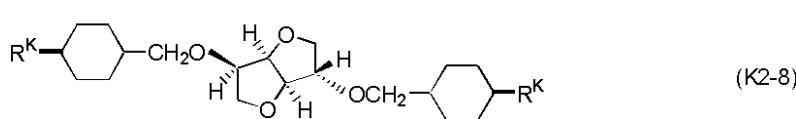
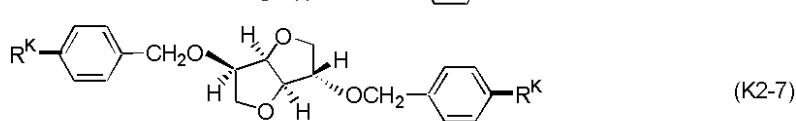
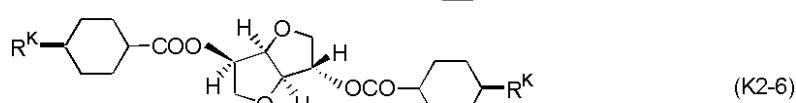
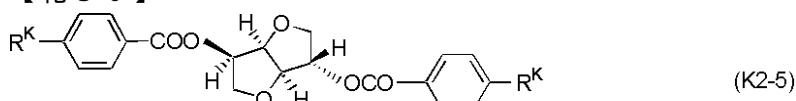
【化35】



20

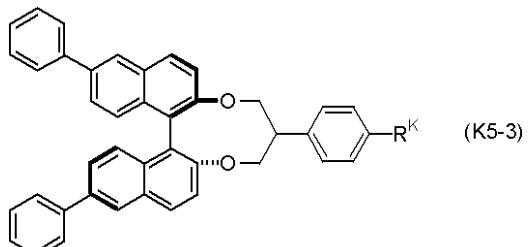
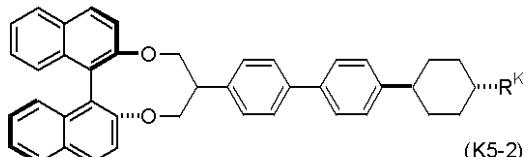
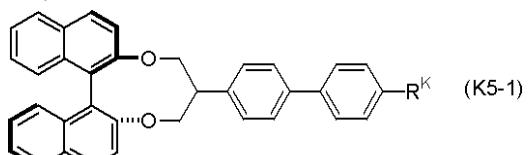
【化36】

30



40

【化37】



10

(式中、R^Kは独立に、炭素数1～10のアルキルであり、このアルキル中の環に隣接する-C H₂-は-O-で置き換えられてもよく、任意の-C H₂-は、-C H=C H-で置き換えられてもよい。)。

20

なお、上記「アルキル」は炭素数1～10のアルキルであることが好ましく、炭素数1～6のアルキルであることが更に好ましい。アルキルの例としては、制限するわけではないが、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、n-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、ペンチル、ヘキシル、ドデカニル等を挙げることができる。

【0077】

一般的に、本発明の光学的等方性液晶組成物におけるキラル剤の含有量は、1～20重量%が好ましく、1～10重量%が特に好ましい。これらの範囲でキラル剤を含有する液晶組成物は、光学的に等方性の液晶相を有するようになりやすくなる。

30

【0078】

また、液晶表示素子に用いる場合は、キラル剤濃度を調製して、可視域に回折や反射が実質的に認められないことが好ましい。

なお、液晶組成物に含有されるキラル剤は1種でも2種以上でもよい。

【0079】

2. 光学的等方性液晶組成物と重合性モノマーとを含む混合物、および、高分子／液晶複合材料

本発明の第2の態様は、光学的等方性液晶組成物と重合性モノマーとを含む混合物である。また、本発明の第3の態様は光学的に等方性の高分子／液晶複合材料であり、たとえば、本発明の第2の態様の光学的等方性液晶組成物と重合性モノマーとを含む混合物において重合反応を行うことによって製造できる。

40

【0080】

2.1 高分子／液晶複合材料を製造する際の重合条件

本発明の第3の態様は光学的に等方性の高分子／液晶複合材料とは、液晶材料と高分子の化合物の両者を含む複合材料であれば特に限定されないが、高分子の一部または全部が液晶材料に溶解していない状態で高分子が液晶材料と相分離している状態でもよい。本発明の高分子／液晶複合材料は、光学的に等方性の液晶組成物と、予め重合されて得られた高分子とを混合しても製造できるが、高分子の材料となる低分子量のモノマー、マクロモノマー、オリゴマー等（以下、まとめて「モノマー等」という）と光学的等方性液晶組成物とを混合してから、当該混合物において重合反応を行うことによって、製造されること

50

が好ましい。

モノマー等と液晶組成物とを含む本発明の第2の態様は、光学的等方性液晶組成物と重合性モノマーとを含む混合物を、本件明細書では、「重合性モノマー／液晶混合物」ともいう。「重合性モノマー／液晶混合物」には必要に応じて、後述する重合開始剤、硬化剤、触媒、安定剤、二色性色素（メロシアニン系、スチリル系、アゾ系、アゾメチニ系、アゾキシ系、キノフタロン系、アントラキノン系、テトラジン系等）、またはフォトクロミック化合物等を、本発明の効果を損なわない範囲で含んでもよい。たとえば、本件発明の重合性モノマー／液晶混合物には必要に応じて、重合開始剤を重合性モノマーの0.1～20重量部含有してもよい。

【0081】

10

上記混合物における重合は、混合物を非液晶等方相または光学的に等方性の液晶相で行われることが好ましい。すなわち、重合温度は、高分子／液晶複合材料が高透明性と等方性を示す温度であることが好ましい。より好ましくは、モノマーと液晶材料の混合物が非液晶等方相またはブルー相を発現する温度で、かつ、非液晶等方相ないしは光学的に等方性の液晶相で重合を終了する。すなわち、重合後は高分子／液晶複合材料が可視光線より長波長側の光を実質的に散乱せずかつ光学的に等方性の状態を発現する温度とするのが好ましい。

【0082】

2.2 複合材料を構成する高分子の原料

20

本発明の複合材料を構成する高分子の原料としては、例えば低分子量のモノマー、マクロモノマー、オリゴマーを使用することができ、本明細書において高分子の原料モノマーとは低分子量のモノマー、マクロモノマー、オリゴマー等を包含する意味で用いる。また、得られる高分子が三次元架橋構造を有するものが好ましく、そのために、高分子の原料モノマーとして2つ以上の重合性官能基を有する多官能性モノマーを用いることが好ましい。重合性の官能基は特に限定されないが、アクリル基、メタクリル基、グリシジル基、エポキシ基、オキセタニル基、ビニル基などを上げることができるが、重合速度の観点からアクリル基およびメタクリル基が好ましい。高分子の原料モノマー中、二つ以上の重合性のある官能基を持つモノマーをモノマー中に10重量%以上含有させると、本発明の複合材料において高度な透明性と等方性を発現しやすくなるので好ましい。

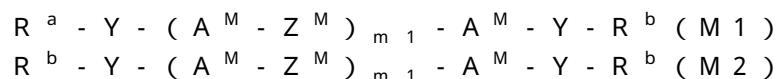
また、好適な複合材料を得るためにには、高分子はメソゲン部位を有するものが好ましく、高分子の原料モノマーとしてメソゲン部位を有する原料モノマーをその一部に、あるいは全部に用いることができる。

【0083】

(1) メソゲン部位を有する単官能性・二官能性モノマー

メソゲン部位を有する単官能性、または二官能性モノマーは構造上特に限定されないが、例えば下記の式(M1)または式(M2)で表される化合物を挙げることができる。

【0084】



【0085】

40

式(M1)中、R^aは、それぞれ独立して水素、ハロゲン、-C-N、-N=C=O、-N=C=S、または炭素数1～20のアルキルであり、これらのアルキルにおいて任意の-CH₂-は-O-、-S-、-CO-、-COO-、-OCO-、-CH=CH-、-CF=CF-、または-C-C-で置き換えられてもよく、これらのアルキルにおいて任意の水素はハロゲンまたは-C-Nで置き換えられてもよい。

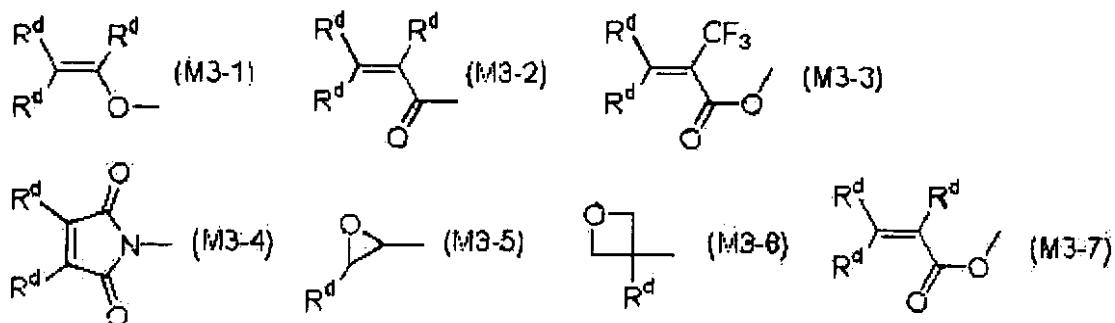
【0086】

好ましいR^aは、水素、ハロゲン、-C-N、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、-OCF₃、-OCF₂H、炭素数1～20のアルキル、炭素数1～19のアルコキシ、炭素数2～21のアルケニル、および炭素数2～21のアルキニルである。特に好ましいR^aは、-C-N、炭素数1～20のアルキルおよび炭素数1～19のアルコキシである。

