

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2014-19646
(P2014-19646A)

(43) 公開日 平成26年2月3日(2014.2.3)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C07C 25/24 (2006.01)	C O 7 C 25/24 C S P	4 H O O 6
C07C 43/176 (2006.01)	C O 7 C 43/176	4 H O 2 7
C07C 255/50 (2006.01)	C O 7 C 255/50	
C07C 381/00 (2006.01)	C O 7 C 381/00	
C07C 69/94 (2006.01)	C O 7 C 69/94	
審査請求 未請求 請求項の数 14 O L (全 95 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号 特願2012-156512 (P2012-156512)
(22) 出願日 平成24年7月12日 (2012.7.12)

(特許庁注：以下のものは登録商標)

1. PYREX

(71) 出願人 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
(71) 出願人 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 110001070
特許業務法人 S S I N P A T
(72) 発明者 後藤 泰行
東京都千代田区大手町二丁目2番1号 J
N C株式会社内
(72) 発明者 木村 敬二
千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C
石油化学株式会社市原研究所内

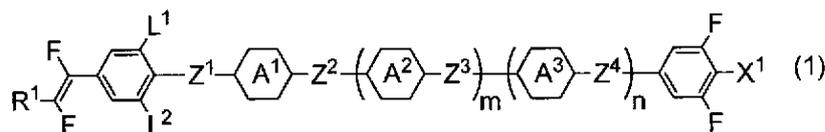
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 フルオロビニル基を有する液晶化合物、液晶組成物および液晶表示素子

(57) 【要約】

【課題】熱、光などに対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する液晶性化合物、この化合物を含有する液晶組成物、この組成物を含む液晶表示素子を提供する。

【解決手段】式(1)で表される化合物である。



例えば、R¹は、フッ素または炭素数1~10のアルキルであり；環A¹および環A²は、1,4-フェニレンまたは少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレンであり；Z¹、Z²、およびZ³は、単結合であり；L¹およびL²は、水素またはフッ素であり；X¹は、フッ素または-CF₃であり；mは、1であり、nは、0である。

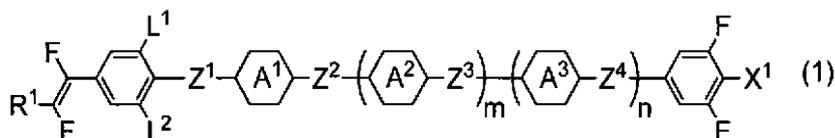
【選択図】なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式(1)で表される化合物。

【化 1】



式(1)において、

R¹は、ハロゲン、または炭素数1~20のアルキルであり、このアルキルにおいて、
 少なくとも1つの-CH₂-は-O-または-S-で置き換えられてもよく、少なくとも
 1つの-(CH₂)₂-は-CH=CH-で置き換えられてもよく、これらの基において、
 少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環A¹、環A²、および環A³は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニ
 レン、少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒ
 ドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,
 5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルであり；

Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴は独立して、単結合、-(CH₂)₂-、-CH=CH-、-
 CF=CF-、-COO-、-OCO-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH₂O-、-
 OCH₂-、-(CH₂)₄-、-(CH₂)₂CF₂O-、-(CH₂)₂OCF₂-、-CF₂
 O(CH₂)₂-、-OCF₂(CH₂)₂-、-CH=CH-(CH₂)₂-、または-(C
 H₂)₂-CH=CH-であり；

L¹およびL²は独立して、水素またはハロゲンであり；

X¹は、ハロゲン、-C≡N、-N=C=S、-SF₅、または炭素数1~10のアルキ
 ルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は-O-または-S-で
 置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は-CH=CH-で置き換えら
 れてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられても
 よく；

mおよびnは独立して、0または1である。

【請求項 2】

式(1)において、R¹が、ハロゲン、炭素数1~15のアルキル、炭素数2~15の
 アルケニル、炭素数1~14のアルコキシ、または炭素数2~14のアルケニルオキシで
 あり；Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴が独立して、単結合、-(CH₂)₂-、-CH=CH-
 、-CF=CF-、-COO-、-OCO-、-CF₂O-、または-OCF₂-であり；
 X¹が、ハロゲン、-C≡N、-N=C=S、-SF₅、または炭素数1~10のアルキル
 であり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は-O-または-S-で置
 き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は-CH=CH-で置き換えられ
 てもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよ
 い、請求項1に記載の化合物。

【請求項 3】

R¹が、フッ素、炭素数1~15のアルキル、炭素数2~15のアルケニル、炭素数1
 ~14のアルコキシ、または炭素数2~14のアルケニルオキシであり；Z¹、Z²、Z³
 、およびZ⁴が独立して、単結合、-(CH₂)₂-、-CH=CH-、-COO-、また
 は-CF₂O-であり；L¹およびL²が独立して、水素またはフッ素であり；X¹が、フッ
 素、-CF₃、-CHF₂、-CH₂F、-OCF₃、-OCHF₂、または-OCH₂Fであ
 る、請求項2に記載の化合物。

【請求項 4】

R¹が、フッ素、炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり
 ；環A¹、環A²、および環A³が独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニ
 レン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレン、1,3-ジ

10

20

30

40

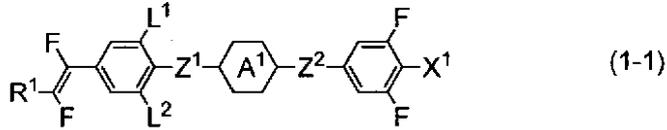
50

オキサン - 2, 5 - ジイル、またはテトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイルであり； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 が独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-COO-$ 、または $-CF_2O-$ であり； L^1 および L^2 が独立して、水素またはフッ素であり； X^1 が、フッ素、 $-CF_3$ 、または $-OCF_3$ である、請求項3に記載の化合物。

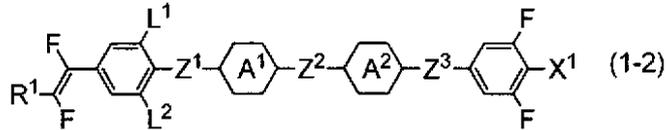
【請求項5】

式(1-1)および(1-2)のいずれか1つで表される、請求項4に記載の化合物。

【化2】



10



式(1-1)および(1-3)において、

R^1 は、フッ素、炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり

；

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

20

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

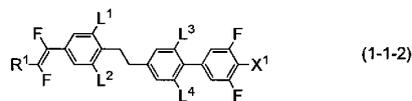
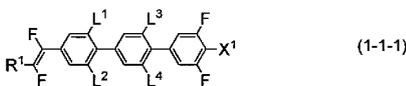
L^1 および L^2 は独立して、水素またはフッ素であり；

X^1 は、フッ素、 $-CF_3$ 、または $-OCF_3$ である。

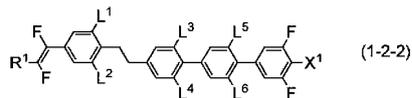
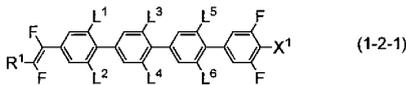
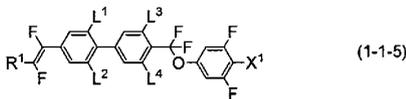
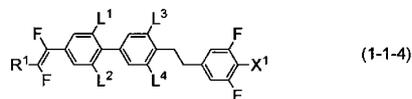
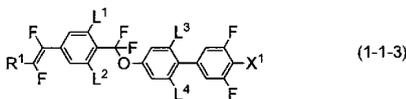
【請求項6】

式(1-1-1)~(1-1-5)および式(1-2-1)~(1-2-7)のいずれか1つで表される、請求項5に記載の化合物。

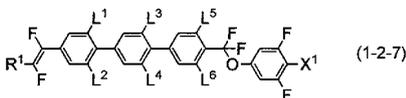
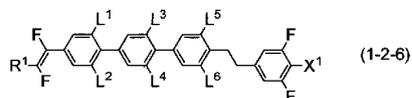
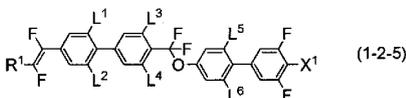
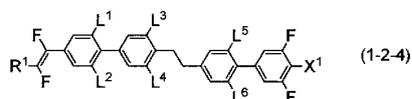
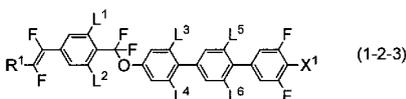
【化3】



30



40



式(1-1-1)~(1-1-5)および式(1-2-1)~(1-2-7)において、

50

R¹は、フッ素、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり

L¹、L²、L³、L⁴、L⁵、およびL⁶は独立して、水素またはフッ素であり；

X¹は、フッ素、-CF₃、または-OCF₃である。

【請求項7】

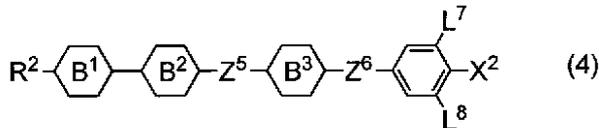
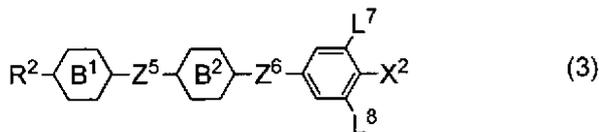
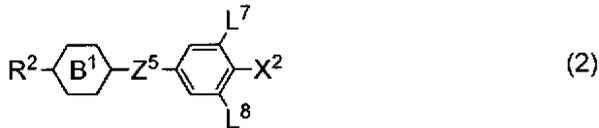
請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物を少なくとも1つ含有する液晶組成物。

【請求項8】

式(2)～(4)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項7に記載の液晶組成物。

【化4】

10



20

式(2)～(4)において、

R²は、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は-O-で置き換えられてもよく；

X²は、フッ素、塩素、-OCF₃、-OCHF₂、-CF₃、-CHF₂、-CH₂F、-CF=F₂、-OCF₂CHF₂、または-OCF₂CHF₂CF₃であり；

環B¹、環B²、および環B³は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,6-ジフルオロ-1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

30

Z⁵およびZ⁶は独立して、単結合、-(CH₂)₂-、-CH=CH-、-C=C-、-COO-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH₂O-、または-(CH₂)₄-であり；

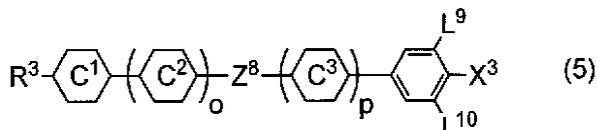
L⁷およびL⁸は独立して、水素またはフッ素である。

【請求項9】

式(5)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項7に記載の液晶組成物。

【化5】

40



式(5)において、

R³は、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は-O-で置き換えられてもよく；

X³は、-CNまたは-CCNであり；

環C¹、環C²、および環C³は独立して、1,4-シクロヘキシレン、少なくとも1つ

50

の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4 - フェニレン、テトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイル、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル、またはピリミジン - 2, 5 - ジイルであり；

Z^8 は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

L^9 および L^{10} は独立して、水素またはフッ素であり；

o は、0、1 または 2 であり、 p は、0 または 1 であり、 o と p の和は、0、1、2 または 3 である。

【請求項 10】

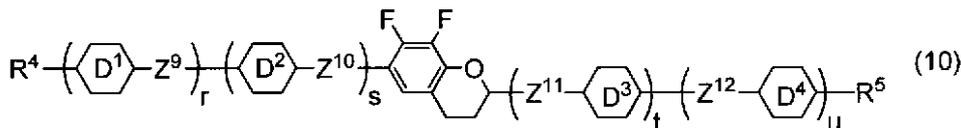
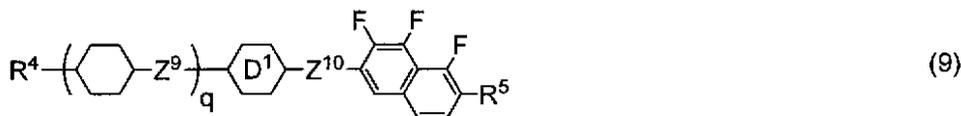
式 (6) ~ (11) で表される化合物の群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有する、請求項 7 に記載の液晶組成物。

10

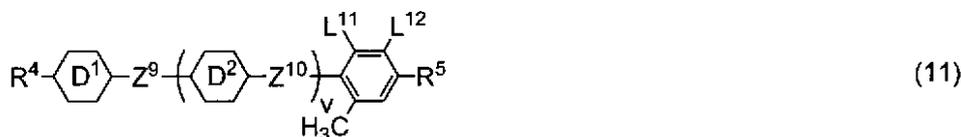
【化 6】



20



30



式 (6) ~ (11) において、

R^4 および R^5 は独立して、炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく；

40

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

Z^9 、 Z^{10} 、 Z^{11} 、および Z^{12} は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-OCF_2(CH_2)_2-$ であり；

L^{11} および L^{12} は独立して、フッ素または塩素であり；

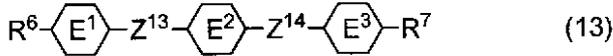
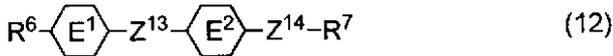
q 、 r 、 s 、 t 、 u 、および v は独立して、0 または 1 であり、 r 、 s 、 t 、および u の和は、1 または 2 である。

【請求項 11】

50

式(12)~(14)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項7、8および10のいずれか1項に記載の液晶組成物。

【化7】



10

式(12)~(14)において、

R^6 および R^7 は独立して、炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく；

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

20

Z^{13} および Z^{14} は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C=C-$ 、または $-COO-$ である。

【請求項12】

少なくとも1つの光学活性化合物および/または重合可能な化合物をさらに含有する、請求項7に記載の液晶組成物。

【請求項13】

少なくとも1つの酸化防止剤および/または紫外線吸収剤をさらに含有する、請求項7に記載の液晶組成物。

【請求項14】

30

請求項7~13のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子に関する。さらに詳しくは、フルオロビニル基を有する化合物、この化合物を含有し、ネマチック相を有する組成物、およびこの組成物を含む液晶表示素子に関する。

【背景技術】

【0002】

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

40

【0003】

このような液晶表示素子では、適切な物性を有する液晶組成物が使われている。液晶表示素子の特性をさらに向上させるには、この組成物に含まれる液晶性化合物が、下記の(

50

1) ~ (8) で示す物性を有するのが好ましい。

- (1) 熱、光などに対する高い安定性、
- (2) 高い透明点、
- (3) 液晶相の低い下限温度、
- (4) 小さな粘度 ()、
- (5) 適切な光学的異方性 (n)、
- (6) 大きな誘電率異方性 ()、
- (7) 適切な弾性定数 (K)、
- (8) 他の液晶性化合物との優れた相溶性。

【0004】

10

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

【0005】

20

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

【0006】

30

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

【0007】

これまでに、大きな誘電率異方性を有する液晶性化合物が種々合成されてきた。従来の化合物にはない優れた物性が期待されるからである。液晶組成物を調製する際に必要な2つの物性の間の適切なバランスが、新規な化合物には期待されるからである。特許文献1にはフッ素を四つ有する化合物、化合物(S-1)および化合物(S-2)が記載されている。しかし、この化合物は透明点が十分に高くない。

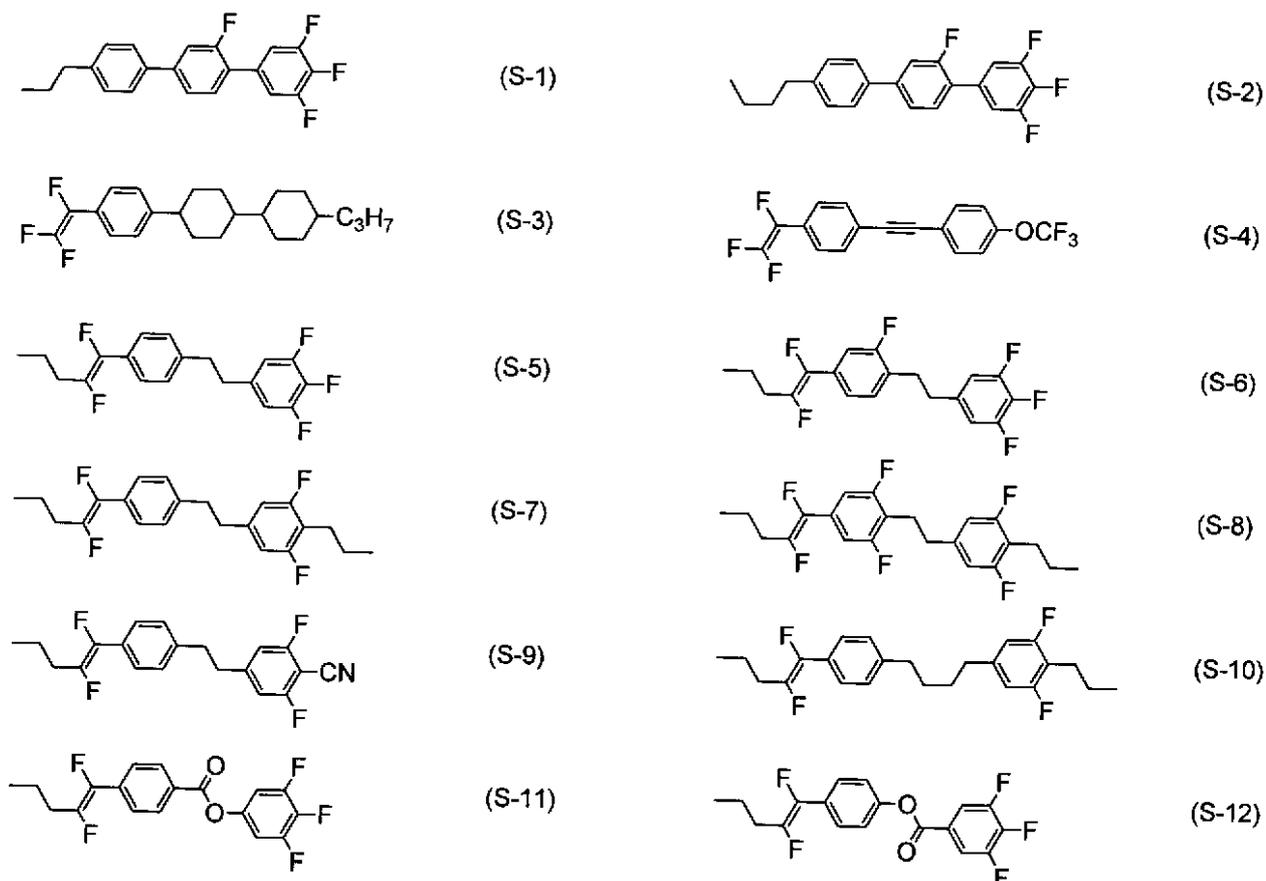
【0008】

40

特許文献2および3には、フルオロビニル基を有する化合物、化合物(S-3)および化合物(S-4)が示されている。しかし、この化合物は誘電率異方性が十分に大きくないので、この化合物を含有する液晶組成物は、市販の素子が必要とするしきい値電圧を満たすことができないようである。また、特許文献3には化合物(S-5)~化合物(S-12)も例示されている。しかしながら、この化合物は透明点が十分に高くない。

【0009】

【化 1】



10

20

このような状況から、上記の物性(1)~(8)に関して優れた物性と適切なバランスとを有する化合物の開発が望まれている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0010】

30

【特許文献1】独国特許出願公開第4107120号明細書

【特許文献2】国際公開第1992/021734パンフレット

【特許文献3】特開平9-291050号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0011】

本発明の第一の課題は、熱、光などに対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する液晶性化合物を提供することである。この課題は、特に大きな誘電率異方性を有する化合物を提供することである。この課題は、特に高い透明点を有する化合物を提供することである。第二の課題は、この化合物を含有し、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、および適切な弾性定数を有する液晶組成物を提供することである。この課題は、少なくとも2つの物性に関して適切なバランスを有する液晶組成物を提供することである。第三の課題は、この組成物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、および長い寿命を有する液晶表示素子を提供することである。