50

式(M1)中、R^bは、それぞれ独立して、基(M3-1)～基(M3-7)の重合性基である。

【化38】



10

【0087】

式(M2)中、R^bは、それぞれ独立して、基(M3-1)～基(M3-7)の重合性基である。

【0088】

ここで、基(M3-1)～基(M3-7)におけるR^dは、それぞれ独立して水素、ハロゲンまたは炭素数1～5のアルキルであり、これらのアルキルにおいて任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよい。好ましいR^dは、水素、ハロゲンおよびメチルである。特に好ましいR^dは、水素、フッ素およびメチルである。

20

また、基(M3-2)、基(M3-3)、基(M3-4)、基(M3-7)はラジカル重合で重合するのが好適である。基(M3-1)、基(M3-5)、基(M3-6)はカチオン重合で重合するのが好適である。いずれもリビング重合なので、少量のラジカルあるいはカチオン活性種が反応系内に発生すれば重合は開始する。活性種の発生を加速する目的で重合開始剤を使用できる。活性種の発生には例えば光または熱を使用できる。

【0089】

式(M1)および(M2)中、A^Mは、それぞれ独立して芳香族性または非芳香族性の5員環、6員環または炭素数9以上の縮合環であるが、環中の-C H₂-は-O-、-S-、-N H-、または-N C H₃-で、環中の-C H=は-N=で置き換わってもよく、環上の水素原子はハロゲン、および炭素数1～5のアルキル、またはハロゲン化アルキルで置き換わってもよい。好ましいA^Mの具体例は、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、またはビシクロ[2.2.2]オクタン-1,4-ジイルであり、これらの環において任意の-C H₂-は-O-で置き換えられてもよく、任意の-C H=は-N=で置き換えられてもよく、これらの環において任意の水素はハロゲン、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数1～5のハロゲン化アルキルで置き換えられてもよい。

30

化合物の安定性を考慮して、酸素と酸素とが隣接した-C H₂-O-O-C H₂-よりも、酸素と酸素とが隣接しない-C H₂-O-C H₂-Oの方が好ましい。硫黄においても同様である。

40

【0090】

これらの中でも、特に好ましいA^Mは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2,6-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2-メチル-1,4-フェニレン、2-トリフルオロメチル-1,4-フェニレン、2,3-ビス(トリフルオロメチル)-1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、9-メチルフルオレン-2,7-ジイル、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、およびピリミジン-2,5-ジイルである。なお、

50

前記 1 , 4 - シクロヘキシレンおよび 1 , 3 - ジオキサン - 2 , 5 - ジイルの立体配置はシスよりもトランスの方が好ましい。

2 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレンは、3 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレンと構造的に同一であるので、後者は例示しなかった。この規則は、2 , 5 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレンと 3 , 6 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレンの関係などにも適用される。

【0091】

式 (M1) および (M2) 中、Y は、それぞれ独立して単結合または炭素数 1 ~ 20 のアルキレンであり、これらのアルキレンにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよい。好ましい Y は、単結合、 $- (CH_2)_{m_2}-$ 、 $-O(CH_2)_{m_2}-$ 、および $- (CH_2)_m$
 $_2O-$ (前記式中、r は 1 ~ 20 の整数である) である。特に好ましい Y は、単結合、 $- (CH_2)_{m_2}-$ 、 $-O(CH_2)_{m_2}-$ 、および $- (CH_2)_{m_2}O-$ (前記式中、m2 は 1 ~ 10 の整数である) である。化合物の安定性を考慮して、-Y-R^a および -Y-R^b は、それらの基中に $-O-O-$ 、 $-O-S-$ 、 $-S-O-$ 、または $-S-S-$ を有しない方が好ましい。

【0092】

式 (M1) および (M2) 中、Z^M は、それぞれ独立して単結合、 $- (CH_2)_{m_3}-$ 、 $-O(CH_2)_{m_3}-$ 、 $- (CH_2)_{m_3}O-$ 、 $-O(CH_2)_{m_3}O-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $- (CF_2)_2-$ 、 $- (CH_2)_2-COO-$ 、 $-OOC-$ 、 $(CH_2)_2-$ 、 $-OOC-$ 、 $CH=CH-COO-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-C-COO-$ 、 $-OCO-C-C-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $- (CH_2)_2-C$
 $H=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C-C-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-C-C-$ 、 $-O$
 $CF_2-(CH_2)_2-$ 、 $- (CH_2)_2-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ または $-CF_2O-$ (前記式中、m3 は 1 ~ 20 の整数である) である。

【0093】

好ましい Z^M は単結合、 $- (CH_2)_{m_3}-$ 、 $-O(CH_2)_{m_3}-$ 、 $- (CH_2)_{m_3}$
 $O-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $- (CH_2)_2-COO-$ 、 $-OOC-$ 、 $(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-OCF_2-$ 、および $-CF_2O-$ である。

【0094】

式 (M1) および (M2) 中、m1 は 1 ~ 6 の整数である。好ましい m1 は、1 ~ 3 の整数である。m1 が 1 のときは、6員環などの環を 2 つ有する二環の化合物である。m1 が 2 と 3 のときは、それぞれ三環と四環の化合物である。例えば m1 が 1 であるとき、2 つの A^M は同一であってもよいし、または異なってもよい。また、例えば m1 が 2 であるとき、3 つの A^M (または 2 つの Z^M) は同一であってもよいし、または異なってもよい。m1 が 3 ~ 6 であるときについても同様である。R^a、R^b、R^d、Z^M、A^M および Y についても同様である。

【0095】

式 (M1) で表される化合物 (M1) および式 (M2) で表される化合物 (M2) は²
H (重水素) 、¹³C などの同位体を天然存在比の量よりも多く含んでいても同様の特性
を有するので好ましく用いることができる。

【0096】

化合物 (M1) および化合物 (M2) の更に好ましい例は、下記式 (M1-1) ~ (M1-41) および (M2-1) ~ (M2-27) で表される化合物 (M1-1) ~ (M1-41) および化合物 (M2-1) ~ (M2-27) である。これらの化合物において、R^a、R^b、R^d、Z^M、A^M、Y および p の意味は、本発明の態様に記載した式 (M1) および式 (M2) のそれらと同一である。

【0097】

化合物 (M1-1) ~ (M1-41) および (M2-1) ~ (M2-27) における下記の部分構造について説明する。部分構造 (a1) は、任意の水素がフッ素で置き換えら

10

20

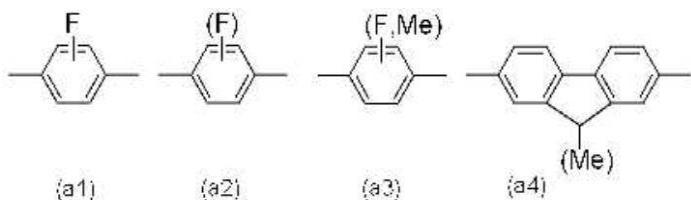
30

40

50

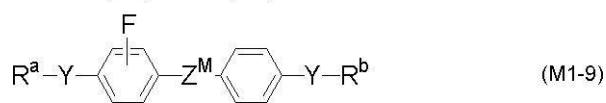
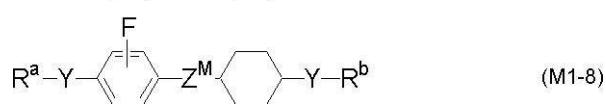
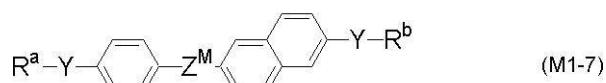
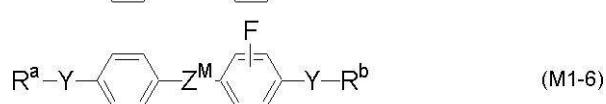
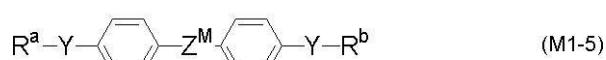
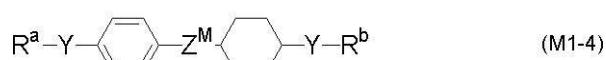
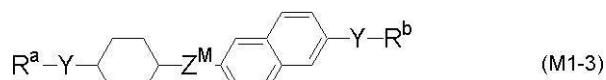
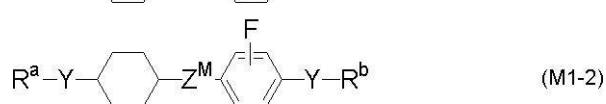
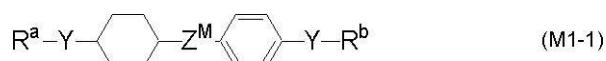
れた 1 , 4 - フェニレンを表す。部分構造 (a 2) は、任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1 , 4 - フェニレンを表す。部分構造 (a 3) は、任意の水素がフッ素またはメチルのいずれかで置き換えられてもよい 1 , 4 - フェニレンを表す。部分構造 (a 4) は、9 位の水素がメチルで置き換えられてもよいフルオレンを表す。