40

【課題を解決するための手段】

【0012】

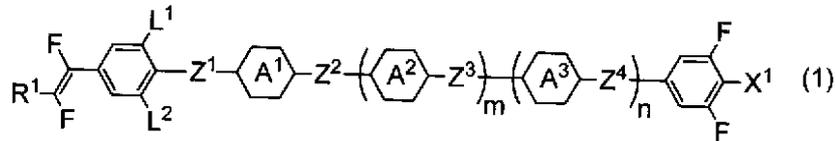
本発明は、式(1)で表される化合物、この化合物を含有する液晶組成物、およびこの

50

組成物を含む液晶表示素子に関する。

【0013】

【化2】



式(1)において、

R¹は、ハロゲン、または炭素数1~20のアルキルであり、このアルキルにおいて、
少なくとも1つの-CH₂-は-O-または-S-で置き換えられてもよく、少なくとも
1つの-(CH₂)₂-は-CH=CH-で置き換えられてもよく、これらの基において、
少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環A¹、環A²、および環A³は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニ
レン、少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒ
ドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,
5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルであり；

Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴は独立して、単結合、-(CH₂)₂-、-CH=CH-、
-CF=CF-、-COO-、-OCO-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH₂O-、
-OCH₂-、-(CH₂)₄-、-(CH₂)₂CF₂O-、-(CH₂)₂OCF₂-、-CF₂
O(CH₂)₂-、-OCF₂(CH₂)₂-、-CH=CH-(CH₂)₂-、または-(C
H₂)₂-CH=CH-であり；

L¹およびL²は独立して、水素またはハロゲンであり；

X¹は、ハロゲン、-CN、-N=C=S、-SF₅、または炭素数1~10のアルキ
ルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は-O-または-S-で
置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は-CH=CH-で置き換えら
れてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられても
よく；

mおよびnは独立して、0または1である。

【発明の効果】

【0014】

本発明の第一の長所は、熱、光などに対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下
限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、適切な弾性定数、他の
液晶性化合物との優れた相溶性を有する液晶性化合物を提供することである。この長所は
、特に大きな誘電率異方性を有する化合物を提供することである。この長所は、特に高い
透明点を有する化合物を提供することである。左末端基をフルオロビニル基とすることによ
り、式(1)で表される化合物は高い透明点を有する。右末端のベンゼン環の3位と5
位をフッ素とすることにより、式(1)で表される化合物は大きな誘電率異方性を有する
。第二の長所は、この化合物を含有し、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低
い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、および適切な弾性
定数を有する液晶組成物を提供することである。この長所は、少なくとも2つの物性に関
して適切なバランスを有する液晶組成物を提供することである。第三の長所は、この組成
物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコ
ントラスト比、および長い寿命を有する液晶表示素子を提供することである。

【発明を実施するための形態】

【0015】

この明細書における用語の使い方は次のとおりである。液晶性化合物は、ネマチック相
、スメクチック相などの液晶相を有する化合物、および液晶相を有しないが液晶組成物の
成分として有用な化合物の総称である。液晶性化合物、液晶組成物、液晶表示素子をそれ
ぞれ化合物、組成物、素子と略すことがある。液晶表示素子は、液晶表示パネルおよび液

10

20

30

40

50

晶表示モジュールの総称である。透明点は、液晶性化合物における液晶相 - 等方相の転移温度である。液晶相の下限温度は、液晶性化合物における固体 - 液晶相（スメクチック相、ネマチック相など）の転移温度である。ネマチック相の上限温度は、液晶組成物におけるネマチック相 - 等方相の転移温度であり、上限温度と略すことがある。ネマチック相の下限温度を下限温度と略すことがある。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。式（１）から式（１４）において、六角形で囲んだ A^1 、 B^1 、 C^1 などの記号はそれぞれ環 A^1 、環 B^1 、環 C^1 などに対応する。複数の R^1 を同一の式または異なった式に記載した。これらの化合物において、任意の２つの R^1 が表わす２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。このルールは、環 A^1 、 Z^1 などの記号にも適用される。百分率で表した化合物の量は、組成物の全重量に基づいた重量百分率（重量％）である。

10

【 0 0 1 6 】

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

20

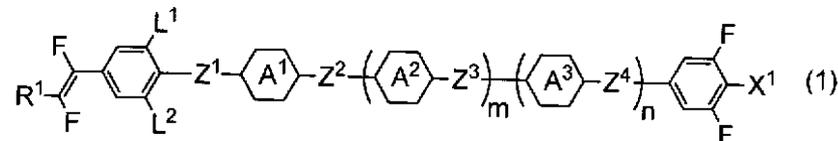
【 0 0 1 7 】

本発明は、下記の項 1 ~ 項 1 6 に記載された内容を包含する。

項 1 . 式（１）で表される化合物。

【 0 0 1 8 】

【 化 3 】



30

式（１）において、

R^1 は、ハロゲン、または炭素数 1 ~ 2 0 のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの $-CH_2-$ は $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも１つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

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

40

Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ 、 $-(CH_2)_2OCF_2-$ 、 $-CF_2O(CH_2)_2-$ 、 $-OCF_2(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、または $-(CH_2)_2-CH=CH-$ であり；

L^1 および L^2 は独立して、水素またはハロゲンであり；

X^1 は、ハロゲン、 $-C=N$ 、 $-N=C=S$ 、 $-SF_5$ 、または炭素数 1 ~ 1 0 のアルキ

50

ルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

m および n は独立して、0 または 1 である。

【0019】

項2. 式(1)において、 R^1 が、ハロゲン、炭素数1~15のアルキル、炭素数2~15のアルケニル、炭素数1~14のアルコキシ、または炭素数2~14のアルケニルオキシであり； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 が独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、または $-OCF_2-$ であり； X^1 が、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-N=C=S$ 、 $-SF_5$ 、または炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい、項1に記載の化合物。

10

【0020】

項3. R^1 が、フッ素、炭素数1~15のアルキル、炭素数2~15のアルケニル、炭素数1~14のアルコキシ、または炭素数2~14のアルケニルオキシであり； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 が独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-COO-$ 、または $-CF_2O-$ であり； L^1 および L^2 が独立して、水素またはフッ素であり； X^1 が、フッ素、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、または $-OCH_2F$ である、項2に記載の化合物。

20

【0021】

項4. R^1 が、フッ素、炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり；環 A^1 、環 A^2 、および環 A^3 が独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレン、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、またはテトラヒドロピラン-2,5-ジイルであり； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 が独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-COO-$ 、または $-CF_2O-$ であり； L^1 および L^2 が独立して、水素またはフッ素であり； X^1 が、フッ素、 $-CF_3$ 、または $-OCF_3$ である、項3に記載の化合物。

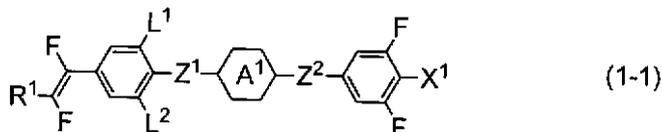
30

【0022】

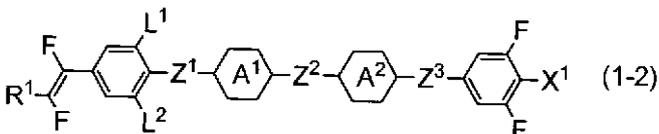
項5. 式(1-1)および(1-2)のいずれか1つで表される、項4に記載の化合物。

【0023】

【化4】



40



式(1-1)および(1-2)において、

R^1 は、フッ素、炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり

；

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

50

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CO$
 $O-$ 、または $-CF_2O-$ であり；

L^1 および L^2 は独立して、水素またはフッ素であり；

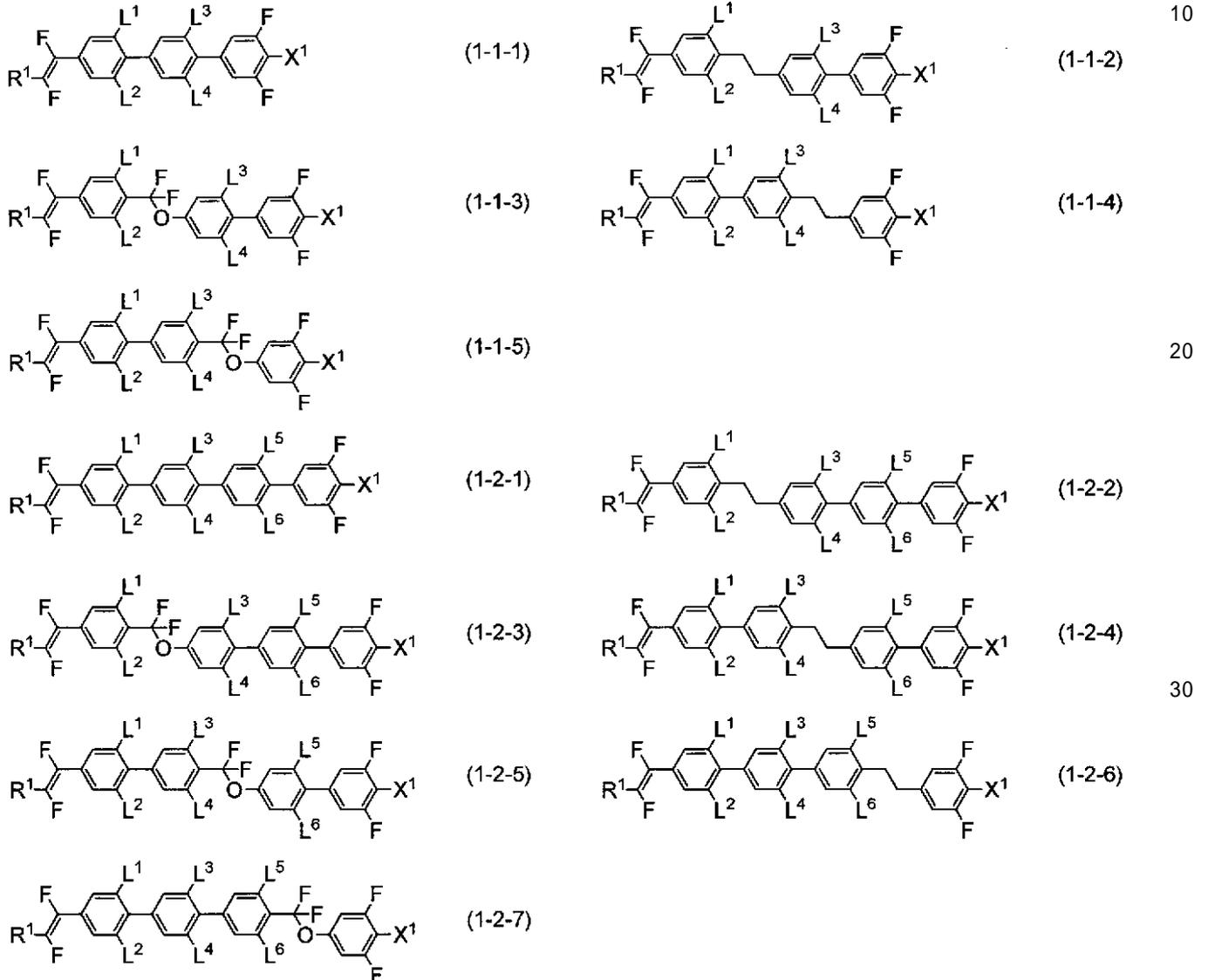
X^1 は、フッ素、 $-CF_3$ 、または $-OCF_3$ である。

【0024】

項6．式(1-1-1)～(1-1-5)および式(1-2-1)～(1-2-7)のいずれか1つで表される、項5に記載の化合物。

【0025】

【化5】



式(1-1-1)～(1-1-5)および式(1-2-1)～(1-2-7)において、
 R^1 は、フッ素、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり

；

L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、および L^6 は独立して、水素またはフッ素であり；

X^1 は、フッ素、 $-CF_3$ 、または $-OCF_3$ である。

【0026】

項7．項1～6のいずれか1項に記載の化合物を少なくとも1つ含有する液晶組成物

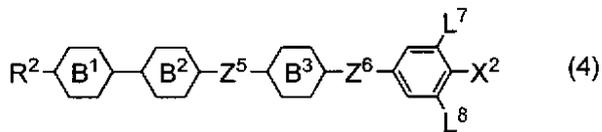
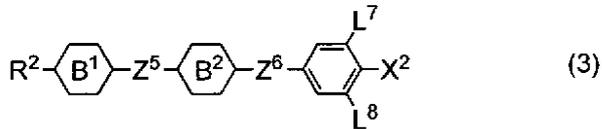
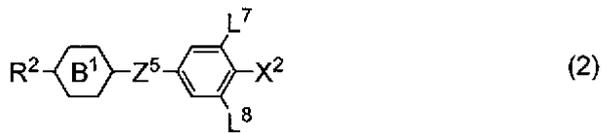
。

【0027】

項8．式(2)～(4)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、項7に記載の液晶組成物。

【 0 0 2 8 】

【 化 6 】



10

式(2)~(4)において、

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

X^2 は、フッ素、塩素、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{CF}=\text{F}_2$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、または $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2\text{CF}_3$ であり；

20

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

Z^5 および Z^6 は独立して、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、または $-(\text{CH}_2)_4-$ であり；

L^7 および L^8 は独立して、水素またはフッ素である。

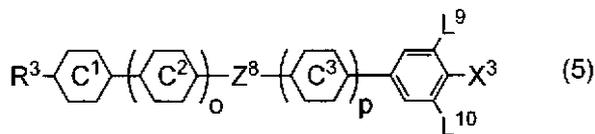
【 0 0 2 9 】

項9. 式(5)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、項7に記載の液晶組成物。

30

【 0 0 3 0 】

【 化 7 】



式(5)において、

R^3 は、炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

40

X^3 は、 $-\text{CN}$ または $-\text{C}(\text{C})-\text{CN}$ であり；

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

Z^8 は、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、または $-\text{CH}_2\text{O}-$ であり；

L^9 および L^{10} は独立して、水素またはフッ素であり；

o は、0、1または2であり、 p は、0または1であり、 o と p の和は、0、1、2または3である。

50

【 0 0 3 1 】

項 1 0 . 式 (6) ~ (1 1) で表される化合物の群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有する、項 7 に記載の液晶組成物。

【 0 0 3 2 】

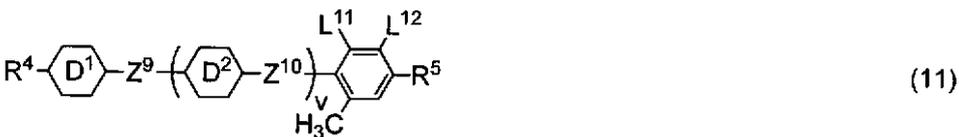
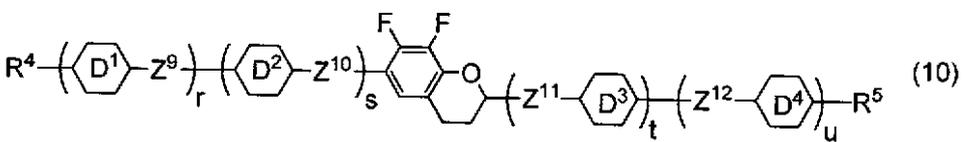
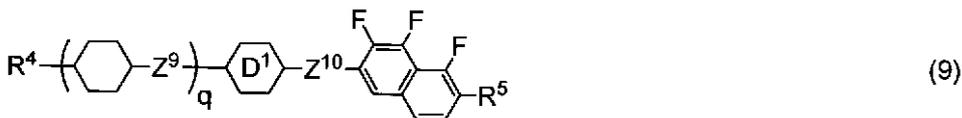
【化 8】



10



20



30

式 (6) ~ (1 1) において、

R^4 および R^5 は独立して、炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

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

Z^9 、 Z^{10} 、 Z^{11} 、および Z^{12} は独立して、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ であり；

L^{11} および L^{12} は独立して、フッ素または塩素であり；

40

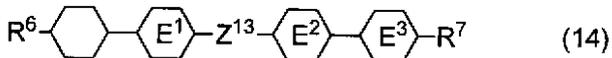
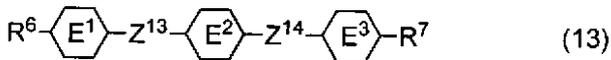
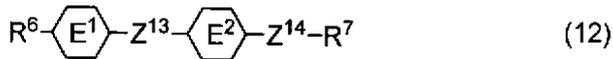
q 、 r 、 s 、 t 、 u 、および v は独立して、0 または 1 であり、 r 、 s 、 t 、および u の和は、1 または 2 である。

【 0 0 3 3 】

項 1 1 . 式 (1 2) ~ (1 4) で表される化合物の群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有する、項 7、8 または 1 0 に記載の液晶組成物。

【 0 0 3 4 】

【化 9】



10

式(12)～(14)において、

R^6 および R^7 は独立して、炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、

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

Z^{13} および Z^{14} は独立して、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、または $-\text{COO}-$ である。

20

【0035】

項12. 少なくとも1つの光学活性化合物および/または重合可能な化合物をさらに含有する、請求項7に記載の液晶組成物。

【0036】

項13. 少なくとも1つの酸化防止剤および/または紫外線吸収剤をさらに含有する、項7に記載の液晶組成物。

【0037】

項14. 前記項7～13のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【0038】

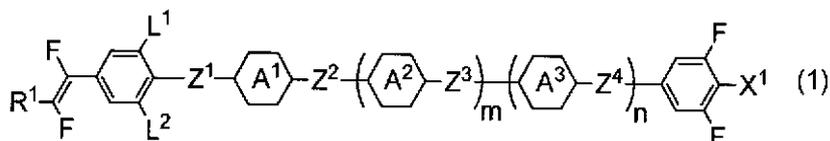
本発明の化合物、液晶組成物、液晶表示素子について、順に説明する。

1-1. 化合物(1)

本発明の化合物(1)、化合物(1)の好ましい例について説明をする。化合物(1)における末端基、環構造、結合基、および置換基の好ましい例は、化合物(1)の下位式にも適用される。

【0039】

【化10】



40

式(1)において、 R^1 は、ハロゲン、または炭素数1～20のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

【0040】

このような R^1 の例は、アルキル、アルコキシ、アルコシアルキル、アルコシアルコキシ、アルキルチオ、アルキルチオアルコキシ、アルケニル、アルケニルオキシ、アルケニルオシアルキル、アルコシアルケニル、およびアルケニルチオである。これらの

50

基は、直鎖または分岐鎖であり、シクロヘキシルのような環状基を含まない。これらの基において分岐鎖よりも直鎖の方が好ましい。R¹が分岐鎖であっても光学活性であるときは好ましい。

【0041】

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

10

【0042】

アルキルの例は、-CH₃、-C₂H₅、-C₃H₇、-C₄H₉、-C₅H₁₁、-C₆H₁₃、
 -C₇H₁₅、-C₈H₁₇、-C₉H₁₉、-C₁₀H₂₁、-C₁₁H₂₃、-C₁₂H₂₅、-C₁₃H₂₇、
 -C₁₄H₂₉、および -C₁₅H₃₁ である。

【0043】

アルコキシの例は、-OCH₃、-OC₂H₅、-OC₃H₇、-OC₄H₉、-OC₅H₁₁、
 -OC₆H₁₃、-OC₇H₁₅、-OC₈H₁₇、-OC₉H₁₉、-OC₁₀H₂₁、-OC₁₁H₂₃、
 -OC₁₂H₂₅、-OC₁₃H₂₇、および -OC₁₄H₂₉ である。

20

【0044】

アルコシアルキルの例は、-CH₂OCH₃、-CH₂OC₂H₅、-CH₂OC₃H₇、
 -(CH₂)₂-OCH₃、-(CH₂)₂-OC₂H₅、-(CH₂)₂-OC₃H₇、-(CH₂)₃-
 OCH₃、-(CH₂)₄-OCH₃、および -(CH₂)₅-OCH₃ である。