【化 3 9】



10

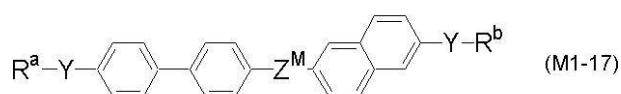
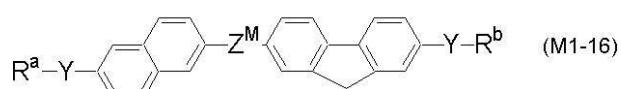
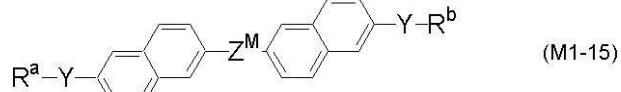
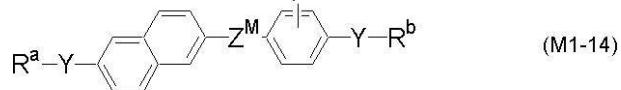
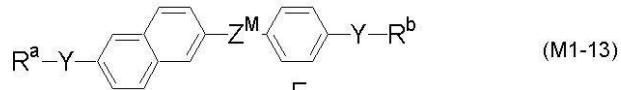
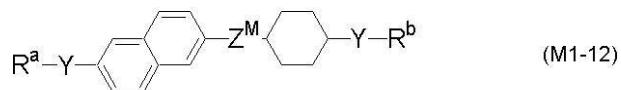
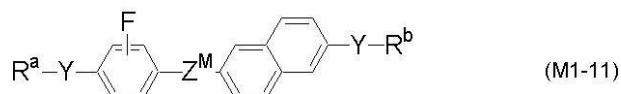
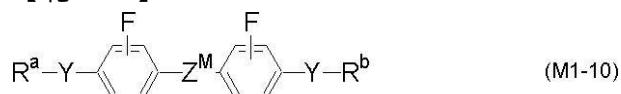
【化 4 0】



20

30

【化4 1】



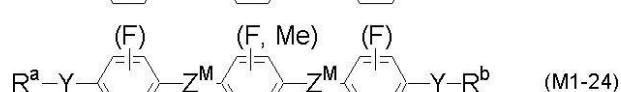
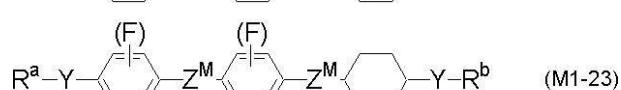
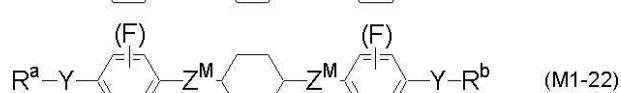
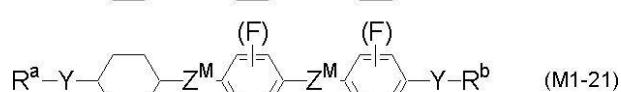
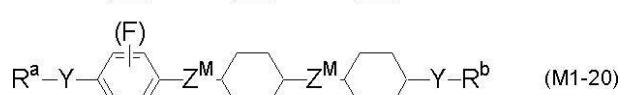
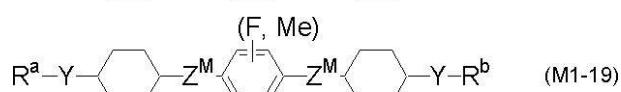
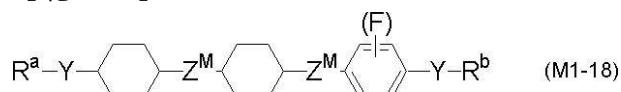
10

20

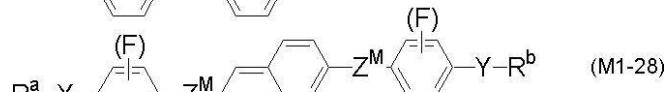
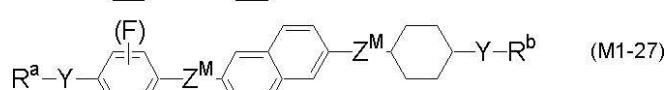
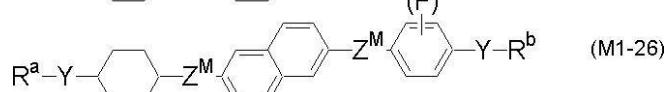
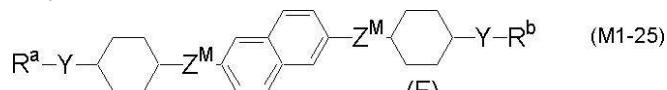
30

40

【化4 2】

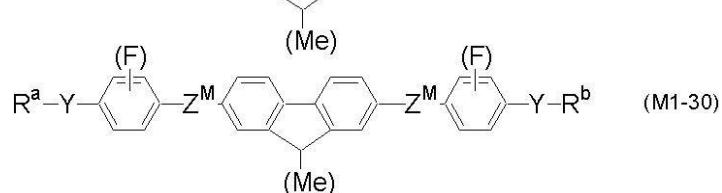
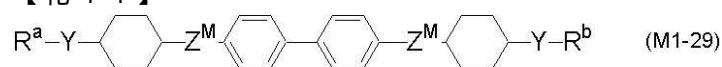


【化43】

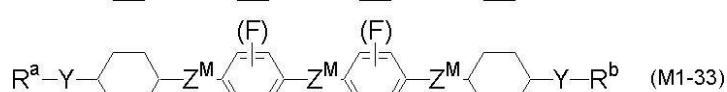
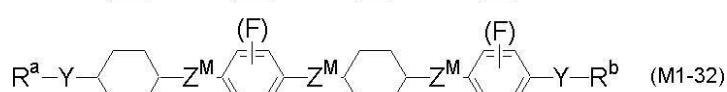
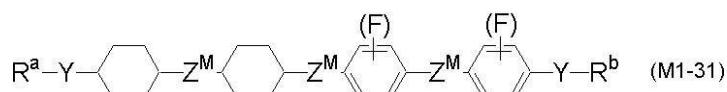


10

【化44】

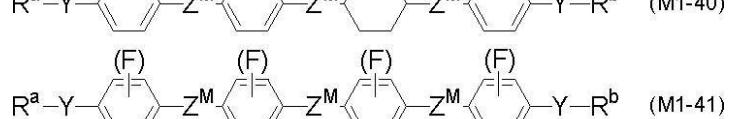
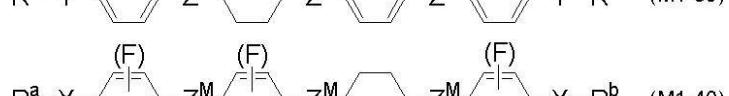
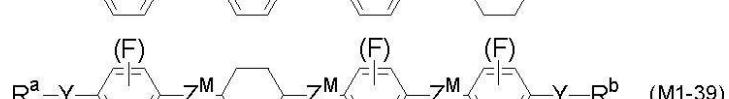
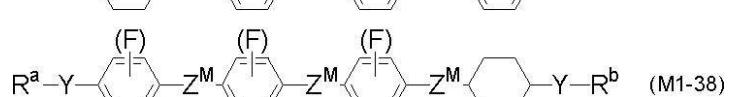
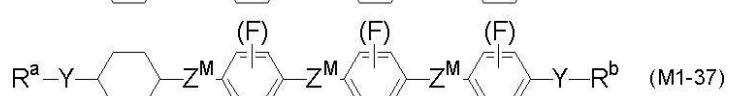
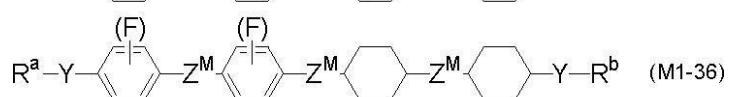
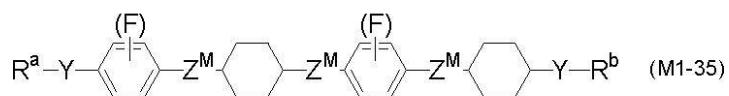
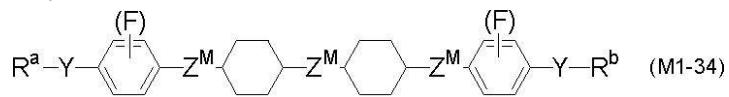


20



30

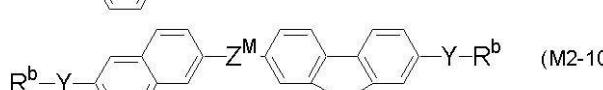
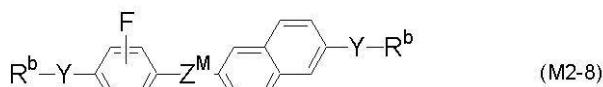
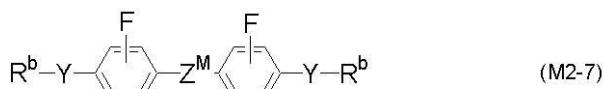
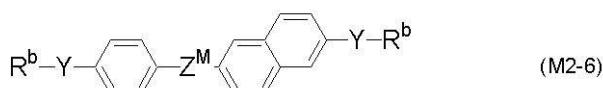
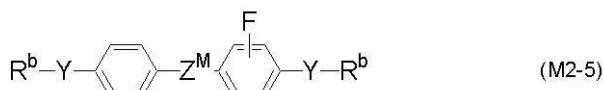
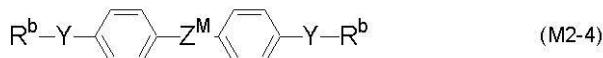
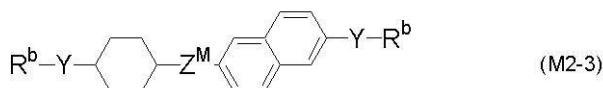
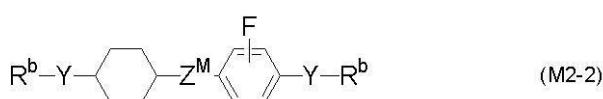
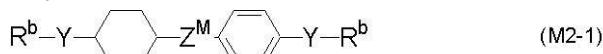
【化45】