【0045】

アルケニルの例は、-CH=CH₂、-CH=CHCH₃、-CH₂CH=CH₂、-CH=CHC₂H₅、
 -CH₂CH=CHCH₃、-(CH₂)₂-CH=CH₂、-CH=CHC₃H₇、
 -CH₂CH=CHC₂H₅、-(CH₂)₂-CH=CHCH₃、および -(CH₂)₃-
 CH=CH₂ である。

【0046】

アルケニルオキシの例は、-OCH₂CH=CH₂、-OCH₂CH=CHCH₃、
 および -OCH₂CH=CHC₂H₅ である。

30

少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられたアルキルの例は、-CH₂F、-CHF₂、
 -CF₃、-(CH₂)₂-F、-CF₂CH₂F、-CF₂CHF₂、-CH₂CF₃、
 -CF₂CF₃、-(CH₂)₃-F、-(CF₂)₃-F、-CF₂CHF₂CF₃、-CHF₂CF₂CF₃、
 -(CH₂)₄-F、-(CF₂)₄-F、-(CH₂)₅-F、-(CF₂)₅-F、
 -CH₂Cl、-CHCl₂、-CCl₃、-(CH₂)₂-Cl、-CCl₂CH₂Cl、
 -CCl₂CHCl₂、-CH₂CCl₃、-CCl₂CCl₃、-(CH₂)₃-Cl、-(CCl₂)₃-Cl、
 -CCl₂CHCl₂CCl₃、-CHCl₂CCl₂CCl₃、-(CH₂)₄-Cl、
 -(CCl₂)₄-Cl、-(CH₂)₅-Cl、および -(CCl₂)₅-Cl である。

40

【0047】

少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられたアルコキシの例は、-OCH₂F、
 -OCHF₂、-OCF₃、-O-(CH₂)₂-F、-OCF₂CH₂F、-OCF₂CHF₂、
 -OCH₂CF₃、-O-(CH₂)₃-F、-O-(CF₂)₃-F、-OCF₂CHF₂CF₃、
 -OCHF₂CF₂CF₃、-O(CH₂)₄-F、-O-(CF₂)₄-F、-O-(CH₂)₅-F、
 -O-(CF₂)₅-F、-OCH₂Cl、-OCHCl₂、-OCCl₃、
 -O-(CH₂)₂-Cl、-OCCl₂CH₂Cl、-OCCl₂CHCl₂、-OCH₂CCl₃、
 -O-(CH₂)₃-Cl、-O-(CCl₂)₃-Cl、-OCCl₂CHCl₂CCl₃、
 -OCHCl₂CCl₂CCl₃、-O(CH₂)₄-Cl、-O-(CCl₂)₄-Cl、

50

- O - (CH₂)₅ - Cl、および - O - (CCl₂)₅ - Clである。

【0048】

少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられたアルケニルの例は、- CH = CHF、- CH = CF₂、- CF = CHF、- CH = CHCH₂F、- CH = CHCF₃、- (CH₂)₂ - CH = CF₂、- CH₂CH = CHCF₃、- CH = CHCF₂CF₃、- CH = CHCl、- CH = CCl₂、- CCl = CHCl、- CH = CHCH₂Cl、- CH = CHCCl₃、- (CH₂)₂ - CH = CCl₂、- CH₂CH = CHCCl₃、および - CH = CHCCl₂CCl₃である。

【0049】

R¹の好ましい例は、ハロゲン、炭素数1~15のアルキル、炭素数2~15のアルケニル、炭素数1~14のアルコキシ、または炭素数2~14のアルケニルオキシであり、よりR¹の好ましい例は、フッ素、炭素数1~15のアルキル、炭素数2~15のアルケニル、炭素数1~14のアルコキシ、または炭素数2~14のアルケニルオキシであり、さらに好ましい例は、フッ素、炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルである。R¹のさらにより好ましい例は、フッ素、- CH₃、- C₂H₅、- C₃H₇、- C₄H₉、- C₅H₁₁、- C₆H₁₃、- C₇H₁₅、- C₈H₁₇、- C₉H₁₉、- C₁₀H₂₁、- CH = CH₂、- CH = CHCH₃、- CH₂CH = CH₂、- CH = CHC₂H₅、- CH₂CH = CHCH₃、- (CH₂)₂ - CH = CH₂、- CH = CHC₃H₇、- CH₂CH = CHC₂H₅、- (CH₂)₂ - CH = CHCH₃、および - (CH₂)₃ - CH = CH₂である。

【0050】

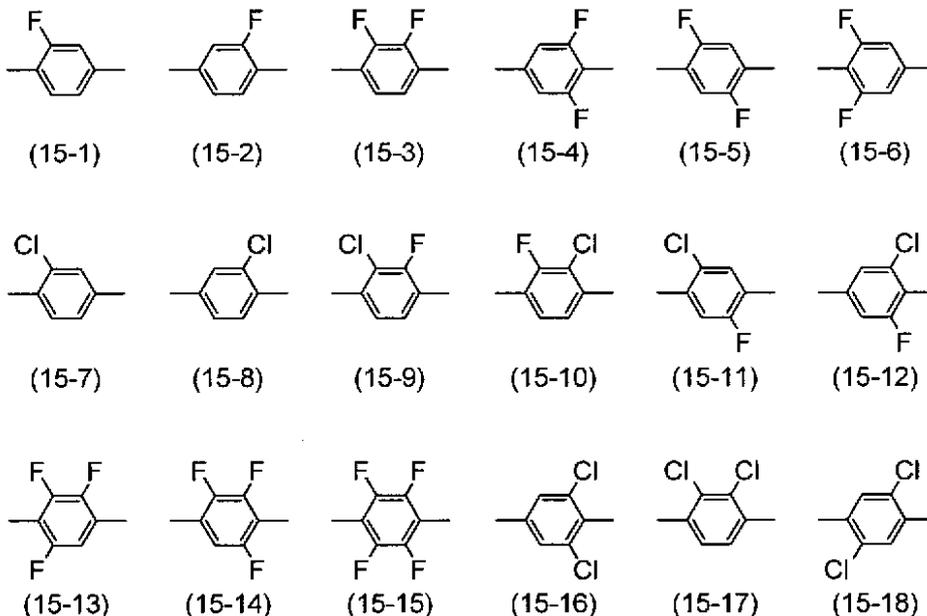
式(1)において、環A¹、環A²、および環A³は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルである。

【0051】

環A¹、環A²、および環A³の好ましい例は、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、および1,3-ジオキサソ-2,5-ジイルである。1,4-シクロヘキシレンには、シスおよびトランスの立体配置が存在する。高い上限程度の観点から、トランス配置が好ましい。少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1,4-フェニレンの好ましい例は、基(15-1)~(15-18)である。

【0052】

【化11】



10

20

30

40

50

2 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレンは、左右対称ではない。ラテラル位のフッ素が左末端基の側に位置する場合（左向き；15 - 1）と、右末端基の側に位置する場合（右向き；15 - 2）とがある。好ましい2 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレンは、右向きである。2 , 6 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレン（15 - 4および15 - 6）も左右対称ではない。好ましい2 , 6 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレンは、右向き（15 - 4）である。その他の基においても、左右対称ではない場合は、右向きが好ましい。

【0053】

少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1 , 4 - フェニレンのさらに好ましい例は、2 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレンおよび2 , 6 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレンである。

10

【0054】

1 , 3 - ジオキサン - 2 , 5 - ジイルは、左右対称ではない。- O - が左末端基の側に位置する場合（左向き；15 - 19）と、右末端基の側に位置する場合（右向き；15 - 20）とがある。好ましい1 , 3 - ジオキサン - 2 , 5 - ジイルは、右向き（15 - 20）である。テトラヒドロピラン - 2 , 5 - ジイル（15 - 21および15 - 22）も左右対称ではない。好ましいテトラヒドロピラン - 2 , 5 - ジイルは、右向き（15 - 22）である。ピリミジン - 2 , 5 - ジイルおよびピリジン - 2 , 5 - ジイルにおいても、右向き（15 - 24および15 - 26）が好ましい。

【0055】

【化12】

20

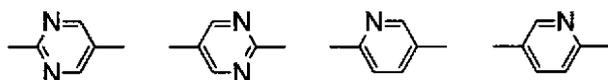


(15-19)

(15-20)

(15-21)

(15-22)



(15-23)

(15-24)

(15-25)

(15-26)

30

環 A¹、環 A²、および環 A³のさらに好ましい例は、1 , 4 - シクロヘキシレン、1 , 4 - フェニレン、2 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレン、2 , 6 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレン、テトラヒドロピラン - 2 , 5 - ジイル、および1 , 3 - ジオキサン - 2 , 5 - ジイルである。環 A¹、環 A²、および環 A³の最も好ましい例は、1 , 4 - シクロヘキシレン、1 , 4 - フェニレン、2 - フルオロ - 1 , 4 - フェニレン、および2 , 6 - ジフルオロ - 1 , 4 - フェニレンである。

【0056】

式(1)において、Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴は独立して、単結合、- (CH₂)₂-、- CH = CH -、- CF = CF -、- COO -、- OCO -、- CF₂O -、- OCF₂-、- CH₂O -、- OCH₂-、- (CH₂)₄-、- (CH₂)₂CF₂O -、- (CH₂)₂OCF₂-、- CF₂O(CH₂)₂-、- OCF₂(CH₂)₂-、- CH = CH - (CH₂)₂-、または- (CH₂)₂-CH = CH - である。

40

【0057】

Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴の好ましい例は、単結合、- (CH₂)₂-、- CH = CH -、- COO -、- OCO -、- CF₂O -、- OCF₂-、および- CF = CF - である。Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴のさらに好ましい例は、単結合、- (CH₂)₂-、- CH = CH -、- COO -、および- CF₂O - である。Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴の最も好ましい例は、単結合、- (CH₂)₂-、および- CF₂O - である。

【0058】

50

式(1)において、 L^1 および L^2 は独立して、水素またはハロゲンである。 L^1 および L^2 の好ましい例は、水素またはフッ素である。

式(1)において、 X^1 は、ハロゲン、 $-C-N$ 、 $-N=C=S$ 、 $-SF_5$ 、または炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。アルキルの少なくとも1つの $-CH_2-$ (または $-(CH_2)_2-$)が $-O-$ または $-S-$ (または $-CH=CH-$)で置き換えられた例は、アルコキシ、アルコシアルキル、アルコシアルコキシ、アルキルチオ、アルキルチオアルコキシ、アルケニル、アルケニルオキシ、アルケニルオキシアルキル、アルコシアルケニル、およびアルケニルチオである。アルキルおよびこれらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

10

【0059】

少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられたアルキルの例は、 $-CH_2F$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-(CH_2)_2-F$ 、 $-CF_2CH_2F$ 、 $-CF_2CHF_2$ 、 $-CH_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-(CH_2)_3-F$ 、 $-(CF_2)_3-F$ 、 $-CF_2CHF_2CF_3$ 、 $-CHF_2CF_2CF_3$ 、 $-(CH_2)_4-F$ 、 $-(CF_2)_4-F$ 、 $-(CH_2)_5-F$ 、 $-(CF_2)_5-F$ 、 $-CH_2Cl$ 、 $-CHCl_2$ 、 $-CCl_3$ 、 $-(CH_2)_2-Cl$ 、 $-CCl_2CH_2Cl$ 、 $-CCl_2CHCl_2$ 、 $-CH_2CCl_3$ 、 $-CCl_2CCl_3$ 、 $-(CH_2)_3-Cl$ 、 $-(CCl_2)_3-Cl$ 、 $-CCl_2CHCl_2CCl_3$ 、 $-CHCl_2CCl_2CCl_3$ 、 $-(CH_2)_4-Cl$ 、 $-(CCl_2)_4-Cl$ 、 $-(CH_2)_5-Cl$ 、および $-(CCl_2)_5-Cl$ である。

20

【0060】

少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられたアルコキシの例は、 $-OCH_2F$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-O-(CH_2)_2-F$ 、 $-OCF_2CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 $-OCH_2CF_3$ 、 $-O-(CH_2)_3-F$ 、 $-O-(CF_2)_3-F$ 、 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 、 $-OCHF_2CF_2CF_3$ 、 $-O(CH_2)_4-F$ 、 $-O-(CF_2)_4-F$ 、 $-O-(CH_2)_5-F$ 、 $-O-(CF_2)_5-F$ 、 $-OCH_2Cl$ 、 $-OCHCl_2$ 、 $-OCCl_3$ 、 $-O-(CH_2)_2-Cl$ 、 $-OCCl_2CH_2Cl$ 、 $-OCCl_2CHCl_2$ 、 $-OCH_2CCl_3$ 、 $-O-(CH_2)_3-Cl$ 、 $-O-(CCl_2)_3-Cl$ 、 $-OCCl_2CHCl_2CCl_3$ 、 $-OCHCl_2CCl_2CCl_3$ 、 $-O(CH_2)_4-Cl$ 、 $-O-(CCl_2)_4-Cl$ 、 $-O-(CH_2)_5-Cl$ 、および $-O-(CCl_2)_5-Cl$ である。

30

【0061】

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

40

【0062】

X^1 の好ましい例は、フッ素、塩素、 $-C-N$ 、 $-N=C=S$ 、 $-SF_5$ 、 $-CH_3$ 、 $-C_2H_5$ 、 $-C_3H_7$ 、 $-C_4H_9$ 、 $-C_5H_{11}$ 、 $-C_6H_{13}$ 、 $-C_7H_{15}$ 、 $-C_8H_{17}$ 、 $-C_9H_{19}$ 、 $-C_{10}H_{21}$ 、 $-CH_2F$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-(CH_2)_2-F$ 、 $-CF_2CH_2F$ 、 $-CF_2CHF_2$ 、 $-CH_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-(CH_2)_3-F$ 、 $-(CF_2)_3-F$ 、 $-CF_2CHF_2CF_3$ 、 $-CHF_2CF_2CF_3$ 、 $-(CH_2)_4-F$ 、 $-(CF_2)_4-F$ 、 $-(CH_2)_5-F$ 、 $-(CF_2)_5-F$ 、 $-OCH_3$ 、 $-OC_2H_5$ 、 $-OC_3H_7$ 、 $-OC_4H_9$ 、 $-OC_5H_{11}$ 、 $-OCH_2F$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-O-(CH_2)_2-F$ 、 $-OCF_2CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 $-OCH_2CF_3$ 、 $-O-(CH_2)_3-F$ 、 $-O-(CF_2)_3-F$ 、 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 、 $-OCHF_2CF_2CF_3$ 、 $-O(CH_2)_4-F$ 、 $-O-(CF_2)_4-F$ 、 $-O-(CH_2)_5-F$ 、 $-O-(CF_2)_5-F$ 、 $-CH=CH_2$ 、 $-C$

50

H = CHCH₃、 - CH₂CH = CH₂、 - CH = CHC₂H₅、 - CH₂CH = CHCH₃、
 - (CH₂)₂ - CH = CH₂、 - CH = CHC₃H₇、 - CH₂CH = CHC₂H₅、 - (CH₂)₂ - CH = CHCH₃、 - (CH₂)₃ - CH = CH₂、 - CH = CHF、 - CH = CF₂、
 - CF = CHF、 - CH = CHCH₂F、 - CH = CHCF₃、 - (CH₂)₂ - CH = CF₂、 - CH₂CH = CHCF₃、 および - CH = CHCF₂CF₃ である。

【0063】

X¹のさらに好ましい例は、フッ素、塩素、 - C N、 - CF₃、 - CHF₂、 - CH₂F、
 - OCF₃、 - OCHF₂、 および - OCH₂F である。X¹の最も好ましい例は、フッ素、
 - CF₃、 および - OCF₃ である。X¹がフッ素である化合物は、小さい粘度という観
 点から好ましい。X¹が - CF₃ である化合物は、大きな誘電率異方性という観点から好ま
 しい。X¹が - OCF₃ である化合物は、優れた相溶性という観点から好ましい。

10

式(1)において、mおよびnは独立して、0または1である。mおよびnの和の好ま
 しい例は、0、1、および2である。

【0064】

1-2. 化合物(1)の物性

化合物(1)において、R¹、環A¹、環A²、環A³、Z¹、Z²、Z³、Z⁴、X¹、L¹お
 よびL²の種類とmおよびnの和を適切に組み合わせることによって、透明点、光学的異
 方性、誘電率異方性などの物性を任意に調整することが可能である。化合物の物性に大き
 な差異がないので、化合物(1)は、²H(重水素)、¹³Cなどの同位体を天然存在比の
 量より多く含んでもよい。R¹などの種類が化合物(1)の物性に及ぼす主要な効果を以
 下に説明する。

20

【0065】

左末端基R¹が直鎖であるときは、液晶相の温度範囲が広く、そして粘度が小さい。R¹
 が分岐鎖であるときは、他の液晶性化合物との相溶性がよい。R¹が光学活性である化合
 物は、キラルドーパントとして有用である。この化合物を組成物に添加することによっ
 て、液晶表示素子に発生するリバース・ツイスト・ドメイン(reverse twisted domain)を
 防止することができる。R¹が光学活性でない化合物は、組成物の成分として有用である
 。R¹がアルケニルであるとき、好ましい立体配置は二重結合の位置に依存する。好まし
 い立体配置を有するアルケニル化合物は、高い上限温度または液晶相の広い温度範囲を有
 する。

30

【0066】

環A¹、環A²、および環A³の総てが1, 4-シクロヘキシレンであるときは、透明点
 が高く、粘度が小さい。環A¹、環A²、および環A³の少なくとも1つが1, 4-フェニ
 レンであるときは、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1, 4-フ
 エニレンであるときは、光学的異方性が比較的大きく、そして配向秩序パラメーター(or
 ientational order parameter)が比較的大きい。環A¹、環A²、および環A³の総てが、
 1, 4-フェニレン、少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた1, 4-フェニ
 レン、またはこれらの組み合わせであるときは、光学的異方性が特に大きい。環A¹、環
 A²、および環A³の少なくとも1つが1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイルであるときは
 、誘電率異方性が大きい。環A¹、環A²、および環A³の少なくとも1つがテトラヒドロ
 ピラン-2, 5-ジイルであるときは、他の液晶性化合物との相溶性が良好である。

40

【0067】

結合基Z¹、Z²、Z³、またはZ⁴が、単結合、- (CH₂)₂ -、- CH = CH -、- C
 F₂O -、- OCF₂ -、- CH₂O -、- OCH₂ -、- CF = CF -、- (CH₂)₃ - O
 -、- O - (CH₂)₃ -、- (CH₂)₂ - CF₂O -、- OCF₂ - (CH₂)₂ -、または
 - (CH₂)₄ - であるときは、粘度が小さい。結合基が、単結合、- (CH₂)₂ -、- C
 F₂O -、- OCF₂ -、または- CH = CH - であるときは、粘度がより小さい。結合基
 が- CH = CH - であるときは、液晶相の温度範囲が広く、そして弾性定数(K)が大き
 い。結合基が- CF₂O - または- COO - であるときは、誘電率異方性が大きい。Z¹、
 Z²、Z³、またはZ⁴が、単結合、- (CH₂)₂ - または- (CH₂)₄ - であるときは、

50

化学的安定性が高い。

【0068】

右末端基 X^1 が、フッ素、塩素、 $-C-N$ 、 $-N=C=S$ 、 $-SF_5$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、または $-OCH_2F$ であるときは、誘電率異方性が大きい。 X^1 が、 $-C-N$ 、 $-N=C=S$ 、またはアルケニルであるときは、光学的異方性が大きい。 X^1 が、フッ素、 $-CF_3$ 、またはアルキルであるときは、化学的安定性が高い。

【0069】

m および n の和が 0 であるときは、粘度が小さく、他の液晶性化合物との相溶性が良好である。 m および n の和が 1 であるときは、粘度が小さく、透明点が高い。 m および n の和が 2 であるときは、粘度が小さく、透明点が特に高い。本発明では、 m と n の和が 0 が 1 が好ましい。

10

【0070】

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

【0071】

1-3. 好ましい化合物

化合物(1)の好ましい例は、化合物(1-1)および(1-3)である。さらに好ましい例は、化合物(1-1-1)~(1-2-7)である。化合物(1-1-1)~(1-1-5)は、小さな粘度、大きな誘電率異方性、または優れた相溶性の観点から好ましい。化合物(1-2-1)~(1-2-7)は、高い透明点、大きな光学的異方性、またはより大きな誘電率異方性の観点から好ましい。