10

20

【化46】

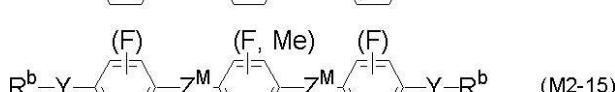
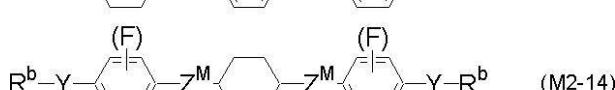
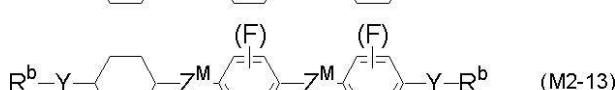
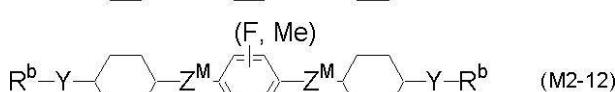
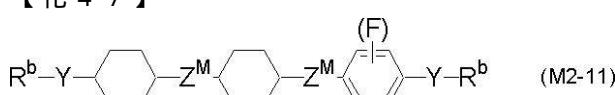


10

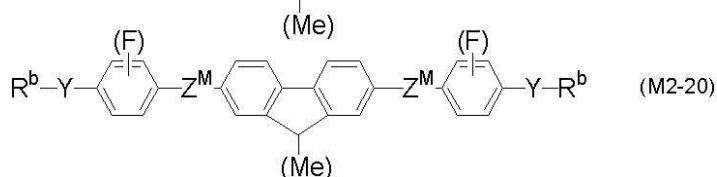
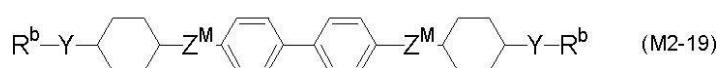
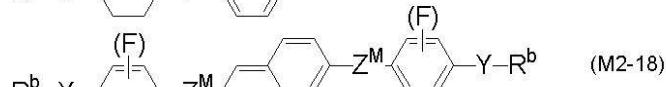
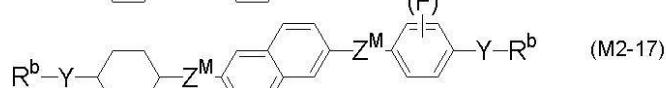
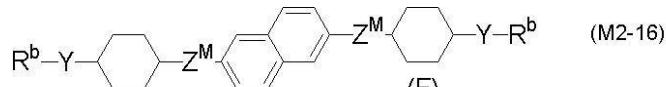
20

30

40

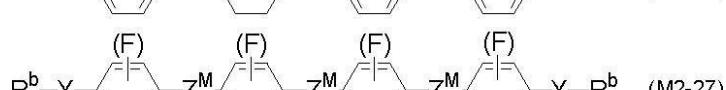
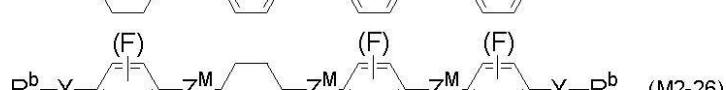
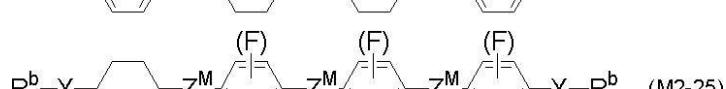
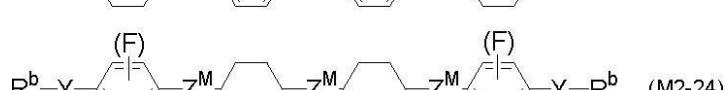
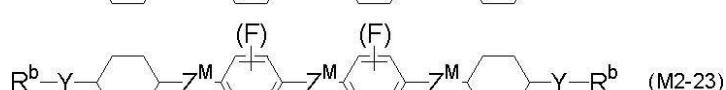
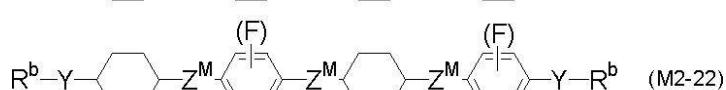
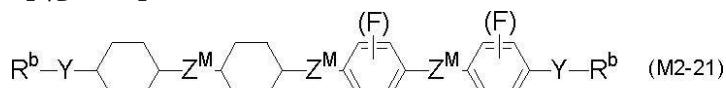


【化48】



10

【化49】



20

30

40

【0098】

前述のメソゲン部位を有さないモノマー、およびメソゲン部位を持つモノマー（M1）、および（M2）以外の重合性化合物を必要に応じて使用することができる。

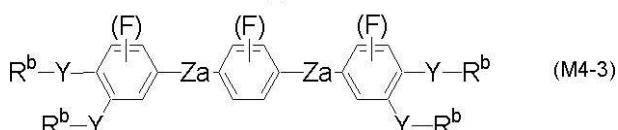
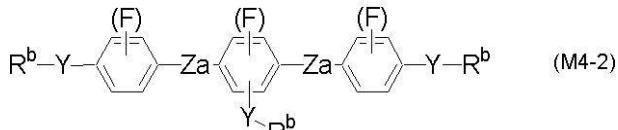
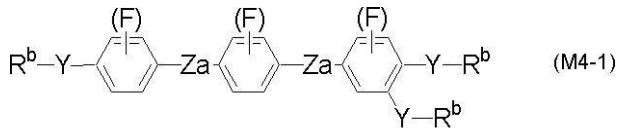
【0099】

本発明の高分子／液晶複合材料の光学的等方性を最適化する目的で、メソゲン部位を持ち3つ以上の重合性官能基を持つモノマーを使用することもできる。メソゲン部位を持ち3つ以上の重合性官能基を持つモノマーとしては公知の化合物を好適に使用できるが、例えば、（M4-1）～（M4-3）であり、より具体的な例として、特開2000-327632号、特開2004-182949号、特開2004-59772号に記載された化合物をあげることができる。ただし、（M4-1）～（M4-3）において、R^b、Z

50

a、Y、および(F)は前述と同一の意味を示す。

【化50】



10

【0100】

なお、本明細書において、「炭素数1～20のアルキル」は、炭素数1～10のアルキルであることが好ましく、炭素数1～6のアルキルであることが更に好ましい。アルキルの例としては、制限するわけではないが、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、n-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、ペンチル、ヘキシル、ドデカニル等を挙げることができる。

20

【0101】

本明細書において、「炭素数2～21のアルケニル」は、炭素数2～10のアルケニルであることが好ましく、炭素数2～6のアルケニルであることが更に好ましい。アルケニルの例としては、制限するわけではないが、ビニル、アリル、プロペニル、イソプロペニル、2-メチル-1-プロペニル、2-メチルアリル、2-ブテニル等を挙げができる。

30

【0102】

本明細書において、「炭素数2～21のアルキニル」は、炭素数2～10のアルキニルであることが好ましく、炭素数2～6のアルキニルであることが更に好ましい。アルキニルの例としては、制限するわけではないが、エチニル、プロピニル、ブチニル等を挙げることができる。

【0103】

本明細書において、「炭素数1～19のアルコキシ」は、炭素数1～10のアルコキシであることが好ましく、炭素数2～6のアルコキシであることが更に好ましい。アルコキシの例としては、制限するわけではないが、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ等がある。

【0104】

(2) メソゲン部位を有さない重合性のある官能基を持つモノマー

メソゲン部位を有さない重合性のある官能基を持つモノマーとして、例えば、炭素数1～30の直鎖あるいは分岐アクリレート、炭素数1～30の直鎖あるいは分岐ジアクリレート、三つ以上の重合性官能基を有するモノマーとしては、グリセロール・プロポキシレート(1PO/OH)トリアクリレート、ペンタエリスリトール・プロポキシレート・トリアクリレート、ペンタエリスリトール・トリアクリレート、トリメチロールプロパン・エトキシレート・トリアクリレート、トリメチロールプロパン・プロポキシレート・トリアクリレート、トリメチロールプロパン・トリアクリレート、ジ(トリメチロールプロパン)テトラアクリレート、ペンタエリスリトール・テトラアクリレート、ジ(ペンタエリスリトール)ペンタアクリレート、ジ(ペンタエリスリトール)ヘキサアクリレート、トリメチロールプロパン・トリアクリレートなどを挙げることができると、これらに限定されるものではない。

40

50

【0105】

2.3 重合開始剤

本発明の複合材料を構成する高分子の製造における重合反応は特に限定されず、例えば、光ラジカル重合、熱ラジカル重合、光カチオン重合等が行われる。

【0106】

光ラジカル重合において用いることができる光ラジカル重合開始剤の例は、ダロキュア（DAROCUR、登録商標）1173および4265（いずれも商品名、チバ・スペシャリティ・ケミカルズ（株））、イルガキュア（IRGACURE、登録商標）184、369、500、651、784、819、907、1300、1700、1800、1850、および2959（いずれも商品名、チバ・スペシャリティ・ケミカルズ（株））10などである。

【0107】

熱ラジカル重合において用いることができる熱によるラジカル重合の好ましい開始剤の例は、過酸化ベンゾイル、ジイソプロピルパーオキシジカルボネート、t - ブチルパーオキシ - 2 - エチルヘキサノエート、t - ブチルパーオキシピバレート、t - ブチルパーオキシジイソブチレート、過酸化ラウロイル、2 , 2 ' - アゾビスイソ酪酸ジメチル（MABI）、ジt - ブチルパーオキシド（DTBPO）、アゾビスイソブチロニトリル（AIN）、アゾビスシクロヘキサンカルボニトリル（ACN）などである。

【0108】

光カチオン重合において用いることができる光カチオン重合開始剤として、ジアリールヨードニウム塩（以下、「DAS」という。）、トリアリールスルホニウム塩（以下、「TAS」という。）などがあげられる。20

【0109】

DASとしては、ジフェニルヨードニウムテトラフルオロボレート、ジフェニルヨードニウムヘキサフルオロホスホネート、ジフェニルヨードニウムヘキサフルオロアルセネート、ジフェニルヨードニウムトリフルオロメタンスルホネート、ジフェニルヨードニウムトリフルオロアセテート、ジフェニルヨードニウム - p - トルエンスルホネート、ジフェニルヨードニウムテトラ（ペンタフルオロフェニル）ボレート、4 - メトキシフェニルフェニルヨードニウムヘキサフルオロホスホネート、4 - メトキシフェニルフェニルヨードニウムヘキサフルオロアルセネート、4 - メトキシフェニルフェニルヨードニウムトリフルオロメタンスルホネート、4 - メトキシフェニルフェニルヨードニウムトリフルオロアセテート、4 - メトキシフェニルフェニルヨードニウム - p - トルエンスルホナートなどが挙げられる。30

【0110】

DASには、チオキサントン、フェノチアジン、クロロチオキサントン、キサントン、アントラセン、ジフェニルアントラセン、ルブレンなどの光増感剤を添加することで高感度化することもできる。

【0111】

TASとしては、トリフェニルスルホニウムテトラフルオロボレート、トリフェニルスルホニウムヘキサフルオロホスホネート、トリフェニルスルホニウムヘキサフルオロアルセネート、トリフェニルスルホニウムトリフルオロメタンスルホナート、トリフェニルスルホニウムトリフルオロアセテート、トリフェニルスルホニウム - p - トルエンスルホネート、トリフェニルスルホニウムテトラ（ペンタフルオロフェニル）ボレート、4 - メトキシフェニルジフェニルスルホニウムヘキサフルオロホスホネート、4 - メトキシフェニルジフェニルスルホニウムヘキサフルオロアルセネート、4 - メトキシフェニルジフェニルスルホニウムトリフルオロメタンスルホナート、4 - メトキシフェニルジフェニルスルホニウムトリフルオロアセテート、4 - メトキシフェニルジフェニルスルホニウム - p - トルエンスルホネートなどが挙げられる。40

【0112】

光カチオン重合開始剤の具体的な商品名の例は、サイラキュア (Cyracure、登録商標) UV-I - 6990、サイラキュアUV-I - 6974、サイラキュアUV-I - 6992 (それぞれ商品名、UCC (株))、アデカオプトマー SP - 150、SP - 152、SP - 170、SP - 172 (それぞれ商品名、(株)ADEKA)、Rhodorsil Photoinitiator 2074 (商品名、ローディアジャパン (株))、イルガキュア (IRGACURE、登録商標) 250 (商品名、チバ・スペシャリティ・ケミカルズ (株))、UV - 9380C (商品名、GE東芝シリコーン (株)) などである。

【0113】

2.4 硬化剤等

本発明の複合材料を構成する高分子の製造において、前記モノマー等および重合開始剤の他にさらに1種または2種以上の他の好適な成分、例えば、硬化剤、触媒、安定剤等を加えてもよい。 10

【0114】

硬化剤としては、通常、エポキシ樹脂の硬化剤として使用されている従来公知の潜在性硬化剤が使用できる。潜在性エポキシ樹脂用硬化剤は、アミン系硬化剤、ノボラック樹脂系硬化剤、イミダゾール系硬化剤、酸無水物系硬化剤等が挙げられる。アミン系硬化剤の例としては、ジエチレントリアミン、トリエチレンテトラアミン、テトラエチレンペタアミン、m-キシレンジアミン、トリメチルヘキサメチレンジアミン、2-メチルペンタメチレンジアミン、ジエチルアミノプロピルアミン等の脂肪族ポリアミン、イソフォロジアミン、1,3-ビスマミノメチルシクロヘキサン、ビス(4-アミノシクロヘキシル)メタン、ノルボルネンジアミン、1,2-ジアミノシクロヘキサン、ラロミン等の脂環式ポリアミン、ジアミノジフェニルメタン、ジアミノジフェニルエタン、メタフェニレンジアミン等の芳香族ポリアミンなどが挙げられる。 20

【0115】

ノボラック樹脂系硬化剤の例としては、フェノールノボラック樹脂、ビスフェノールノボラック樹脂などが挙げられる。イミダゾール系硬化剤としては、2-メチルイミダゾール、2-エチルヘキシルイミダゾール、2-フェニルイミダゾール、1-シアノエチル-2-フェニルイミダゾリウム・トリメリテートなどが挙げられる。

【0116】

酸無水物系硬化剤の例としては、テトラヒドロ無水フタル酸、ヘキサヒドロ無水フタル酸、メチルテトラヒドロ無水フタル酸、メチルヘキサヒドロ無水フタル酸、メチルシクロヘキセンテトラカルボン酸二無水物、無水フタル酸、無水トリメリット酸、無水ピロメリット酸、ベンゾフェノンテトラカルボン酸二無水物などが挙げられる。 30

【0117】

また、グリシジル、エポキシ、オキセタニルを有する重合性化合物と硬化剤との硬化反応を促進するための硬化促進剤をさらに用いてもよい。硬化促進剤としては、例えば、ベンジルジメチルアミン、トリス(ジメチルアミノメチル)フェノール、ジメチルシクロヘキシルアミン等の3級アミン類、1-シアノエチル-2-エチル-4-メチルイミダゾール、2-エチル-4-メチルイミダゾール等のイミダゾール類、トリフェニルホスフィン等の有機リン系化合物、テトラフェニルホスホニウムプロマイド等の4級ホスホニウム塩類、1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]ウンデセン-7等やその有機酸塩等のジアザビシクロアルケン類、テトラエチルアンモニウムプロマイド、テトラブチルアンモニウムプロマイド等の4級アンモニウム塩類、三フッ化ホウ素、トリフェニルボレート等のホウ素化合物などが挙げられる。これらの硬化促進剤は単独または2種以上を混合して使用することができる。 40

【0118】

また、例えば貯蔵中の不所望な重合を防止するために、安定剤を添加することが好ましい。安定剤として、当業者に知られているすべての化合物を用いることができる。安定剤の代表例としては、4-エトキシフェノール、ハイドロキノン、ブチル化ヒドロキシトルエン(BHT)等が挙げられる。 50

【0119】

本発明の好ましい態様に係る光学的に等方性の高分子／液晶複合材料は、光学的に等方性の液晶相を広い温度範囲で発現させることが可能である。また、本発明の好ましい態様に係る高分子／液晶複合材料は、応答速度が極めて速い。また、本発明の好ましい態様に係る高分子／液晶複合材料は、これらの効果に基づいて表示素子等の光素子等に好適に用いることができる。

【0120】**2.5 液晶組成物等の含有率**

本発明の高分子／液晶複合材料中における液晶組成物の含有率は、複合材料が等方性を発現できる範囲であれば、可能な限り高含有率であることが好ましい。液晶組成物の含有率が高い方が、本発明の複合材料の電気複屈折値（カーラー係数）が大きくなるからである。10

【0121】

本発明の高分子／液晶複合材料において、液晶組成物の含有率は複合材料に対して60～99重量%であることが好ましく、60～95重量%がさらに好ましく、65～95重量%が特に好ましい。高分子の含有率は複合材料に対して1～40重量%であることが好ましく、5～40重量%がさらに好ましく、5～35重量%が特に好ましい。

【0122】**3 液晶素子**

本発明の第4の態様は、光学的等方性液晶組成物または高分子／液晶複合材料（以下、液晶組成物と高分子／液晶複合材料をあわせて「液晶媒体」ということがある）を含む光学的に等方性の液晶相で駆動される光素子である。20

液晶表示素子の構造例としては、図1に示すように、櫛歯電極基板の電極が、左側から伸びる電極1と右側から伸びる電極2が交互に配置された構造を挙げることができる。電極1と電極2との間に電位差がある場合、図1に示すような櫛歯電極基板上では、上方向と下方向の2つの方向の電界が存在する状態を提供できる。

【実施例】**【0123】**

以下、実施例により本発明さらに具体的に説明するが、本発明はこれらの実施例により限定されるものではない。

【0124】

本明細書の実施例において、Iは非液晶等方相、Nはネマチック相、N^{*}はキラルネマチック相、B Pはブルー相、B P Xは二色以上の回折光が観測されない光学的に等方性の液晶相を表す。本明細書において、I-N相転移点をN-I点ということがある。I-N^{*}転移点をN^{*}-I点ということがある。I-B P相転移点をB P-I点ということがある。

【0125】

本明細書の実施例において、物性値等の測定・算出は特に断らない限り、日本電子機械工業規格（Standard of Electronic Industries Association of Japan）、EIAJ・ED-2521Aに記載された方法に従った。

具体的な測定方法、算出方法等は以下のとおりである。40

【0126】**I-N相転移点（T_{N-I}）**

偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレートに試料を置き、クロスニコルの状態で、まず試料が非液晶等方相になる温度まで昇温した後、1/分の速度で降温し、完全にキラルネマチック相または光学的異方性の相が出現させた。その過程での相転移温度を測定し、次いで1/分の速度で加熱し、その過程における相転移温度を測定した。光学的に等方性の液晶相においてクロスニコル下では暗視野で相転移点の判別が困難な場合は、偏光板をクロスニコルの状態から1～10°ずらして相転移温度を測定した。