20

【0072】

1-4. 化合物(1)の合成

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

30

【0073】

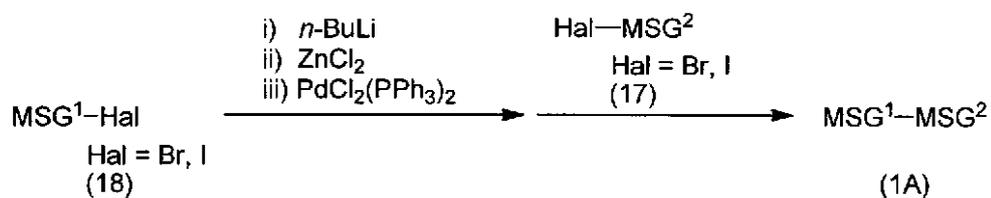
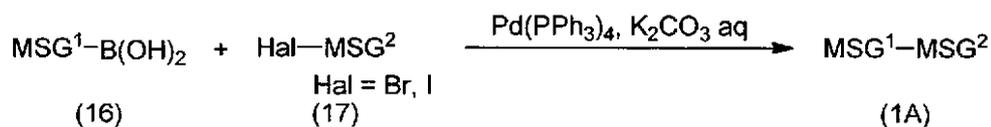
1-4-1. 結合基の生成

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

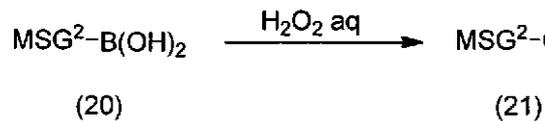
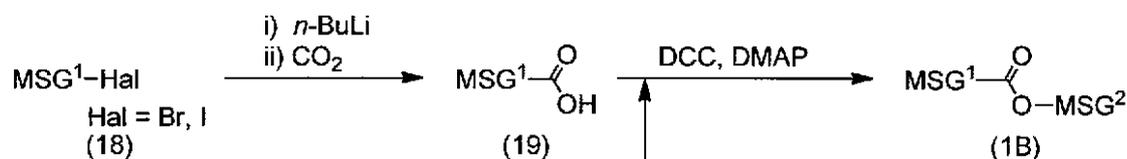
【0074】

40

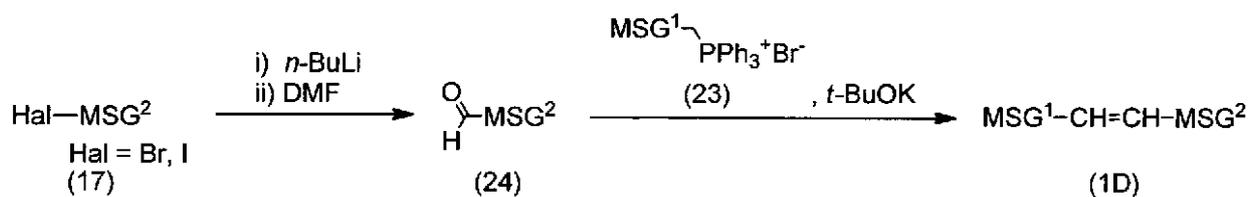
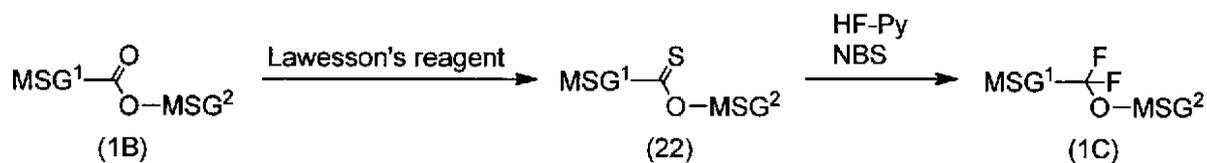
【化 1 3】



10



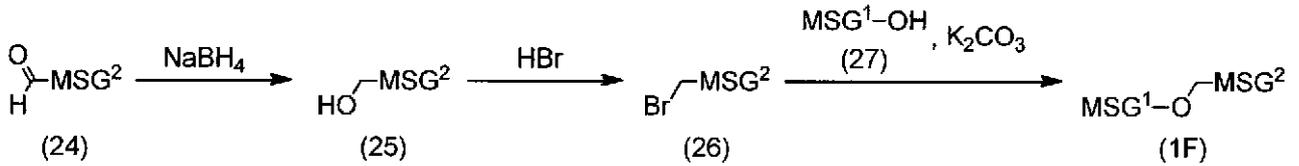
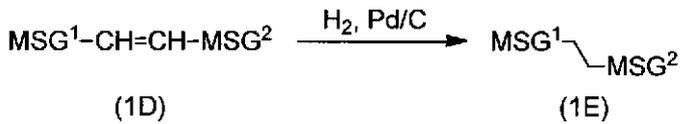
20



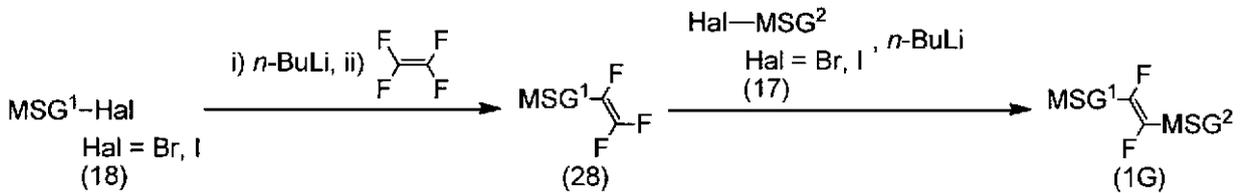
30

【 0 0 7 5 】

【化14】



10



【0076】

(I) 単結合の生成

アリールホウ酸(16)と公知の方法で合成される化合物(17)とを、炭酸塩水溶液中、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウムのような触媒の存在下で反応させて化合物(1A)を合成する。この化合物(1A)は、公知の方法で合成される化合物(18)に*n*-ブチルリチウムを、次いで塩化亜鉛を反応させ、ジクロロピス(トリフェニルホスフィン)パラジウムのような触媒の存在下で化合物(17)を反応させることによっても合成される。

20

【0077】

(II) -COO- と -OCO- の生成

化合物(18)に*n*-ブチルリチウムを、次いで二酸化炭素を反応させてカルボン酸(19)を得る。化合物(19)と、公知の方法で合成されるフェノール(21)とをDCC(*N,N'*-ジシクロヘキシルカルボジイミド)とDMAP(4-ジメチルアミノピリジン)の存在下で脱水させて-COO-を有する化合物(1B)を合成する。この方法によって-OCO-を有する化合物も合成する。

30

【0078】

(III) -CF₂O- と -OCF₂- の生成

化合物(1B)をローソン試薬のような硫黄化剤で処理して化合物(22)を得る。化合物(22)をフッ化水素ピリジン錯体とNBS(*N*-ブロモスクシンイミド)でフッ素化し、-CF₂O-を有する化合物(1C)を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827.を参照。化合物(1C)は化合物(22)を(ジエチルアミノ)サルファートリフルオリド(DAST)でフッ素化しても合成される。W. H. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768.を参照。この方法によって-OCF₂-を有する化合物も合成する。Peer. Kirsch et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 1480.に記載の方法によってこれらの結合基を生成させることも可能である。

40

【0079】

(IV) -CH=CH- の生成

化合物(17)を*n*-ブチルリチウムで処理した後、*N,N*-ジメチルホルムアミド(DMF)などのホルムアミドと反応させてアルデヒド(24)を得る。公知の方法で合成されるホスホニウム塩(23)をカリウム*tert*-ブトキシドのような塩基で処理して発生させたリンイリドを、アルデヒド(24)に反応させて化合物(1D)を合成する。反応条件によってはシス体が生成するので、必要に応じて公知の方法によりシス体をトランス体に異性化する。

50

【0080】

(V) - (CH₂)₂ - の生成

化合物(1D)をパラジウム炭素のような触媒の存在下で水素化することにより、化合物(1E)を合成する。

【0081】

(VI) - CH₂O - と - OCH₂ - の生成

化合物(24)を水素化ホウ素ナトリウムなどの還元剤で還元して化合物(25)を得る。これを臭化水素酸などでハロゲン化して化合物(26)を得る。炭酸カリウムなどの存在下で、化合物(26)を化合物(27)と反応させて化合物(1F)を合成する。

【0082】

(VII) - CF = CF - の生成

化合物(18)をn-ブチルリチウムで処理したあと、テトラフルオロエチレンを反応させて化合物(28)を得る。化合物(17)をn-ブチルリチウムで処理したあと化合物(28)と反応させて化合物(1G)を合成する。

【0083】

1-4-2. 環A¹、A²、およびA³の生成

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

【0084】

1-4-3. 合成例

化合物(1)を合成する方法の例は、次のとおりである。公知の方法により合成されるアリール臭化物(29)をn-ブチルリチウムで処理した後、ホウ酸トリイソプロピルなどのホウ酸エステルを反応させ、次いで塩酸で処理してアリールホウ酸(30)を得る。このアリールホウ酸(30)にジクロロ[1,4-ビス(ジフェニルホスフィノ)ブタン]パラジウム(II)、フッ化セシウムを作用させた後、1-クロロ-1,2,2-トリフルオロエチレンを反応させてトリフルオロスチレン(31)を得る。トリフルオロスチレン(31)にエチルリチウムなどのリチウム試薬(32)を反応させてシス体とトランス体の混合物(33)を得る。ジフェニルジスルフィドとAIBN(アゾビスイソプロピロニトリル)を用い、シス体とトランス体の混合物(33)を異性化することにより化合物(1)を合成する。

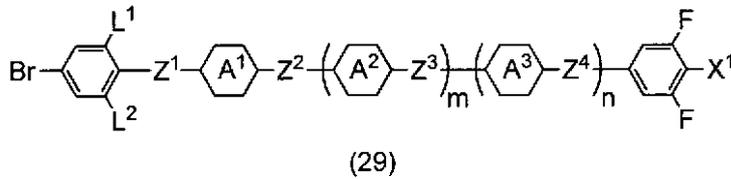
【0085】

10

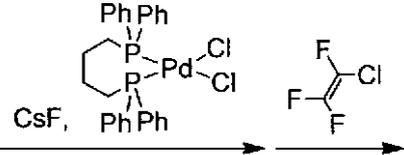
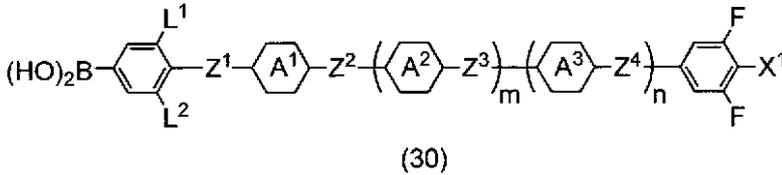
20

30

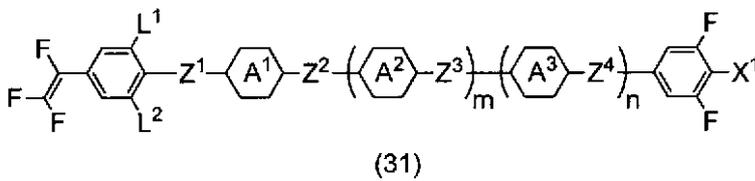
【化 1 5】



i) *n*-BuLi
 ii) B(OⁱPr)₃
 iii) HCl

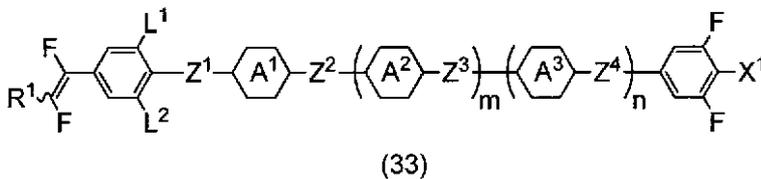


10

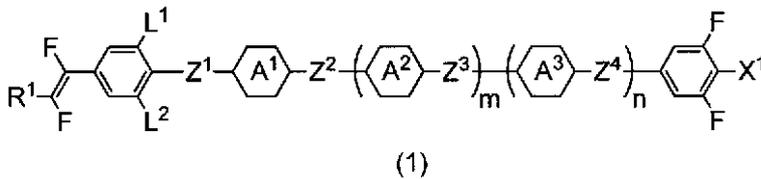


R¹-Li
 (32)

20



Ph₂S₂, AIBN



30

これらの化合物において、R¹、環 A¹、環 A²、環 A³、Z¹、Z²、Z³、Z⁴、L¹、L²、X¹、m、および n の定義は、前記と同じである。

【0086】

2. 組成物 (1)

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

40

【0087】

好ましい組成物は、以下に示す成分 B、C、D、および E から選択された化合物を含む。組成物 (1) を調製するときには、例えば、化合物 (1) の誘電率異方性を考慮して成分を選択することもできる。成分を適切に選択した組成物は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、および適切な弾性定数を有する。

【0088】

成分 B は、化合物 (2) ~ (4) である。成分 C は化合物 (5) である。成分 D は、化

50

化合物(6)~(11)である。成分Eは、化合物(12)~(14)である。これらの成分について、順に説明する。

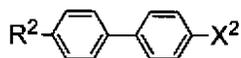
【0089】

成分Bは、右末端にハロゲンまたはフッ素含有基を有する化合物である。成分Bの好ましい例として、化合物(2-1)~(2-16)、化合物(3-1)~(3-112)、化合物(4-1)~(4-54)を挙げることができる。なお、式(3)および(4)において、Z⁵およびZ⁶の両方が-CF₂O-および/または-OCF₂-であることはない。これは、Z⁵とZ⁶の両方が-CF₂O-である化合物、Z⁵とZ⁶の両方が-OCF₂-である化合物、一方が-CF₂O-であり、他方が-OCF₂-である化合物を成分Bが含まないことを意味する。

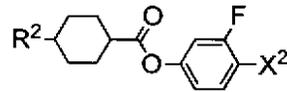
10

【0090】

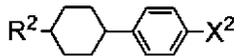
【化16】



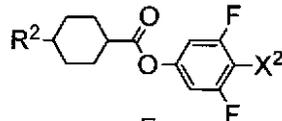
(2-1)



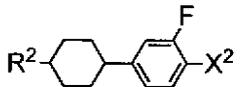
(2-9)



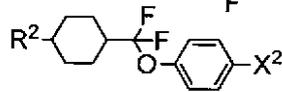
(2-2)



(2-10)

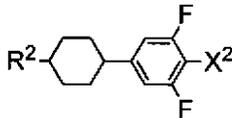


(2-3)

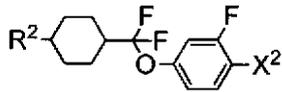


(2-11)

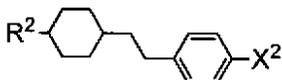
20



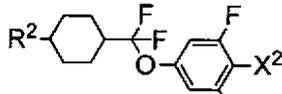
(2-4)



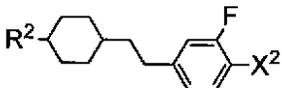
(2-12)



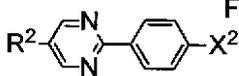
(2-5)



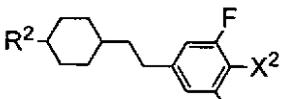
(2-13)



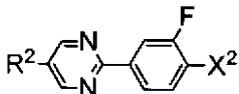
(2-6)



(2-14)

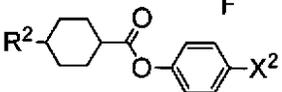


(2-7)

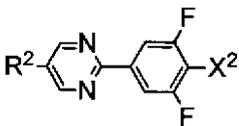


(2-15)

30



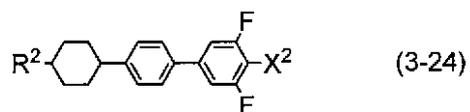
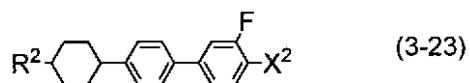
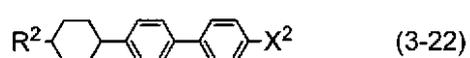
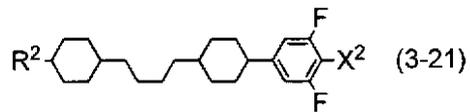
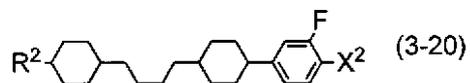
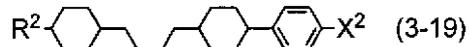
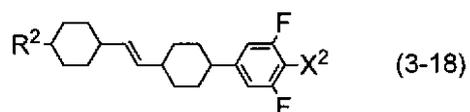
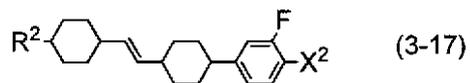
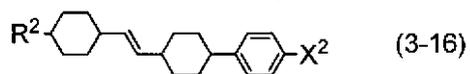
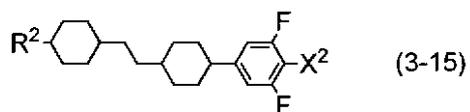
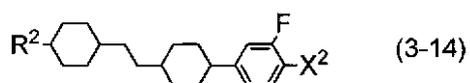
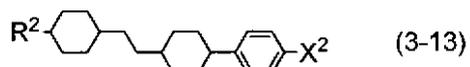
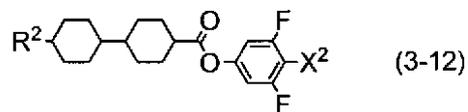
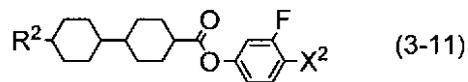
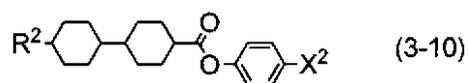
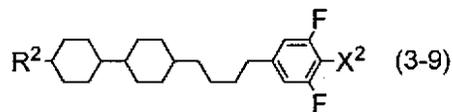
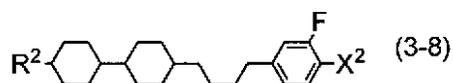
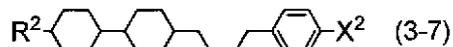
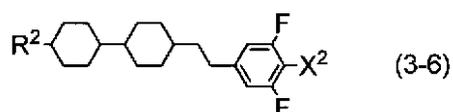
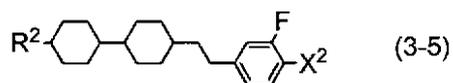
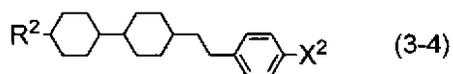
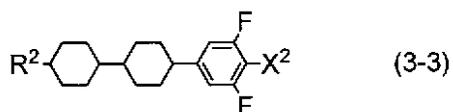
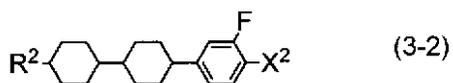
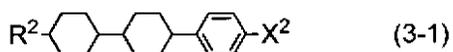
(2-8)



(2-16)