【0127】**ピッチ（P；25で測定；nm）**

10

20

30

40

50

ピッチ長は選択反射を用いて測定した（液晶便覧196頁（2000年発行、丸善）。選択反射波長には、関係式 $n_p / n = 1$ が成立する。ここで n は平均屈折率を表し、次式で与えられる。 $n = \{(n^2 + n^2)/2\}^{1/2}$ 。選択反射波長は顕微分光光度計（大塚電子株式会社、商品名F E - 3 0 0 0）で測定した。得られた反射波長を平均屈折率で除すことにより、ピッチを求めた。

可視光の長波長領域あるいは短波長領域に反射波長を有するコレステリック液晶、および、測定が困難であったコレステリック液晶のピッチは、可視光領域に選択反射波長を有するような濃度でキラル剤を添加（濃度C'）して、選択反射波長（'）を測定し、本来の選択反射波長（）を本来のキラル濃度（濃度C）から、直線外挿法（= ' × C' / C）で算出することにより求めた。

【0128】

弾性定数および誘電率異方性（）

静電容量の電圧依存性を用いて弾性定数を求める。擬似平衡状態となるように十分ゆっくりと掃引を行う。特にFreedericksz転移付近は、精度のよい値を得るために、印加電圧の分解能を出来る限り小さくする（数十mV刻み程度）。得られた低電圧領域における静電容量（C₀）より を、また印加電圧を無限大に外挿した場合の静電容量より を算出し、それらの値から を求める。この を用いてFreedericksz転移点よりK₁₁を求める。さらに、測定されたK₁₁と、容量変化に対するカーブフィッティングによりK₃₃を求める（装置：E C - 1 弾性定数測定装置、株式会社東陽テクニカ社製）。

【0129】

なお、弾性定数、誘電率異方性の測定条件は、サイン波を重畠した矩形波：V_{A-C}を0Vから15Vまで、昇圧レートは0.1Vでサンプルに印加した。矩形波の周波数は100Hz、サイン波はV_{A-C}=100mV、周波数2kHz。矩形波の測定は各液晶成分のT_{N-I}より20低い温度で行った。使用したセルは配向膜が塗布されたセルギャップ10μmのアンチパラレルセル（E.H.C社製）。

【0130】

屈折率異方性（n）

波長589nmの光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッベ屈折計により測定した。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率n₁は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率n₂は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。n = n₁ - n₂、の式から計算した。測定温度は、液晶成分のT_{N-I}から-20において測定した。

【0131】

ここで、透明点は、化合物または組成物が昇温過程で、等方相を発現する点をいう。本明細書では、ネマチック相から等方相への相転移点であるN-I点をT_{N-I}と示した。

【0132】

[実施例1～7] 液晶組成物LC1～LC7の調製

(1) 液晶成分(LC1～LC7)の調製

下記式(1a)～(1c), (2a), (2b), (5a), (5b), (6)で表される化合物、および、下記に示す3つの化合物の混合物である液晶組成物Jを下記、表1に示す重量比で混合してネマチック液晶組成物である液晶成分LC1～LC7を調製した。

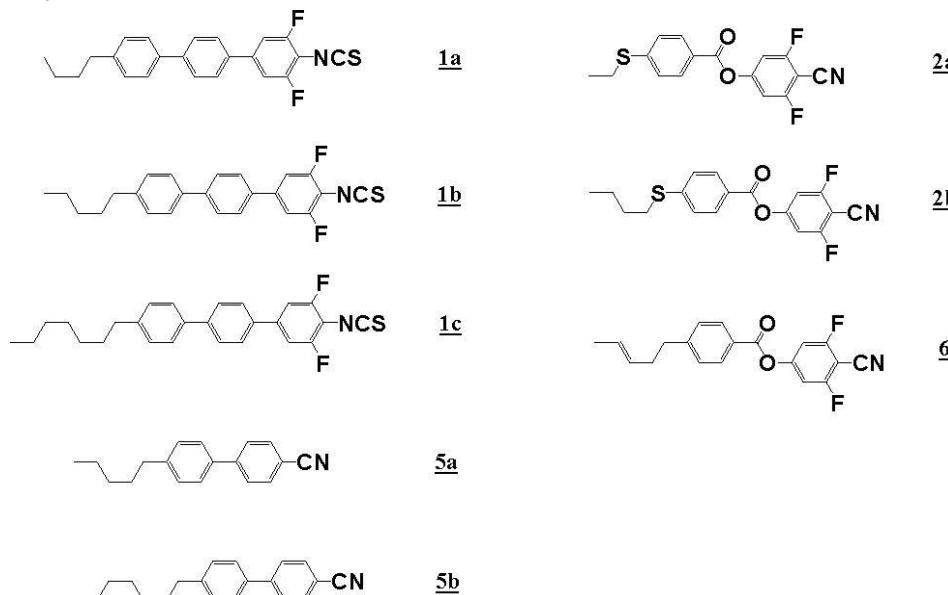
10

20

30

40

【化 5 1】

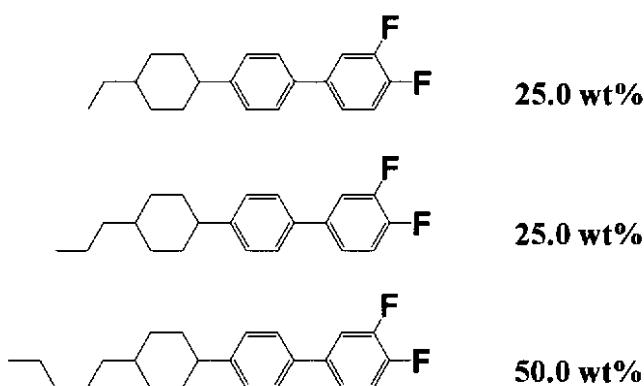


10

20

【化 5 2】

液晶組成物 I



30

【表1】

表 1

| | 1a | 1b | 1c | 2a | 2b | 6 | 5a | 5b | 液晶組成物J |
|-----|------|------|----|------|------|------|----|----|--------|
| LC1 | | | 35 | | | 35 | 12 | 18 | |
| LC2 | | | 25 | | | 25 | 20 | 30 | |
| LC3 | | | 15 | | | 15 | 28 | 42 | |
| LC4 | 15 | 15 | | 10 | 10 | 20 | | | 30 |
| LC5 | 12.5 | 12.5 | | 11.3 | 11.2 | 22.5 | | | 30 |
| LC6 | 10 | 10 | | 12.5 | 12.5 | 25 | | | 30 |
| LC7 | 7.5 | 7.5 | | 13.8 | 13.7 | 27.5 | | | 30 |

(重量%)

【 0 1 3 3 】

液晶成分 L C 1 ~ L C 7 に対して T_{NI} 、 n 、 n_x および弾性定数 K_{11} 、 弹性定数 K_{33} 、 弹性定数比 K_{33}/K_{11} の諸物性値を測定・算出した。結果は表 2 のとおりであった。

50

【表2】

表2

| 液晶成分 | T _{Nf} (°C) | Δn | Δε | Δn × Δε | K ₁₁ | K ₃₃ | 弾数定数比 K ₃₃ /K ₁₁ | Δn × Δε × K ₃₃ /K ₁₁ |
|------|-------------------------|-------|------|---------|-----------------|-----------------|---|--|
| LC1 | 62.5 | 0.199 | 27.6 | 5.49 | 4.06 | 8.74 | 2.15 | 11.82 |
| LC2 | 59.0 | 0.198 | 21.6 | 4.28 | 4.34 | 7.44 | 1.71 | 7.33 |
| LC3 | 50.0 | 0.196 | 17.3 | 3.39 | 5.20 | 8.34 | 1.60 | 5.44 |
| LC4 | 76.0 | 0.192 | 23.8 | 4.57 | 3.23 | 6.62 | 2.05 | 9.37 |
| LC5 | 67.5 | 0.167 | 26.8 | 4.48 | 2.94 | 5.71 | 1.94 | 8.69 |
| LC6 | 56.0 | 0.167 | 34.8 | 5.81 | 3.30 | 4.69 | 1.42 | 8.26 |
| LC7 | 48.7 | 0.165 | 33.8 | 5.58 | 2.71 | 3.40 | 1.25 | 7.00 |

【0134】

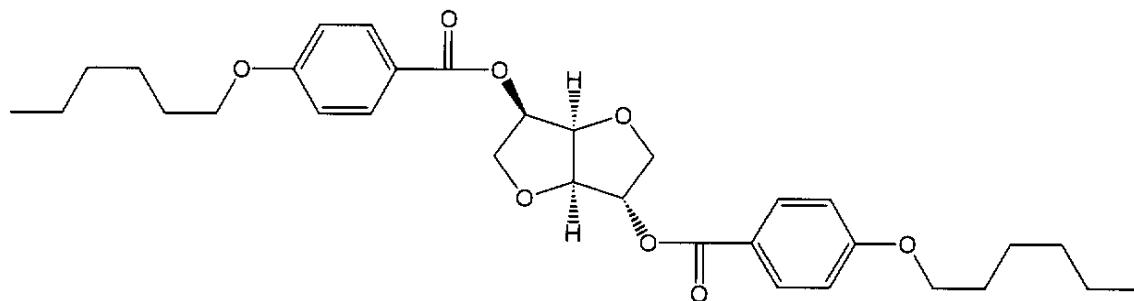
(2) 液晶組成物 LC1 - 2 ~ LC7 - 2 の調製

液晶成分 LC1 に、以下に示すキラル剤 ISO-6OBA2 を添加して液晶組成物 LC1 - 2 を調製した。添加されるキラル剤は、得られる液晶組成物の選択反射波長が 290 nm ~ 390 nm となるような割合で添加した。液晶組成物 LC1 - 2 (実施例 1) におけるキラル剤の含有率 (重量 %) は 6.5 重量 % であった。