【0091】

【化 1 7】



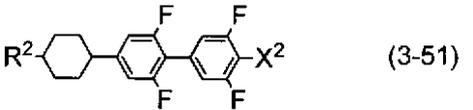
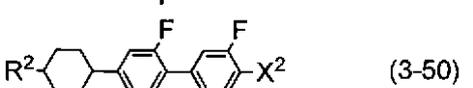
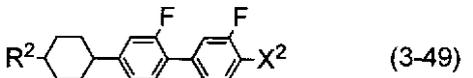
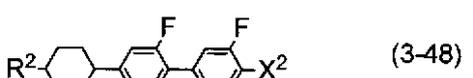
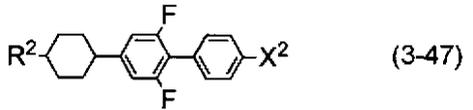
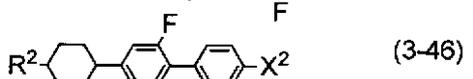
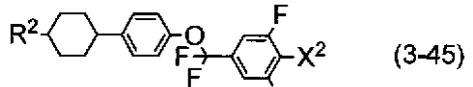
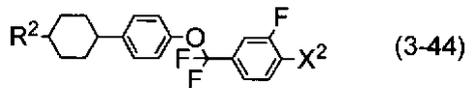
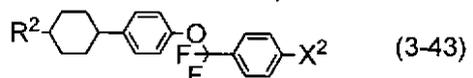
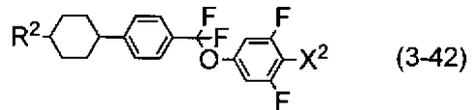
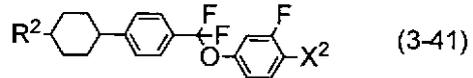
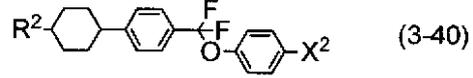
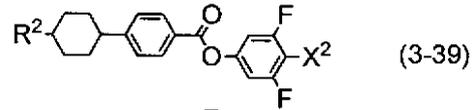
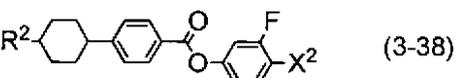
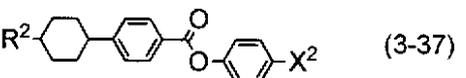
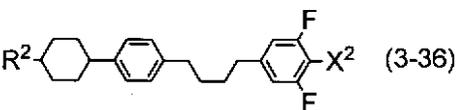
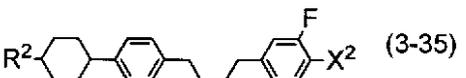
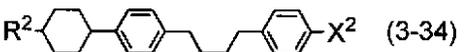
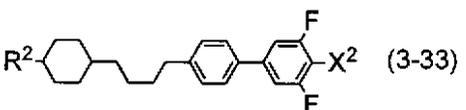
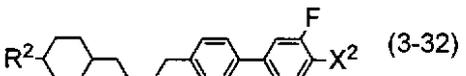
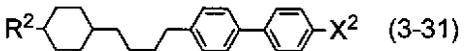
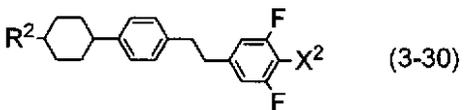
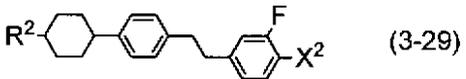
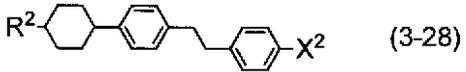
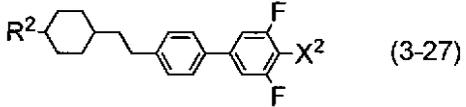
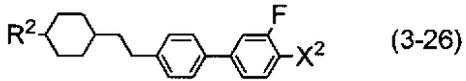
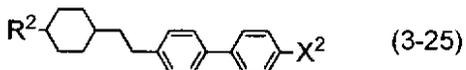
10

20

30

【 0 0 9 2 】

【化 1 8】



【 0 0 9 3】

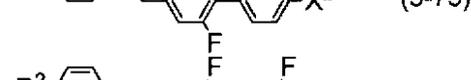
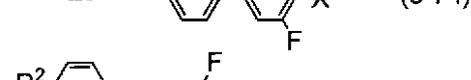
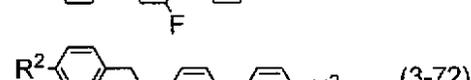
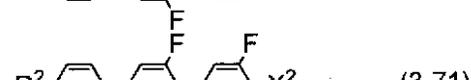
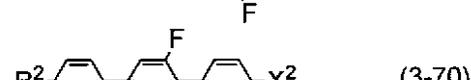
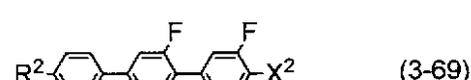
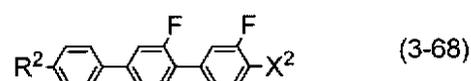
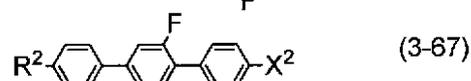
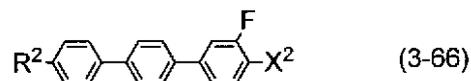
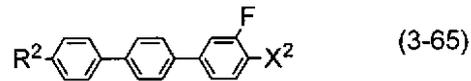
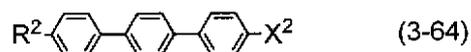
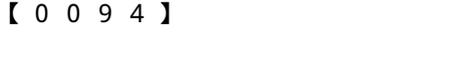
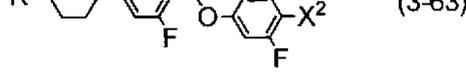
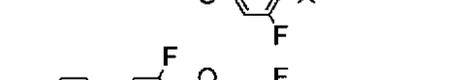
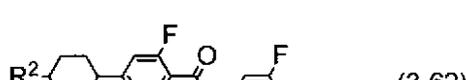
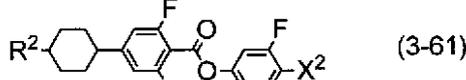
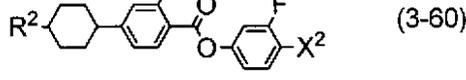
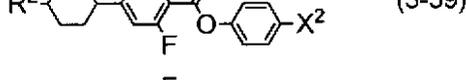
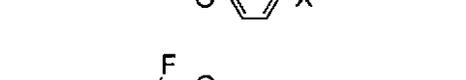
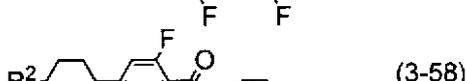
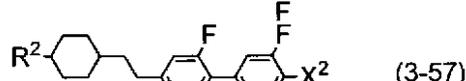
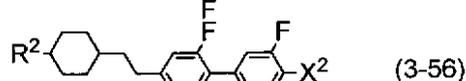
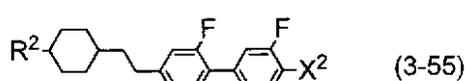
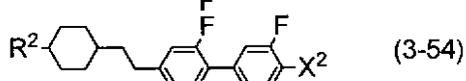
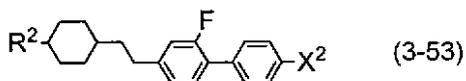
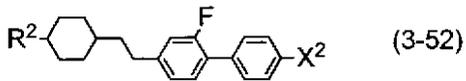
10

20

30

40

【化 1 9】



【 0 0 9 4】

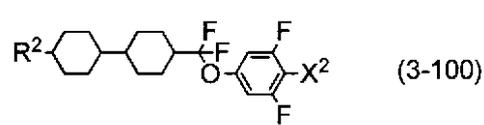
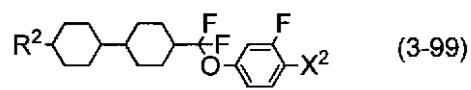
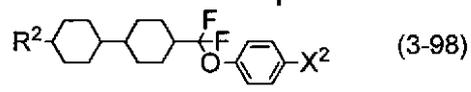
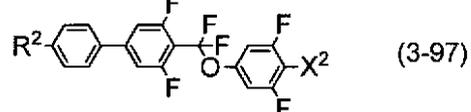
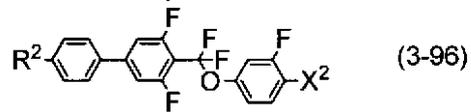
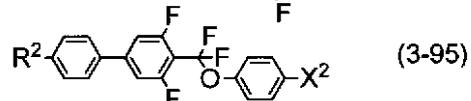
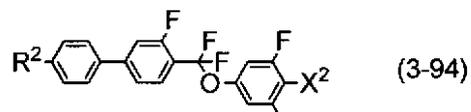
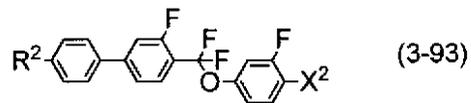
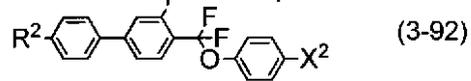
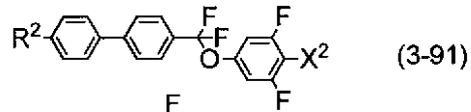
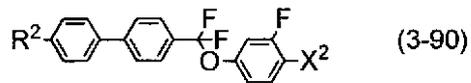
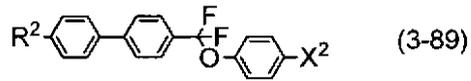
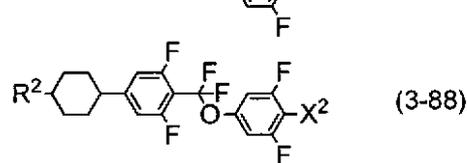
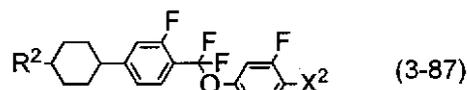
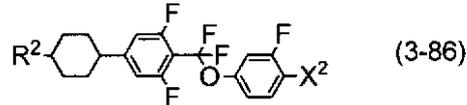
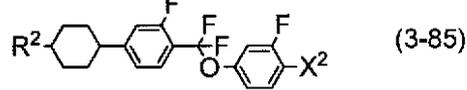
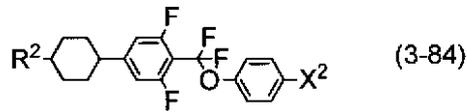
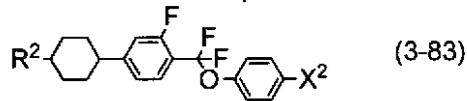
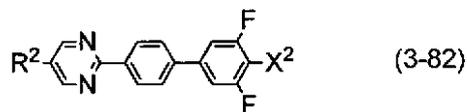
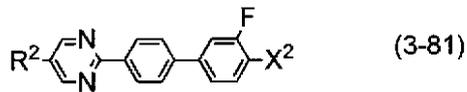
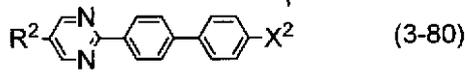
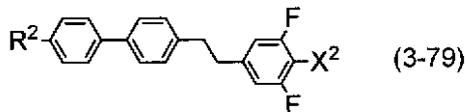
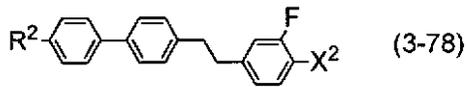
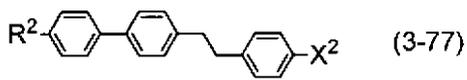
10

20

30

40

【化 2 0】



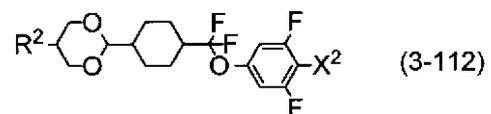
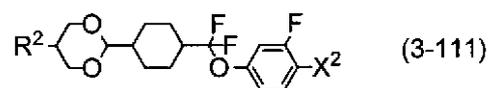
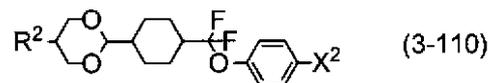
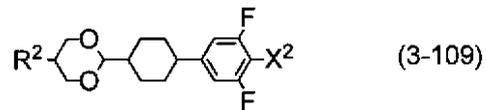
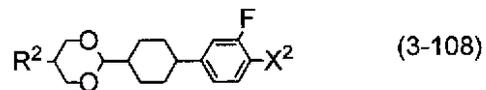
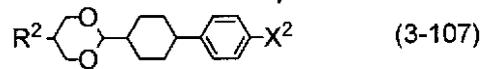
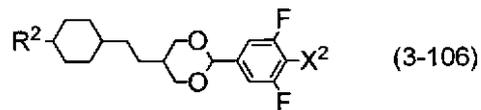
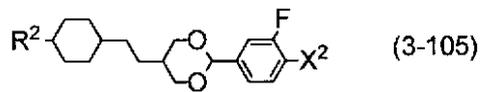
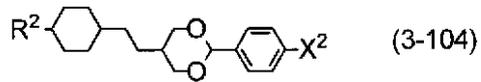
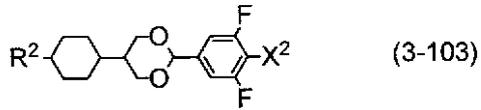
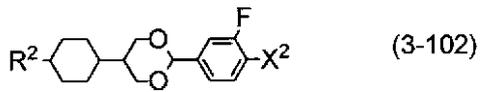
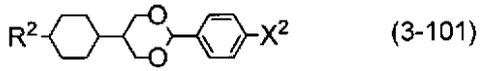
10

20

30

【 0 0 9 5】

【化 2 1】



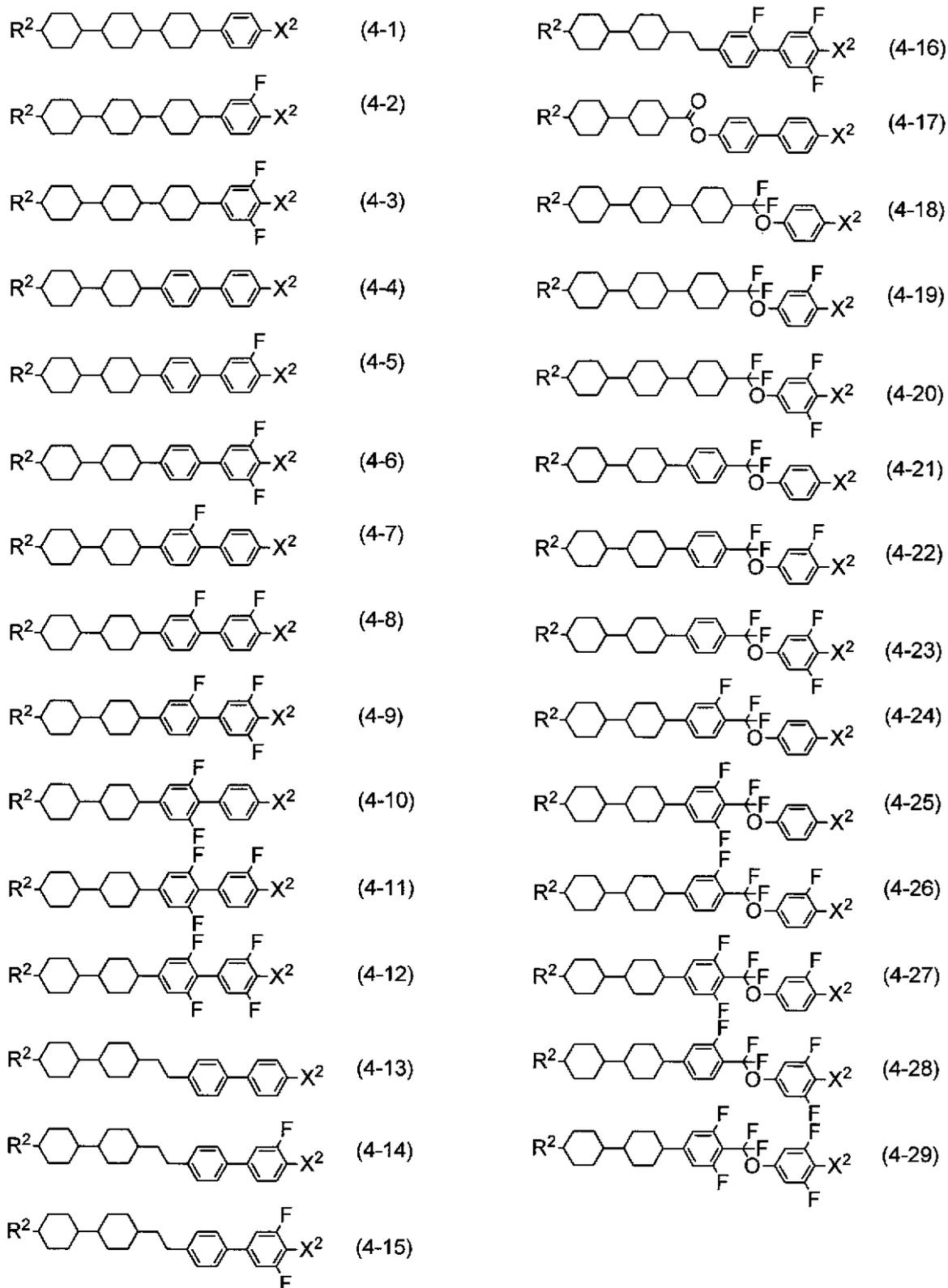
【 0 0 9 6 】

10

20

30

【化 2 2】



【 0 0 9 7 】

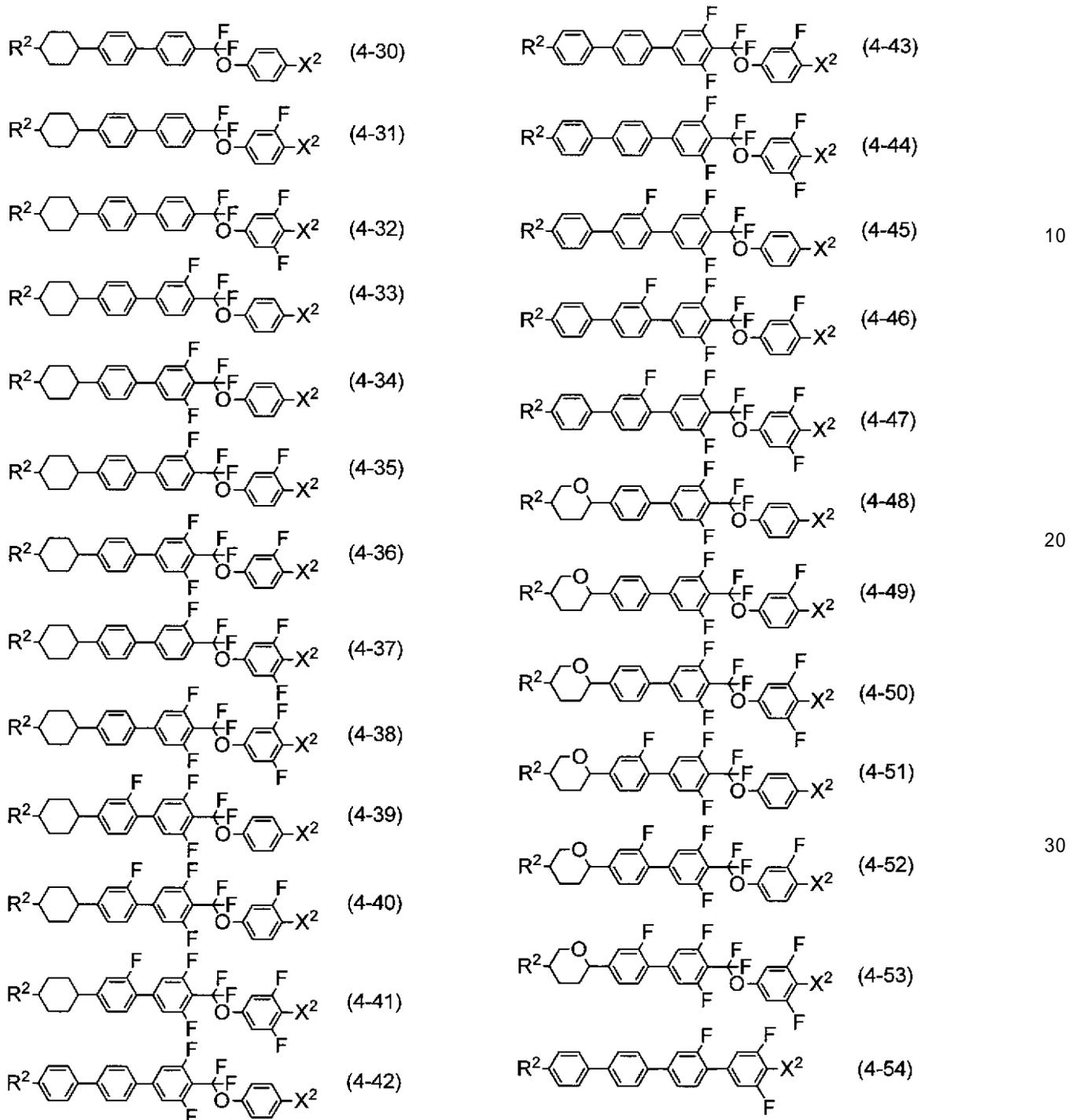
10

20

30

40

【化 2 3】



これらの化合物（成分 B）において、 R^2 および X^2 の定義は、前記と同じである。

40

【0098】

成分 B は、誘電率異方性が正であり、熱、光などに対する安定性が非常に優れているので、TFMモード用またはPSAモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分 B の含有量は、組成物の全重量に対して 1 ~ 99 重量%の範囲が適するが、好ましくは 10 ~ 97 重量%の範囲、より好ましくは 40 ~ 95 重量%の範囲である。この組成物は、化合物(12) ~ (14) (成分 E) をさらに添加することにより粘度を調整することができる。