また、液晶組成物 LC1 - 2 の調製と同様に、液晶成分 LC2 ~ LC7 を用いて液晶組成物 LC2 - 2 ~ LC7 - 2 を調製した。液晶組成物 LC2 - 2 ~ LC7 - 2 (実施例 2 ~ 7) におけるキラル剤の含有率 (重量 %) は表 3 に示すとおりであった。

【化53】

ISO-6OBA2



なお、ISO-6OBA2 は、イソソルバイトと 4 - ヘキシリオキシ安息香酸とをジシクロヘキシリカルボジイミド (DCC)、4 - ジメチルアミノピリジン存在下でエステル化することによって得た。

【0135】

得られた液晶組成物 LC1 - 2 ~ LC7 - 2 を配向処理の施されていない素ガラス 2 枚からなるセルに狭持し、偏光顕微鏡を用いて透明点を測定した。具体的には、選択反射波長を前述のピッチ測定法の項で示した方法により測定した (表 3)。なお、実施例 4 ~ 7 の選択反射波長の値は直線外挿法を用いて算出した。

【0136】

10

20

30

40

【表3】

表3

| | | キラル剤の含有率 (重量%) | 選択反射波長 (nm) | 透明点 (°C) |
|------|-------|-------------------|----------------|-------------|
| 実施例1 | LC1-2 | 6.5 | 380.6 | 51.0 |
| 実施例2 | LC2-2 | 6.5 | 377.8 | 43.5 |
| 実施例3 | LC3-2 | 6.5 | 383.2 | 38.4 |
| 実施例4 | LC4-2 | 7.0 | 306.3 | 66.6 |
| 実施例5 | LC5-2 | 7.0 | 308.0 | 54.8 |
| 実施例6 | LC6-2 | 7.0 | 295.3 | 45.3 |
| 実施例7 | LC7-2 | 7.0 | 291.0 | 27.8 |

【0137】

[実施例8～14] 液晶組成物と重合性モノマーとを含む混合物(モノマー含有混合物(D1～D7))の調製

まず、RM257(メルク社製)およびTMP-TA(トリメチロールプロパンアクリレート、東京化成社製)を57:43の重量比で混合しモノマー組成物(C)を調製した。

次に、モノマー組成物(C)と重合開始剤と実施例1～7で調製した各液晶組成物LC1-2～LC7-2と混合して、モノマー含有混合物(D1～D7)(実施例8～14)を調製した。

【0138】

混合物(D1～D7)の調製の際、モノマー組成物(C)の含有率が、混合物全体の20重量%となるように混合した。

【0139】

また、重合開始剤として2,2-Dimethoxy-1,2-diphenylethan-1-one(アルドリッヂ社製)を用いた。重合開始剤は、重合開始剤とモノマー組成物(C)を合計した重量に対し0.4重量%となるように用いた。

【0140】

[実施例15～21] 高分子/液晶複合材料(E1～E7)の調製

モノマー含有混合物(D1)を配向処理の施されていない歯電極基板(図1参照)と対向ガラス基板(非電極付与)との間(セル厚12μm)に狭持し、液晶組成物の透明点T_cより3℃上(T_c+3℃)において、DEEP-UV(ウシオ電機社製)を10mW/cm²、3分間照射して重合反応を行い、高分子/液晶複合材料(E1)を調製した。このようにして、高分子/液晶複合材料(E1)を含む基板(歯電極セル)を得た。

各モノマー含有混合物(D2～D7)についても、モノマー含有混合物(D1)と同様に重合反応を行い、高分子/液晶複合材料(E2～E7)を調製し、高分子/液晶複合材料(E2～E7)を含む歯電極セルを得た。

【0141】

各高分子/液晶複合材料(E1～E7)を含む歯電極セルを、図2に示す光学系に設置し、電気光学特性(電場印加時と無印加時の透過光強度等)を測定した。サンプルセルは入射光に対して垂直に配置し、リンカム社製温度調節装置(ホットステージ)に固定し、任意の温度にセル温度を調節した。歯電極の電界印加方向を入射偏光方向に対して45度傾け、電気光学応答は、クロスニコル下、歯電極セルに0～155V、周波数100Hzの交流矩形波を印加し、電場印加・無印加時の透過光強度を測定した。

電場印加時の透過光強度をIとし、無印加時の透過光強度をI₀として、式(1)を

10

20

30

40

50

適用し、リタデーションを算出した。

【数1】

$$I = I_0 \sin^2 2\theta \sin^2 \frac{\pi R}{\lambda} \quad (1)$$

(式中、Rはリタデーション、λは入射光波長を表す。)

【0142】

得られたリタデーションを、セル厚(光路長；12 μm)で除して得た電気複屈折 n 10 (E)の値を、式(2)に適用した。

$$n(E) = K E^2 \quad (2)$$

(式中、n(E)は電気複屈折、λは入射光波長、Kはカ一係数、Eは電界強度を表す。)

【0143】

電界強度の二乗に対する電気複屈折 n(E)の測定結果において、電界強度の二乗の値が(0~2.05 × 10⁻³)付近の直線性のよい測定結果から最小自乗法により直線の傾きを算出し、この傾きを入射光波長(λ)で除した値を、本明細書ではカ一係数Kとした。算出したカ一係数は表4のとおりであった。

20

【表4】

表4

| | 高分子／液晶複合材料(E) | カ一係数 |
|-------|---------------|------------------------|
| 実施例15 | E1 | 7.17×10^{-10} |
| 実施例16 | E2 | 3.03×10^{-10} |
| 実施例17 | E3 | 2.85×10^{-10} |
| 実施例18 | E4 | 4.52×10^{-10} |
| 実施例19 | E5 | 3.96×10^{-10} |
| 実施例20 | E6 | 3.59×10^{-10} |
| 実施例21 | E7 | 3.34×10^{-10} |

【0144】

上記結果に基づいて、高分子／液晶複合材料(E1~E3)において、そのカ一係数(縦軸)と各高分子／液晶複合材料(E1~E3)に用いられた液晶成分(LC1~LC3)との $n \times$ (横軸)の関係を示す図3A、および、高分子／液晶複合材料(E4~E7)において、同様の関係を示す図3B、高分子／液晶複合材料(E1~E3)において、そのカ一係数(縦軸)と液晶成分(LC1~LC3)の $n \times$ $\times K_{33} / K_{11}$ (横軸)との関係を示す図4A、高分子／液晶複合材料(E4~E7)において、同様の関係を示す図4Bを作成した。

これらの図3A~図4Bから、弾性定数比 K_{33} / K_{11} とカ一係数とは正の相関があることがわかった。

【0145】

また、高分子／液晶複合材料E2、E4およびE5のカ一係数(縦軸)と、各高分子／液晶複合材料に用いた液晶成分LC2、LC4およびLC5の弾性定数比 K_{33} / K_{11} (横軸)との関係を示す図5から、 K_{33} / K_{11} が大きな液晶成分を用いて得られた高分子／複合材料のカ一係数が大きくなることが明らかになった。

30

40

50

【0146】

これらの結果から、本発明の光学的等方性液晶組成物は、その成分である液晶成分の $n \times \times K_{33} / K_{11}$ の値を大きくすることが出来ることから、大きなカーラー係数を有することが判った。

【産業上の利用可能性】

【0147】

本発明の活用法として、たとえば、液晶材料、および、液晶材料を用いる液晶素子が挙げられる。

【図面の簡単な説明】

【0148】

10

【図1】櫛歯電極基板を示す。

【図2】櫛歯電極セルを含む光学系を示す。

【図3A】カーラー係数と、液晶成分(LC1～LC3)の $n \times$ との関係を示す。

【図3B】カーラー係数と、液晶成分(LC4～LC7)の $n \times$ との関係を示す。

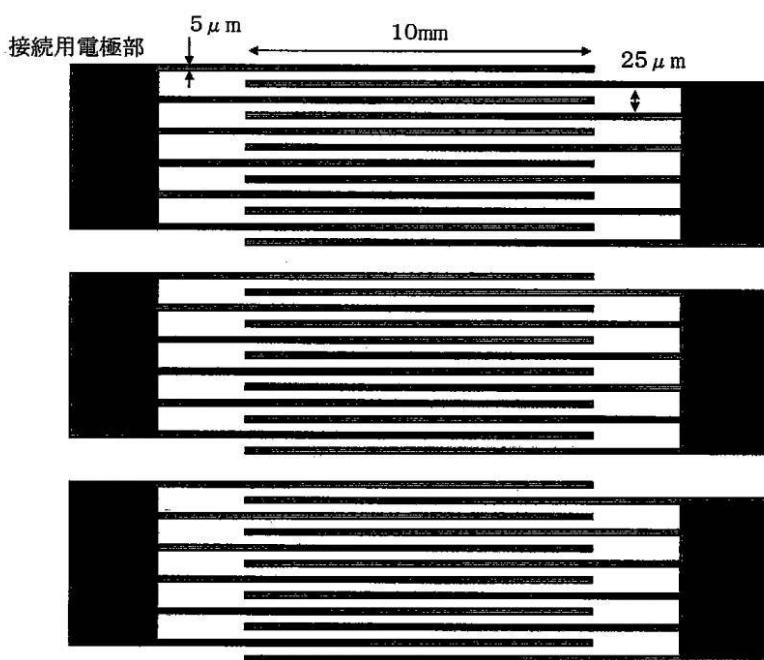
【図4A】カーラー係数と、液晶成分(LC1～LC3)の $n \times \times K_{33} / K_{11}$ との関係を示す。

【図4B】カーラー係数と、液晶成分(LC4～LC7)の $n \times \times K_{33} / K_{11}$ との関係を示す。

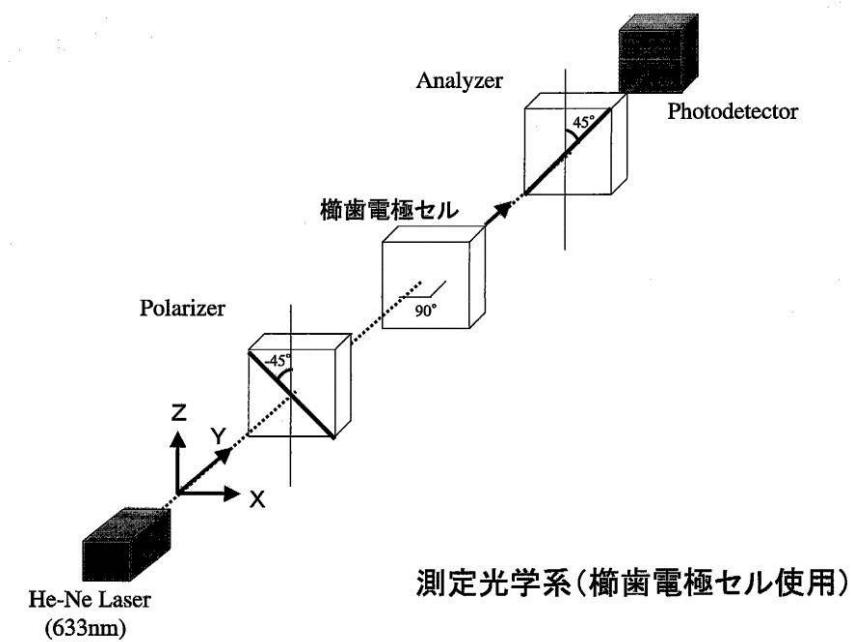
【図5】高分子／液晶複合材料E2、E4およびE5のカーラー係数と、各高分子／液晶複合材料に用いた液晶成分LC2、LC4およびLC5の弾性定数比 K_{33} / K_{11} との関係を示す。

20

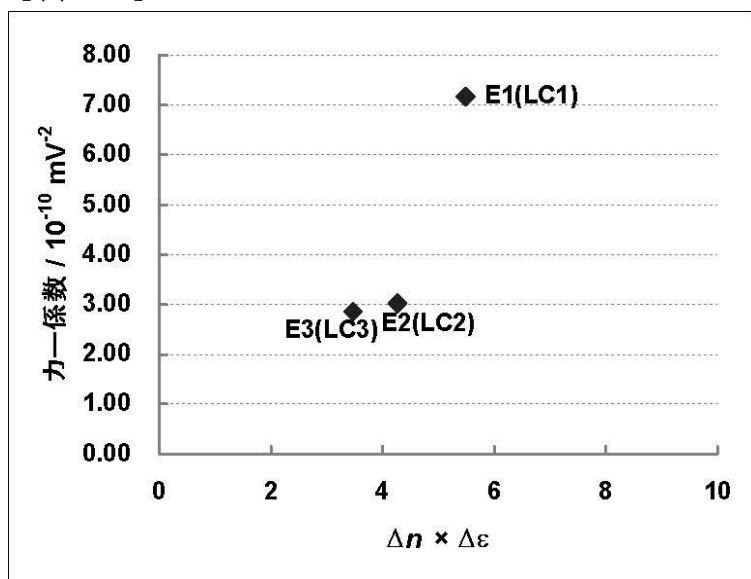
【図1】



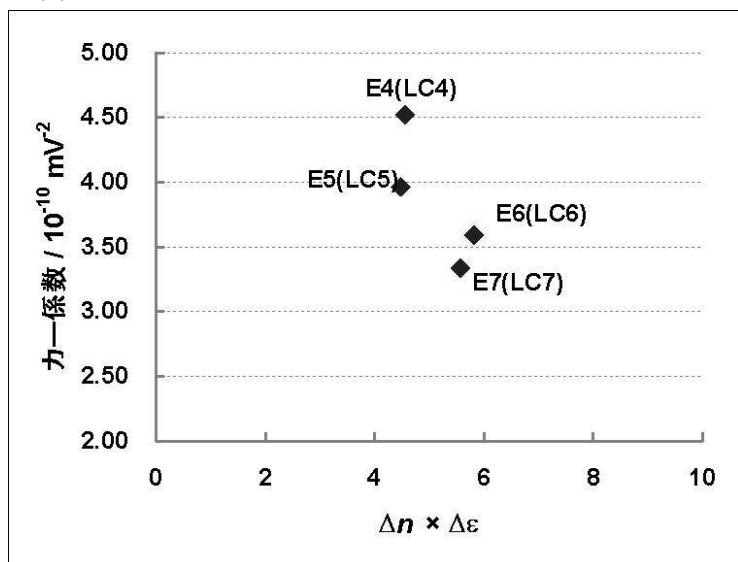
【図2】



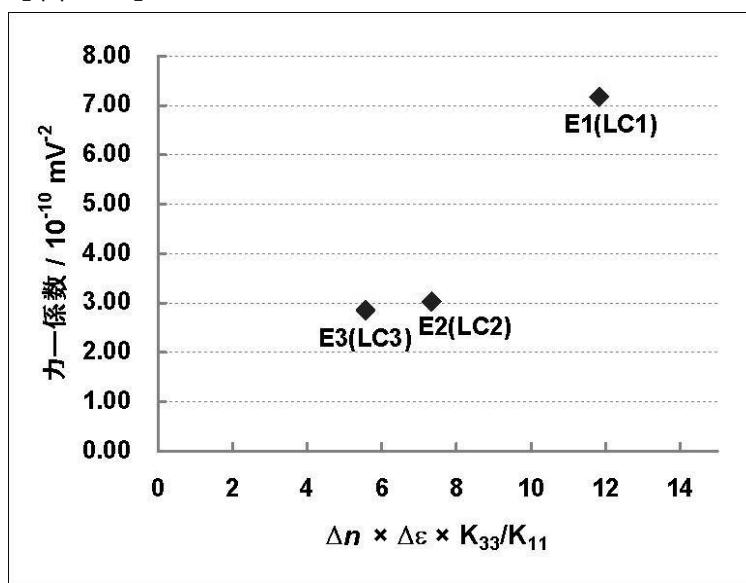
【図3A】



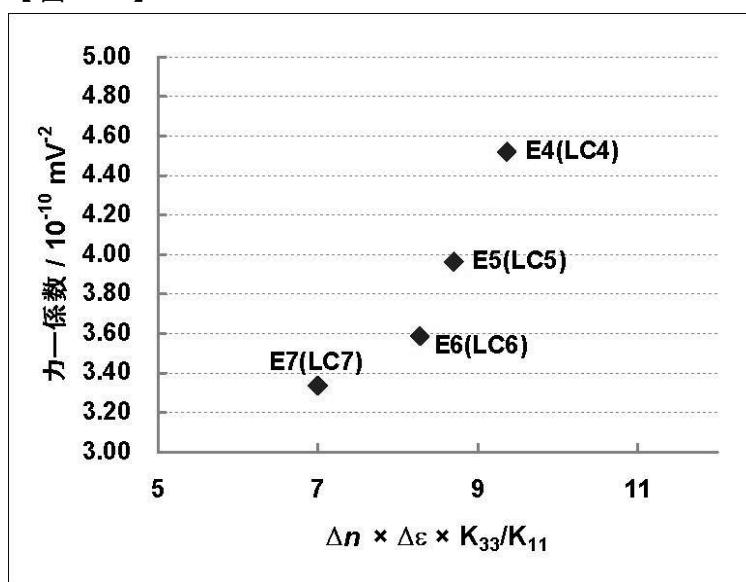
【図 3 B】

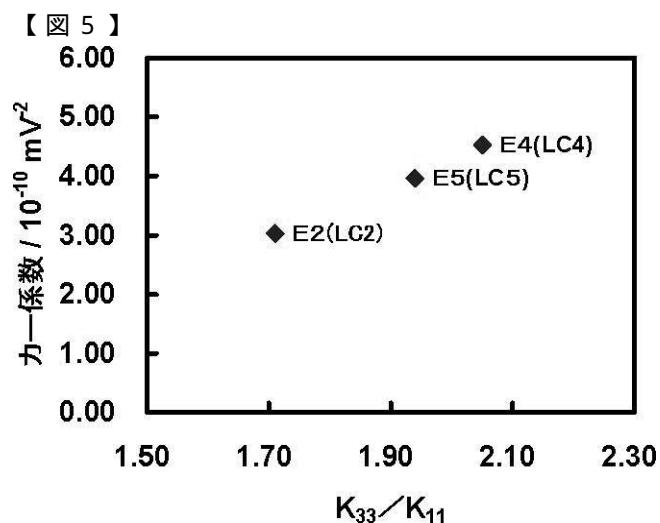


【図 4 A】



【図 4 B】





フロントページの続き

(72)発明者 山本 真一

千葉県市原市五井海岸5番地の1 チッソ石油化学株式会社 五井研究所内

(72)発明者 長谷場 康宏

千葉県市原市五井海岸5番地の1 チッソ石油化学株式会社 五井研究所内

審査官 松元 麻紀子

(56)参考文献 特開2002-069452(JP,A)

特開2001-003050(JP,A)

特開2008-303381(JP,A)

特開2007-277531(JP,A)

特開2006-089622(JP,A)

特開2006-348226(JP,A)

国際公開第2005/080529(WO,A1)

獨国特許出願公開第102006054361(DE,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C09K 19/42

C09K 19/12

C09K 19/20

C09K 19/54

G02F 1/13

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