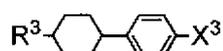
【0099】

成分 C は、右末端基が $-C-N$ または $-C-C-C-N$ である化合物(5)である。成分 C の好ましい例として、化合物(5-1) ~ (5-64) を挙げるができる。

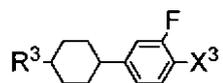
50

【 0 1 0 0 】

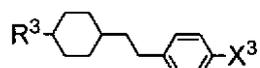
【 化 2 4 】



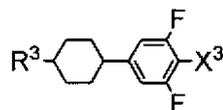
(5-1)



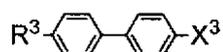
(5-2)



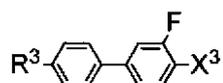
(5-3)



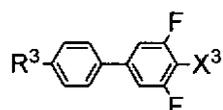
(5-4)



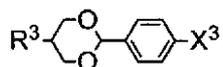
(5-5)



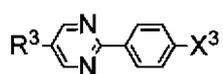
(5-6)



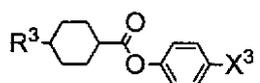
(5-7)



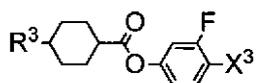
(5-8)



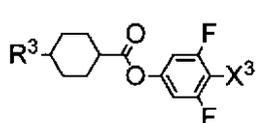
(5-9)



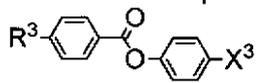
(5-10)



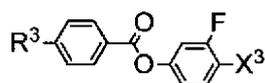
(5-11)



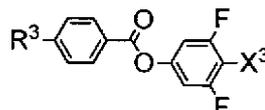
(5-12)



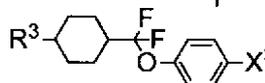
(5-13)



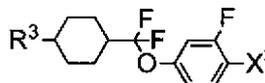
(5-14)



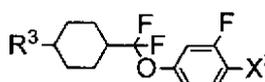
(5-15)



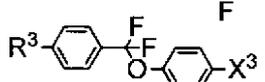
(5-16)



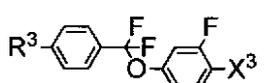
(5-17)



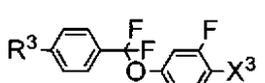
(5-18)



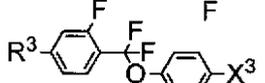
(5-19)



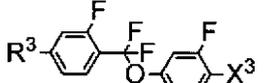
(5-20)



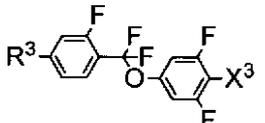
(5-21)



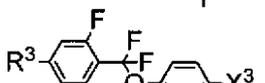
(5-22)



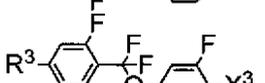
(5-23)



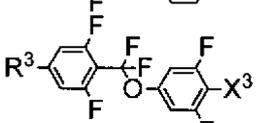
(5-24)



(5-25)



(5-26)



(5-27)

10

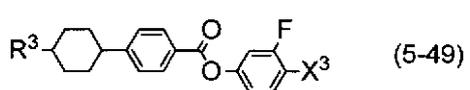
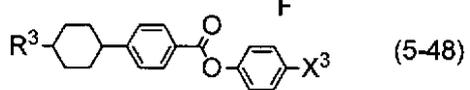
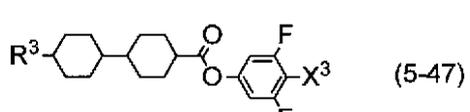
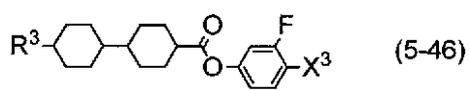
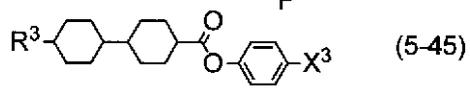
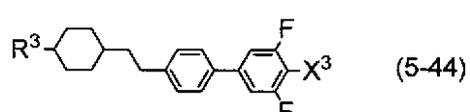
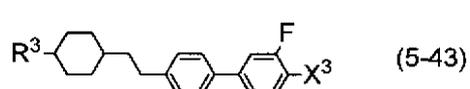
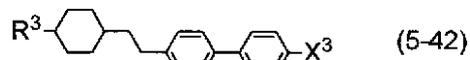
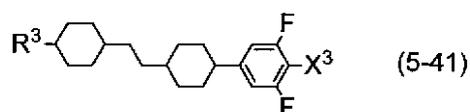
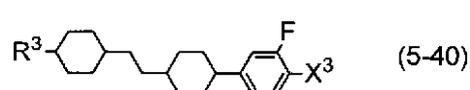
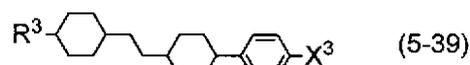
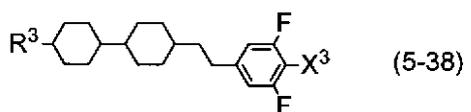
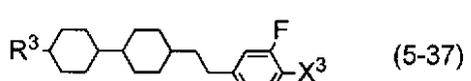
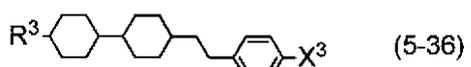
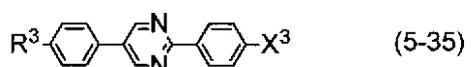
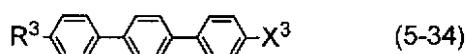
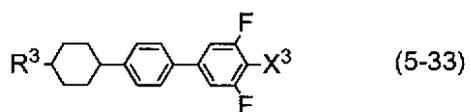
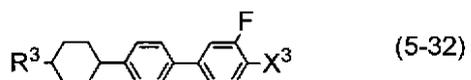
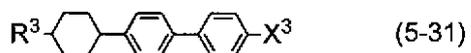
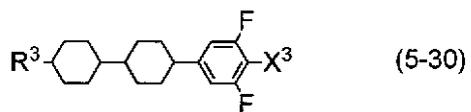
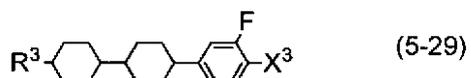
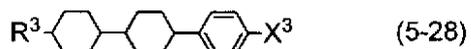
20

30

40

【 0 1 0 1 】

【化 2 5】



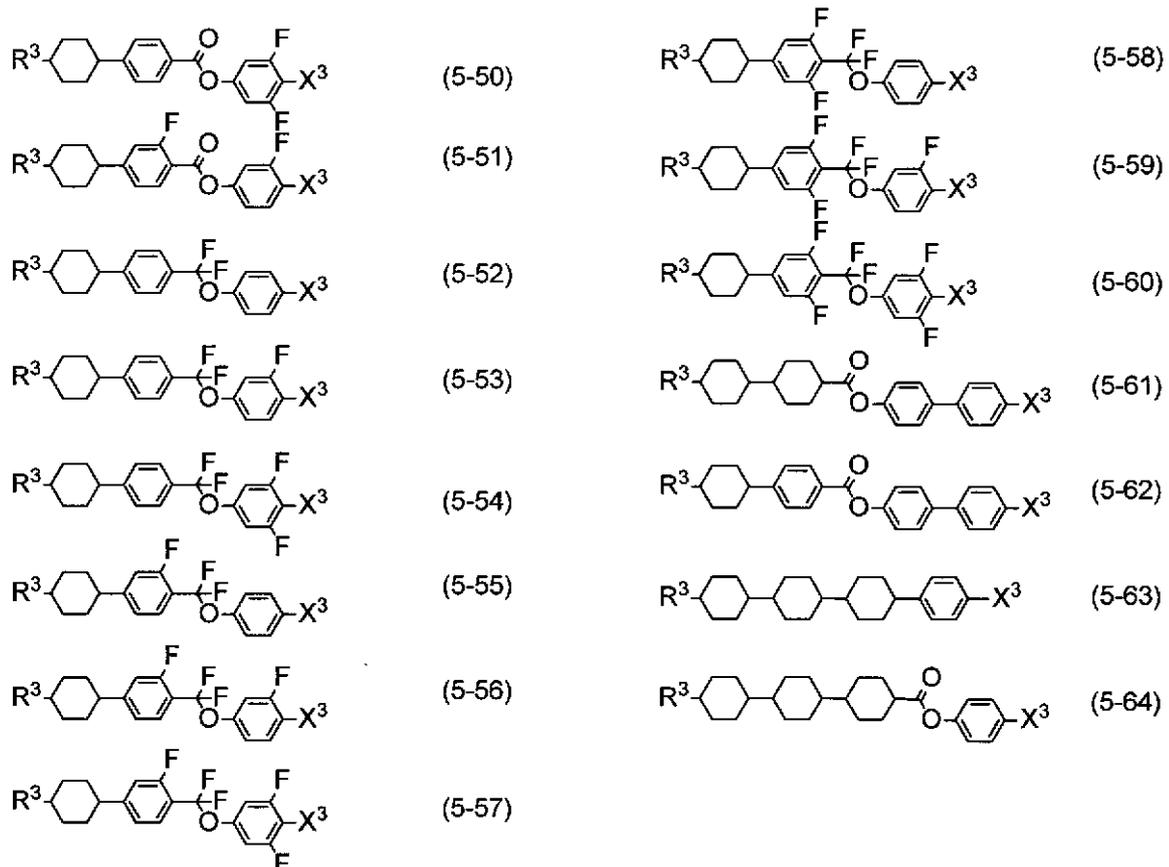
10

20

30

【 0 1 0 2 】

【化 2 6】



これらの化合物（成分 C）において、 R^3 および X^3 の定義は、前記と同じである。

【0103】

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

【0104】

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

【0105】

成分 D は、化合物 (6) ~ (11) である。これらの化合物は、2、3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレンのように、ラテラル位が 2 つのハロゲンで置換されたベンゼン環を有する。成分 D の好ましい例として、化合物 (6 - 1) ~ (6 - 6)、化合物 (7 - 1) ~ (7 - 15)、化合物 (8 - 1)、化合物 (9 - 1) ~ (9 - 3)、化合物 (10 - 1) ~ (10 - 11)、および化合物 (11 - 1) ~ (11 - 10) を挙げるができる。

【0106】

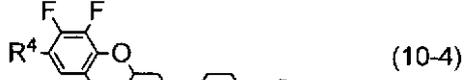
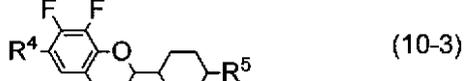
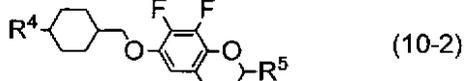
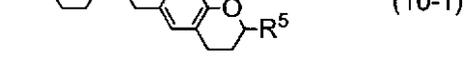
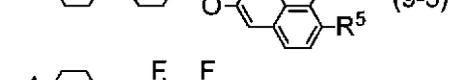
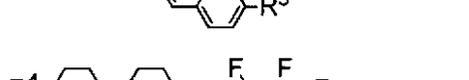
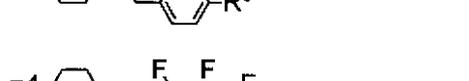
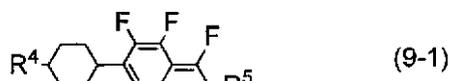
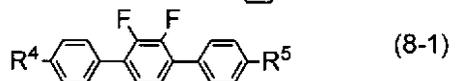
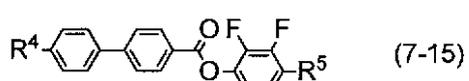
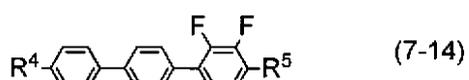
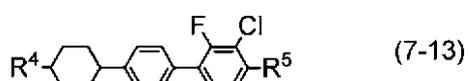
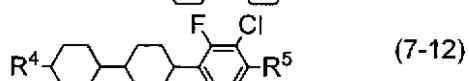
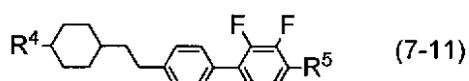
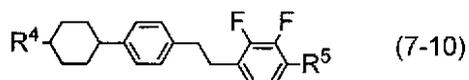
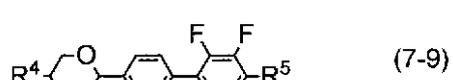
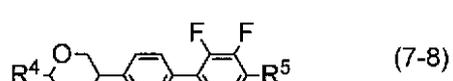
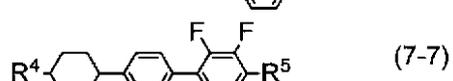
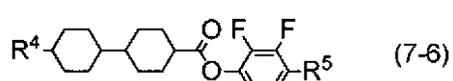
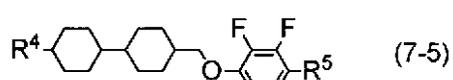
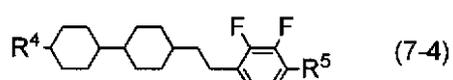
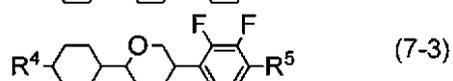
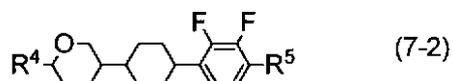
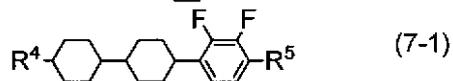
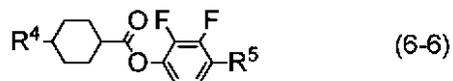
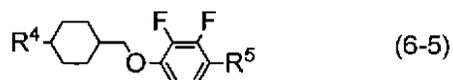
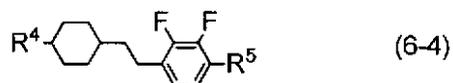
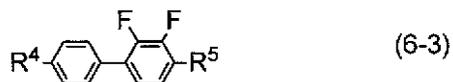
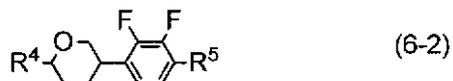
10

20

30

40

【化 2 7】



10

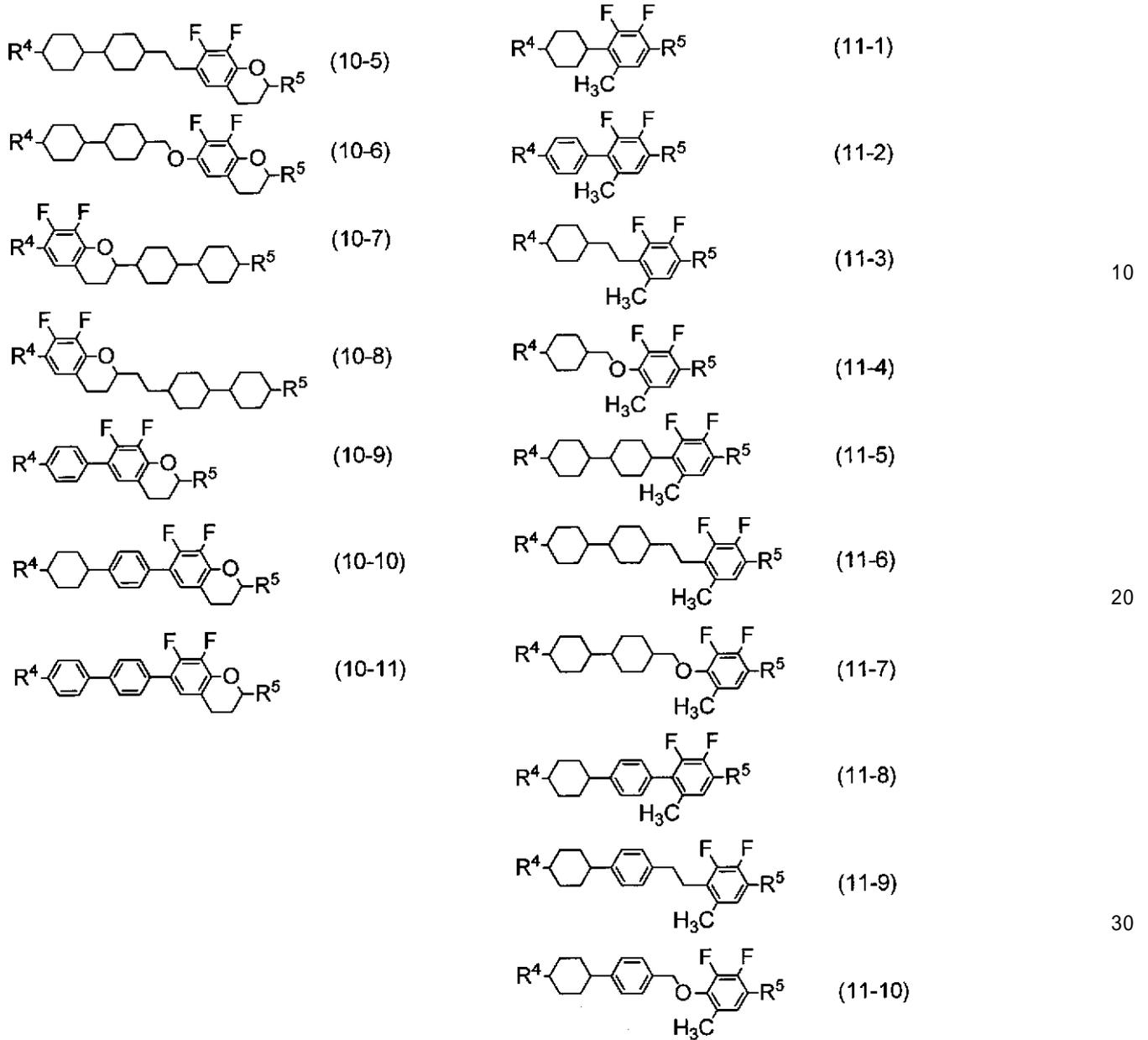
20

30

40

【 0 1 0 7 】

【化 2 8】



これらの化合物（成分 D）において、 R^4 および R^5 の定義は、前記と同じである。

【0108】

成分 D は、誘電率異方性が負の化合物である。成分 D は、主として V A モード用または P S A モード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分 D の含有量を増加させると組成物の誘電率異方性が大きくなるが、粘度が大きくなる。そこで、誘電率異方性の要求値を満たす限り、含有量は少ないほうが好ましい。したがって、誘電率異方性の絶対値が 5 程度であることを考慮すると、十分な電圧駆動をさせるには、含有量が 40 重量%以上であることが好ましい。

【0109】

成分 D のうち、化合物（6）は 2 環化合物であるので、主として、粘度の調整、光学的異方性の調整、または誘電率異方性の調整の効果がある。化合物（7）および（8）は 3 環化合物であるので、上限温度を高くする、光学的異方性を大きくする、または誘電率異方性を大きくするという効果がある。化合物（9）～（11）は、誘電率異方性を大きくするという効果がある。

【0110】

V A モード用または P S A モード用の組成物を調製するには、成分 D の含有量は、

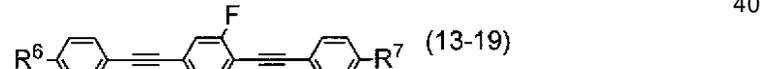
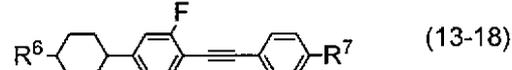
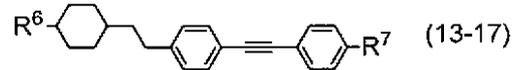
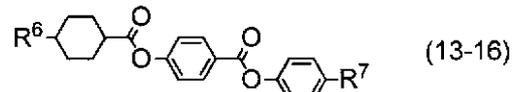
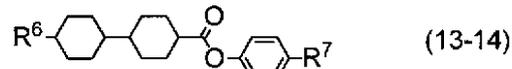
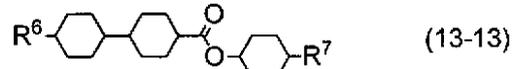
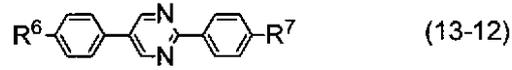
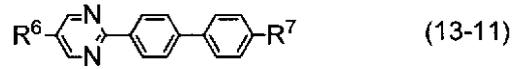
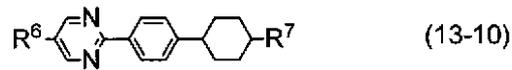
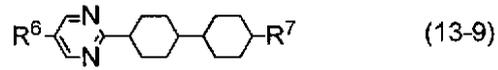
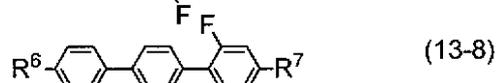
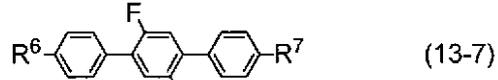
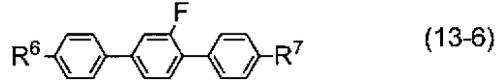
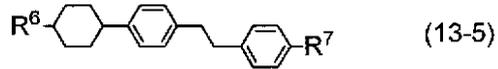
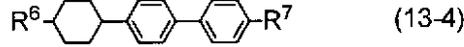
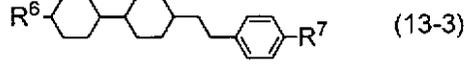
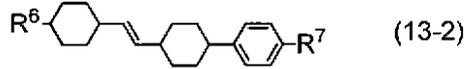
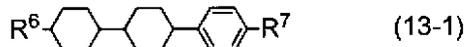
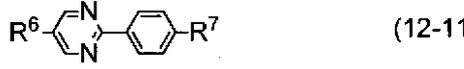
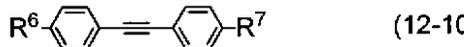
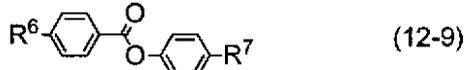
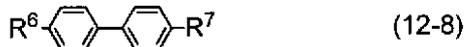
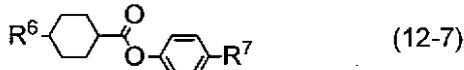
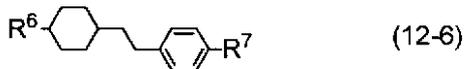
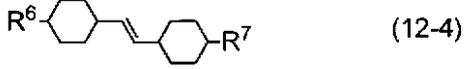
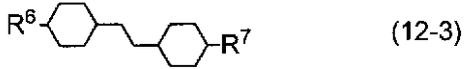
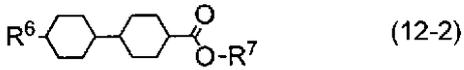
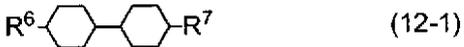
組成物の全重量に対して、好ましくは40重量%以上であり、より好ましくは50～95重量%の範囲である。成分Dを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧-透過率曲線を調整することが可能となる。成分Dを誘電率異方性が正である組成物に添加する場合は、成分Dの含有量が組成物の全重量に対して30重量%以下が好ましい。

【0111】

成分Eは、2つの末端基がアルキルなどである化合物である。成分Eの好ましい例として、化合物(12-1)～(12-11)、化合物(13-1)～(13-19)、および化合物(14-1)～(14-6)を挙げることができる。

【0112】

【化 2 9】



【 0 1 1 3】

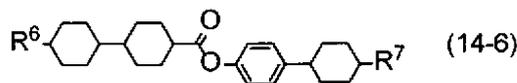
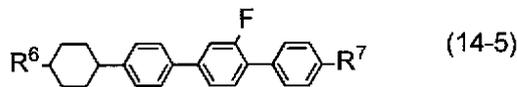
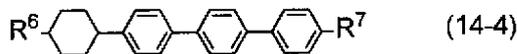
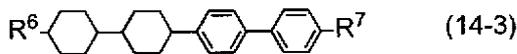
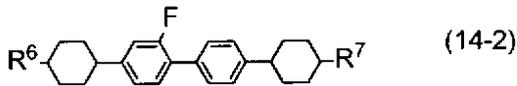
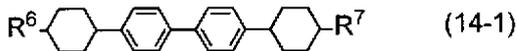
10

20

30

40

【化 3 0】



これらの化合物（成分 E）において、 R^6 および R^7 の定義は、前記と同じである。

【0114】

成分 E は、誘電率異方性の絶対値が小さいので、中性に近い化合物である。化合物（12）は、主として粘度の調整または光学的異方性の調整の効果がある。化合物（13）および（14）は、上限温度を高くすることによってネマチック相の温度範囲を広げる効果、または光学的異方性の調整の効果がある。

【0115】

成分 E の含有量を増加させると組成物の粘度が小さくなるが、誘電率異方性が小さくなる。そこで、誘電率異方性の要求値を満たす限り、含有量が多いほうが好ましい。したがって、VAモード用またはPSAモード用の組成物を調製する場合には、成分 E の含有量は、組成物の全重量に対して、好ましくは30重量%以上、より好ましくは40重量%以上である。

【0116】

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

【0117】

組成物（1）は、少なくとも1つの光学活性化合物をさらに含有してもよい。光学活性化合物として、公知のキラルド-ブ剤を添加することができる。このキラルド-ブ剤は液晶のらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与えることによって逆ねじれを防ぐ、という効果を有する。キラルド-ブ剤の好ましい例として、下記の光学活性化合物（Op-1）～（Op-13）を挙げるができる。

【0118】

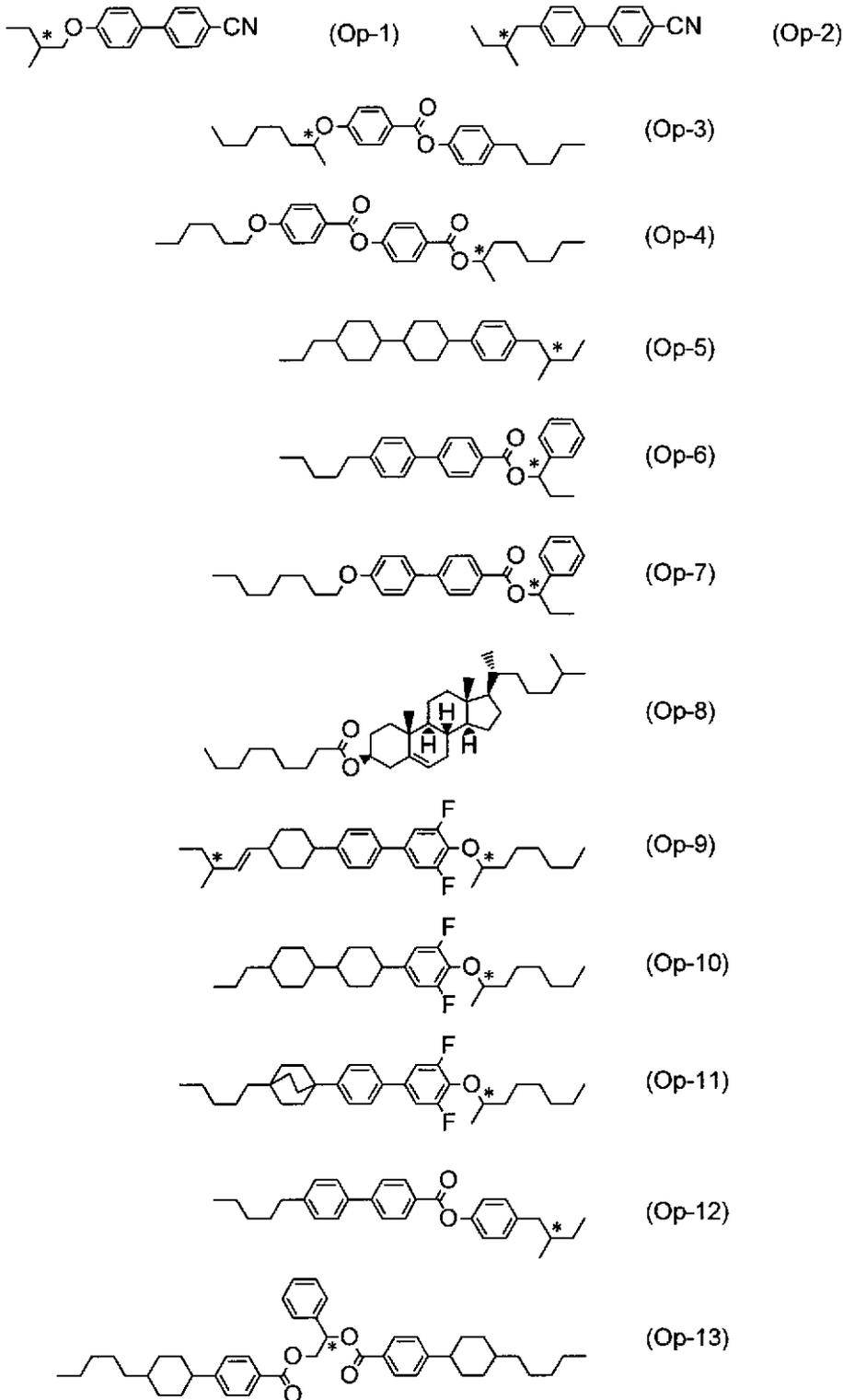
10

20

30

40

【化 3 1】



10

20

30

40

【0119】

組成物(1)は、このような光学活性化合物を添加して、らせんピッチを調整する。らせんピッチは、TFTモード用およびTNモード用の組成物であれば40~200 μm の範囲に調整するのが好ましい。STNモード用の組成物であれば6~20 μm の範囲に調整するのが好ましい。BTNモード用の組成物の場合は、1.5~4 μm の範囲に調整するのが好ましい。らせんピッチの温度依存性を調整する目的で2つ以上の光学活性化合物を添加してもよい。

【0120】

50

組成物(1)は、重合可能な化合物を添加することによってP S Aモード用に使用することもできる。重合可能な化合物の例は、アクリレート、メタクリレート、ビニル化合物、ビニルオキシ化合物、プロペニルエーテル、エポキシ化合物(オキシラン、オキセタン)、ビニルケトンなどである。重合可能な化合物は、好ましくは光重合開始剤などの適切な開始剤存在下でUV照射などにより重合する。重合のための適切な条件、開始剤の適切なタイプ、および適切な量は、当業者には既知であり、文献に記載されている。

【0121】

酸化防止剤は、大きな電圧保持率を維持するために有効である。酸化防止剤の好ましい例は、2,6-ジ-tert-ブチル-4-アルキルフェノールなどである。紫外線吸収剤は、上限温度の低下を防ぐために有効である。紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。立体障害のあるアミンのような光安定剤もまた好ましい。

10

【0122】

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

【0123】

3. 液晶表示素子

組成物(1)は、P Cモード、T Nモード、S T Nモード、O C Bモード、P S Aモードなどの動作モードを有し、アクティブマトリクス(A M方式)で駆動する液晶表示素子に使用できる。組成物(1)は、P Cモード、T Nモード、S T Nモード、O C Bモード、V Aモード、I P Sモードなどの動作モードを有し、パッシブマトリクス(P M)方式で駆動する液晶表示素子にも使用することができる。これらのA M方式およびP M方式の素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。

20

【0124】

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

【実施例】

30

【0125】

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

【0126】

1-1. 化合物(1)の実施例

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

【0127】

N M R分析

測定装置は、D R X - 5 0 0 (ブルカーバイオスピ(株)社製)を用いた。¹H - N M Rの測定では、試料をC D C l₃などの重水素化溶媒に溶解させ、測定は、室温で、5 0 0 M H z、積算回数16回の条件で行った。テトラメチルシランを内部標準として用いた。¹⁹F - N M Rの測定では、C F C l₃を内部標準として使い、積算回数24回で行った。核磁気共鳴スペクトルの説明において、sはシングレット、dはダブルット、tはトリプレット、qはカルテット、q u i nはクインテット、s e xはセクステット、mはマルチプレット、b rはブロードであることを意味する。

40

【0128】

[測定試料]

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

50

きには、化合物を母液晶に混合して調製した組成物を試料として用いた。

【0129】

化合物を母液晶と混合した試料を用いる場合には、次の方法で測定を行った。化合物15重量%と母液晶85重量%とを混合して試料を調製した。この試料の測定値から、次の式で表わされる外挿法にしたがって、外挿値を計算し、この値を記載した。外挿値 = (100 × 試料の測定値 - 母液晶の重量% × 母液晶の測定値) / 化合物の重量%

【0130】

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

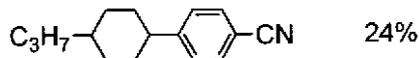
10

【0131】

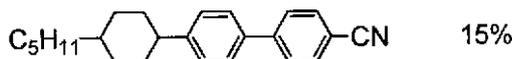
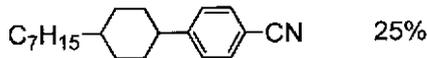
母液晶としては、下記の母液晶（i）を用いた。母液晶（i）の成分の割合を重量%で示す。

【0132】

【化32】



20



【0133】

[測定方法]

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

30

【0134】

(1) 相構造

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

40

【0135】

(2) 転移温度（ ）

パーキンエルマー社製走査熱量計DSC-7システム、またはDiamond DSCシステムを用いて、3 / 分速度で昇降温し、試料の相変化に伴う吸熱ピーク、または発熱ピークの開始点を外挿により求め、転移温度を決定した。化合物が固体からスメクチック相、ネマチック相などの液晶相に転移する温度を「液晶相の下限温度」と略すことがある。化合物が液晶相から液体に転移する温度を「透明点」と略すことがある。

【0136】

結晶はCと表した。結晶の種類区別がつく場合は、それぞれC₁またはC₂と表した。スメクチック相はS、ネマチック相はNと表した。スメクチック相の中で、スメクチックA

50

相、スメクチックB相、スメクチックC相、またはスメクチックF相の区別がつく場合は、それぞれ S_A 、 S_B 、 S_C 、または S_F と表した。液体（アイソトロピック）はIと表した。転移温度は、例えば、「C 50.0 N 100.0 I」のように表記した。これは、結晶からネマチック相への転移温度が50.0 であり、ネマチック相から液体への転移温度が100.0 であることを示す。

【0137】

(3) 低温相溶性

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

10

【0138】

(4) ネマチック相の上限温度 (T_{NI} または NI ;)

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

【0139】

(5) ネマチック相の下限温度 (T_C ;)

ネマチック相を有する試料を0、-10、-20、-30、および-40 のフリーザー中に10日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が-20 ではネマチック相のままであり、-30 では結晶またはスメクチック相に変化したとき、 T_C を -20 と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

20

【0140】

(6) 粘度 (バルク粘度 ; ; 20 で測定 ; $mPa \cdot s$)

E型回転粘度計を用いて測定した。

【0141】

(7) 粘度 (回転粘度 ; 1 ; 25 で測定 ; $mPa \cdot s$)

測定はM. Imai et al., *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。ツイスト角が0°であり、そして2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が5 μm であるTN素子に試料を入れた。この素子に16Vから19.5Vの範囲で0.5V毎に段階的に印加した。0.2秒の無印加のあと、ただ1つの矩形波 (矩形パルス ; 0.2秒) と無印加 (2秒) の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流 (transient current) のピーク電流 (peak current) とピーク時間 (peak time) を測定した。これらの測定値とM. Imaiらの論文、40頁の計算式 (8) とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性の値は、この回転粘度を測定した素子を用い、下に記載した方法で求めた。

30

【0142】

(8) 光学的異方性 (屈折率異方性 ; 25 で測定 ; n)

測定は、波長589nmの光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッペ屈折計により行なった。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率 (n) は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率 (n) は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学的異方性 (n) の値は、 $n = n - n$ 、の式から計算した。

40

【0143】

(9) 誘電率異方性 (; 25 で測定)

2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が9 μm であり、そしてツイスト角が80度であるTN素子に試料を入れた。この素子にサイン波 (10V、1kHz) を印加し、2秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率 () を測定した。この素子にサイン波 (0

50

5 V、1 kHz) を印加し、2 秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率 () を測定した。誘電率異方性の値は、 $\epsilon_{11} - \epsilon_{33}$ の式から計算した。

【0144】

(10) 弾性定数 (K; 25 で測定; pN)

測定には横河・ヒューレットパッカード株式会社製の HP 4284 A 型 LCR メータを用いた。2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が $20 \mu\text{m}$ である水平配向素子に試料を入れた。このセルに 0 ボルトから 20 ボルト電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。測定した静電容量 (C) と印加電圧 (V) の値を「液晶デバイスハンドブック」(日刊工業新聞社)、75 頁にある式 (2.98)、式 (2.101) を用いてフィッティングし、式 (2.99) から K_{11} および K_{33} の値を得た。次に 171 頁にある式 (3.18) に、先ほど求めた K_{11} および K_{33} の値を用いて K_{22} を算出した。弾性定数は、このようにして求めた K_{11} 、 K_{22} 、および K_{33} の平均値である。

10

【0145】

(11) しきい値電圧 (V_{th} ; 25 で測定; V)

測定には大塚電子株式会社製の LCD 5100 型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が約 $0.45 / n (\mu\text{m})$ であり、ツイスト角が 80 度であるノーマリーホワイトモード (normally white mode) の TN 素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧 (32 Hz、矩形波) は 0 V から 10 V まで 0.02 V ずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率 100% であり、この光量が最小であったときが透過率 0% である電圧 - 透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が 90% になったときの電圧である。

20

【0146】

(12) 電圧保持率 (VHR - 1; 25 で測定; %)

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

30

【0147】

(13) 電圧保持率 (VHR - 2; 80 で測定; %)

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

40

【0148】

原料

ソルミックス A - 11 (登録商標) は、エタノール (85.5%)、メタノール (13.4%) とイソプロパノール (1.1%) の混合物であり、日本アルコール販売 (株) から入手した。テトラヒドロフランを THF と略すことがある。

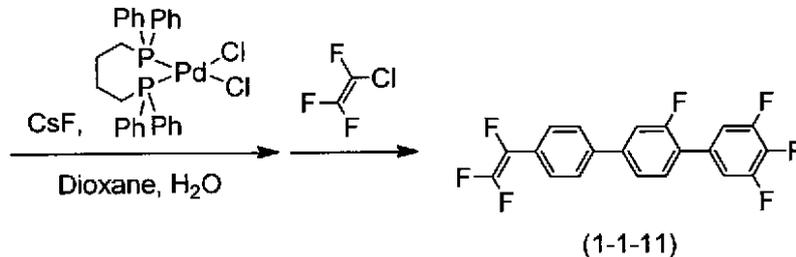
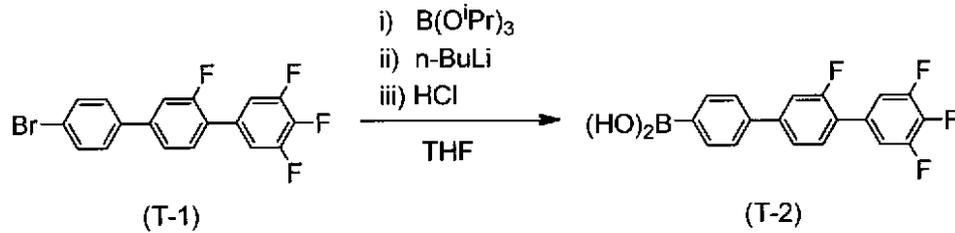
【0149】

[実施例 1]

化合物 (No. 1 - 1 - 11) の合成

【0150】

【化33】



10

【0151】

第1工程

500 ml のナス型フラスコにアリール臭化物 (T-1) 6.00 g (15.7 mmol) を量り取り、減圧下 70 °C にて 2 時間加熱乾燥した。室温に放冷後、アルゴン雰囲気下とした後、無水 THF (120 ml) に溶解させ、-78 °C に冷却した。この溶液にホウ酸トリスプロピル 4.80 ml (20.8 mmol) を加え、1.65 M n-ブチルリチウムのヘキサン溶液 12.5 ml (20.6 mmol) をゆっくりと滴下して、-78 °C にて 2 時間攪拌した。反応混合物に 1 M 塩酸水溶液 (90 ml) と酢酸エチル (120 ml) を加え室温にて 10 分間攪拌した。分液した後、水層を酢酸エチル (90 ml × 2) にて抽出し、合わせた有機層を飽和炭酸水素ナトリウム水溶液 (50 ml) および純水 (50 ml) で順次洗浄し、乾燥後、減圧濃縮した。得られた固形物を無水 THF (40 ml) およびクロロホルム (10 ml) に懸濁させ、超音波処理を 10 分間行ったものをろ過し、クロロホルムで洗浄することでアリールボロン酸 (T-2) (4.70 g、13.6 mmol) を得た。

20

30

【0152】

第2工程

100 ml の Pyrex tube にアリールボロン酸 (T-2) 5.54 g (16.0 mmol)、ジクロロ[1,4-ビス(ジフェニルホスフィノ)ブタン]パラジウム (II) 96.6 mg (0.160 mmol)、フッ化セシウム 4.86 g (32.0 mmol) を量り取り、アルゴン雰囲気下とした後、無水ジオキサン (32 ml)、純水 (1.6 ml) を加えた。この懸濁液を脱気した後、-78 °C に冷却した。1-クロロ-1,2,2-トリフルオロエチレン 4.66 g (40.0 mmol) を加えて封管した後、100 °C にて 1 時間加熱攪拌した。反応混合物を、シリカゲルを敷いたグラスフィルターにてろ過し、酢酸エチルで洗浄後、ろ液を減圧濃縮した。得られた固形物を山善社製自動中圧カラムクロマトグラフィー (カラムサイズ M+L (シリカゲル 330 g)、ヘキサン) により精製した。さらにヘキサン-酢酸エチルからの再結晶により精製して、化合物 (No. 1-1-11) (2.57 g、6.72 mmol) を得た。

40

【0153】

1H -NMR (ppm; $CDCl_3$): 7.68 (brd, $J = 8.3$ Hz, 2H)、7.58 (brd, $J = 8.3$ Hz, 2H)、7.53 - 7.39 (m, 3H)、7.26 - 7.21 (m, 2H)。

^{19}F -NMR (ppm; $CDCl_3$): -98.6 (dd, $J = 68.2$ Hz, $J = 32.7$ Hz, 1F)、-113.5 (dd, $J = 109.0$ Hz, $J = 68.2$ Hz, 1F)、-117.1 (s, 1F)、-134.2 (d, $J = 20.4$ Hz, 2F)、-

50

161.2 (t, J = 20.4 Hz, 1F)、-177.1 (dd, J = 109.0 Hz, J = 32.7 Hz, 1F)。

【0154】

化合物(No. 1-1-11)の物性は、次のとおりであった。

転移温度: C 105.5 I. $T_{NI} = 81.7$; $\eta = 76.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $n = 0.287$ 。

なお、測定試料は、2重量%の化合物(No. 1-1-11)と98重量%の母液晶(i)とから調製した。通常の割合(15重量% : 85重量%)では、結晶が析出したからである。

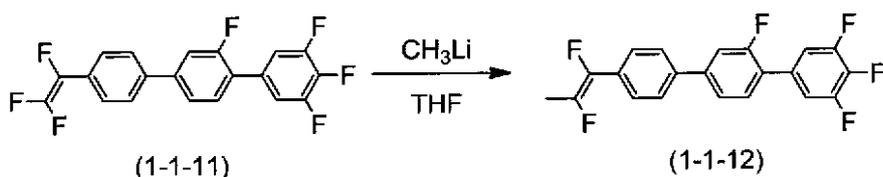
【0155】

[実施例2]

化合物(No. 1-1-12)の合成

【0156】

【化34】



10

20

【0157】

50 ml のナス型フラスコに化合物(No. 1-1-11) 5.25 g (13.7 mmol) を量り取り、アルゴン雰囲気下とした後、無水 THF (140 ml) に溶解させ、-78 に冷却した。この溶液に 1.09 M メチルリチウムのジエチルエーテル溶液 15.5 ml (16.9 mmol) を加え、-78 にて 30 分間攪拌した。反応混合物に 30% 塩化アンモニウム水溶液 (100 ml) を加え分液し、水層に飽和塩化ナトリウム水溶液 (20 ml) を加え、酢酸エチル (120 ml × 2) にて抽出した。合わせた有機層を 18% 塩化ナトリウム水溶液 (100 ml) および飽和塩化ナトリウム水溶液 (100 ml) で順次洗浄し、乾燥後、減圧濃縮した。得られた固形物を山善社製自動中圧カラムクロマトグラフィー (カラムサイズ 200 g + 4 L (シリカゲル 365 g)、ヘキサン) により精製した。さらにヘキサン - 酢酸エチルからの再結晶により精製して、化合物(No. 1-1-12) (1.17 g、3.09 mmol) を得た。

30

【0158】

$^1\text{H-NMR}$ (ppm; CDCl_3): 7.71 (brd, J = 8.5 Hz, 2H)、7.64 (brd, J = 8.5 Hz, 2H)、7.50 - 7.40 (m, 3H)、7.26 - 7.21 (m, 2H)、2.24 (dd, J = 17.9 Hz, J = 5.6 Hz, 3H)。

$^{19}\text{F-NMR}$ (ppm; CDCl_3): -117.1 (s, 1F)、-123.1 (d, J = 10.8 Hz, 1F)、-134.3 (d, J = 20.4 Hz, 2F)、-136.3 (d, J = 10.8 Hz, 1F)、-161.2 (t, J = 20.4 Hz, 1F)。

40

【0159】

化合物(No. 1-1-12)の物性は、次のとおりであった。

転移温度: C (N 158.8) 156.2 I. $T_{NI} = 125.0$; $\eta = 73.7 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $n = 0.270$; $\eta = 22.1$ 。

なお、測定試料は、3重量%の化合物(No. 1-1-12)と97重量%の母液晶(i)とから調製した。通常の割合(15重量% : 85重量%)では、結晶が析出したからである。

【0160】

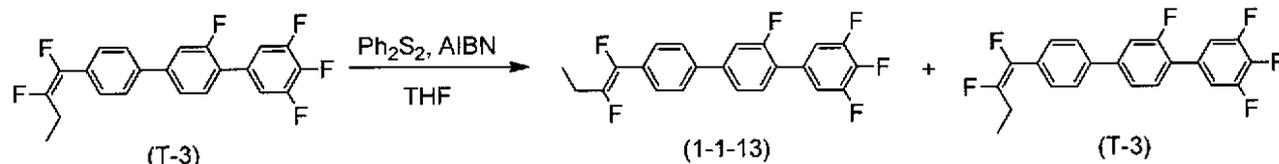
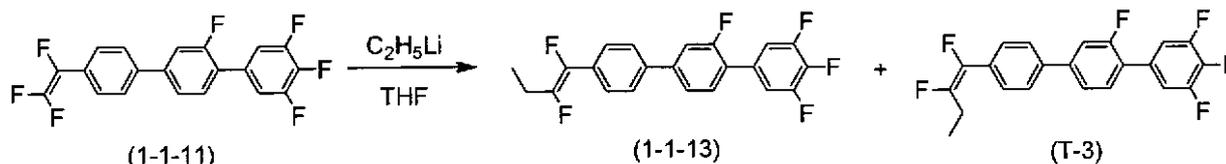
[実施例3]

50

化合物 (No. 1-1-13) の合成

【0161】

【化35】



【0162】

第1工程

50 ml のナス型フラスコに化合物 (No. 1-1-11) 319 mg (0.835 mmol) を量り取り、アルゴン雰囲気下とした後、無水 THF (4.0 ml) に溶解させ、 $-78^\circ C$ に冷却した。この溶液に 0.50 M エチルリチウムのベンゼン/シクロヘキサン (体積比 = 9/1) 混合溶液 2.0 ml (1.0 mmol) を加え、 $-78^\circ C$ にて 1 時間攪拌、 $0^\circ C$ にて 1 時間攪拌した。反応混合物に飽和塩化アンモニウム水溶液 (3.0 ml) を加え、水層を酢酸エチル (5.0 ml \times 1, 3.0 ml \times 2) にて抽出した。合わせた有機層を純水 (3.0 ml) および飽和塩化ナトリウム水溶液 (3.0 ml) で順次洗浄し、乾燥後、減圧濃縮した。得られた固形物を山善社製自動中圧カラムクロマトグラフィー (カラムサイズ L + L (シリカゲル 60 g)、ヘキサン) により精製して、化合物 (No. 1-1-13) (128 mg, 0.326 mmol) および cis 体 (T-3) (78.6 mg, 0.200 mmol) を得た。

【0163】

第2工程

10 ml の Pyrex tube に cis 体 (T-3) 117 mg (0.299 mmol) を量り取り、アルゴン雰囲気下とした後、無水 THF (1.0 ml) に溶解させた。この溶液にジフェニルスルフィド 6.5 mg (0.0299 mmol) および AIBN (アゾビスイソブチロニトリル) 4.9 mg (0.0299 mmol) を加えて封管した後、 $70^\circ C$ にて 5 時間加熱攪拌した。反応混合物に水素化ホウ素ナトリウム 6.0 mg (0.159 mmol) およびエタノール (0.50 ml) をそれぞれ加え、室温にて 30 分間攪拌した。反応混合物に純水 (2.0 ml) を加え、水層を酢酸エチル (3.0 ml \times 2) にて抽出し、合わせた有機層を飽和炭酸水素ナトリウム水溶液 (3.0 ml) および飽和塩化ナトリウム水溶液 (3.0 ml) で順次洗浄し、乾燥後、減圧濃縮した。得られた固形物を山善社製自動中圧カラムクロマトグラフィー (カラムサイズ inj. L + L (シリカゲル 45 g)、ヘキサン) により精製して化合物 (No. 1-1-13) (81.0 mg, 0.206 mmol) および cis 体 (T-3) (36.0 mg, 0.0918 mmol) を得た。

【0164】

第1工程のエチル化および第2工程の異性化を数回行い、得られた化合物 (No. 1-1-13) (2.50 g, 6.37 mmol) をヘキサン - 酢酸エチルからの再結晶により精製して、化合物 (No. 1-1-13) (1.08 g, 2.75 mmol) を得た。

【0165】

1H -NMR (δ ppm; $CDCl_3$): 7.71 (brd, $J = 8.4$ Hz, 2H)、

10

20

30

40

50

7.64 (brd, $J = 8.4 \text{ Hz}$, 2H)、7.50 - 7.38 (m, 3H)、7.26 - 7.21 (m, 2H)、2.61 (ddq, $J = 23.1 \text{ Hz}$, $J = 7.5 \text{ Hz}$, $J = 5.5 \text{ Hz}$, 2H)、1.24 (t, $J = 7.5 \text{ Hz}$, 3H)。

^{19}F -NMR (ppm; CDCl_3): -117.3 (s, 1F)、-134.3 (d, $J = 20.5 \text{ Hz}$, 2F)、-145.8 (d, $J = 121 \text{ Hz}$, 1F)、-160.2 (d, $J = 121 \text{ Hz}$, 1F)、-161.4 (t, $J = 20.5 \text{ Hz}$, 1F)。

【0166】

化合物 (No. 1-1-13) の物性は、次のとおりであった。

転移温度: $C = 104.8$ $N = 130.3$ $I \cdot T_{NI} = 102.7$; $\eta = 66.2$
 $\text{mPa} \cdot \text{s}$; $n = 0.267$; $n_D = 21.1$ 。

なお、測定試料は、10重量%の化合物 (No. 1-1-13) と90重量%の母液晶 (i) とから調製した。通常の割合 (15重量% : 85重量%) では、結晶が析出したからである。

【0167】

実施例 1 ~ 3 に記載された合成方法と同様の方法により、以下に示す化合物 (No. 1-1-1) ~ (No. 1-3-75) を合成することができる。付記したデータは前記の方法に従って求めた。転移温度を測定するときには、化合物そのものを試料として用いた。上限温度 (T_{NI})、粘度 (η)、光学的異方性 (n) および誘電率異方性 (ϵ) を測定するときは、化合物 (15重量%) と母液晶 (i) (85重量%) との混合物を試料として用いた。これらの測定値から、上記の外挿法に従って外挿値を算出して記載した。なお、化合物 (No. 1-1-11) においては、測定試料は、2重量%の化合物 (No. 1-1-11) と98重量%の母液晶 (i) とから調製した。(No. 1-1-12) においては、測定試料は、3重量%の化合物 (No. 1-1-12) と97重量%の母液晶 (i) とから調製した。化合物 (No. 1-1-13) においては、測定試料は、10重量%の化合物 (No. 1-1-13) と90重量%の母液晶 (i) とから調製した。通常の割合 (15重量% : 85重量%) では、結晶が析出したからである。

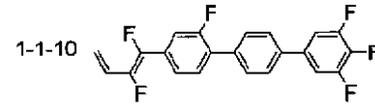
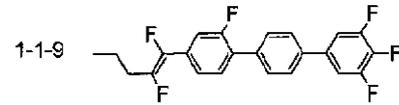
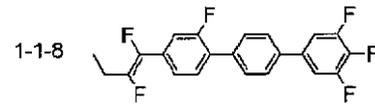
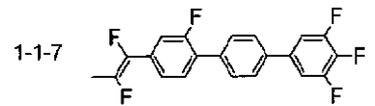
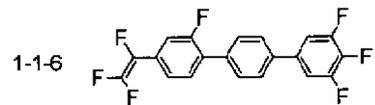
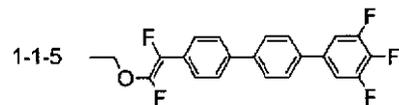
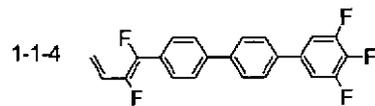
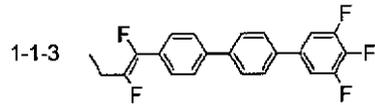
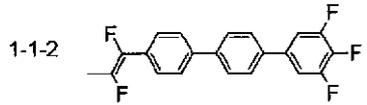
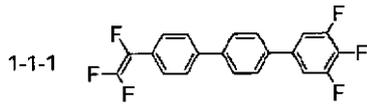
【0168】

10

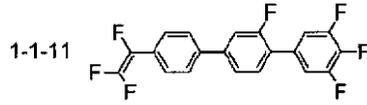
20

【化 3 6】

No.

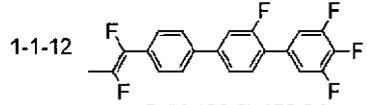


No.



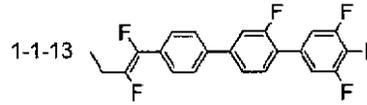
C 105.5 I

$T_{NI}=81.7^{\circ}\text{C}$, $\eta=76.8\text{mPa}\cdot\text{s}$, $\Delta n=0.287$



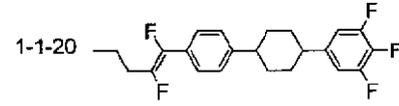
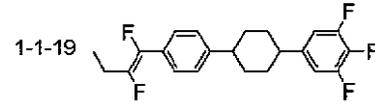
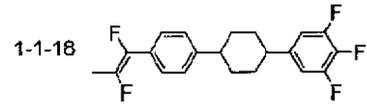
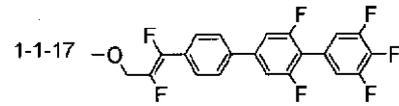
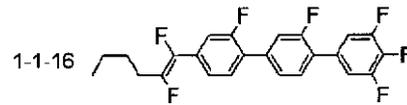
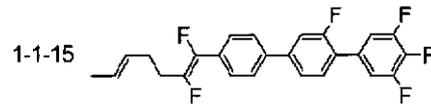
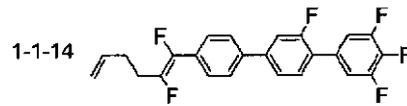
C (N 158.8) 156.2 I

$T_{NI}=125.0^{\circ}\text{C}$, $\eta=73.7\text{mPa}\cdot\text{s}$, $\Delta n=0.270$, $\Delta\varepsilon=22.1$



C 104.8 N 130.3 I

$T_{NI}=102.7^{\circ}\text{C}$, $\eta=66.2\text{mPa}\cdot\text{s}$, $\Delta n=0.267$, $\Delta\varepsilon=21.1$



10

20

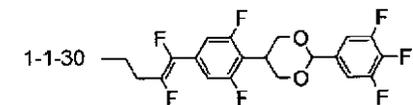
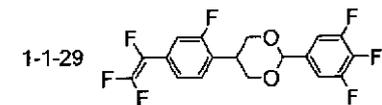
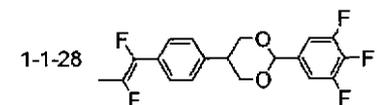
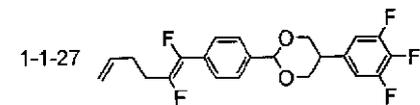
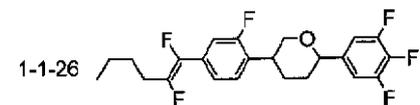
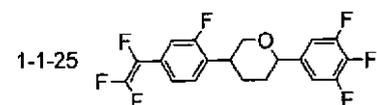
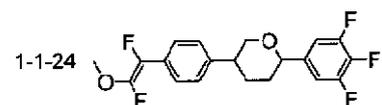
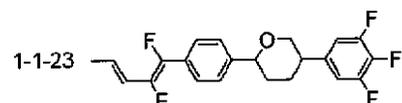
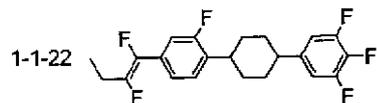
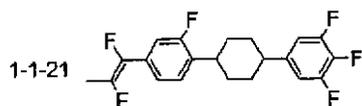
30

40

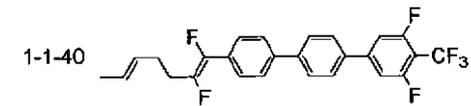
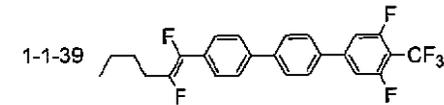
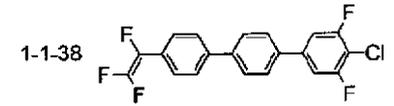
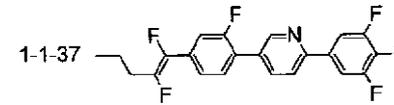
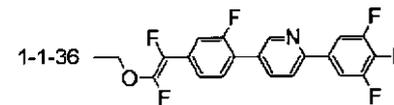
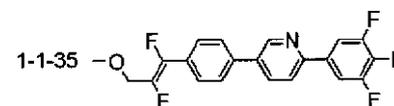
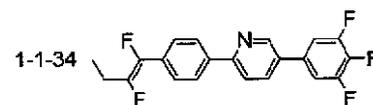
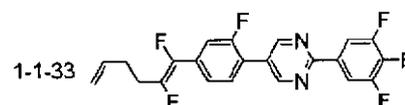
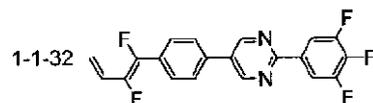
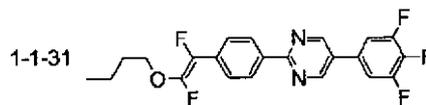
【 0 1 6 9 】

【化 3 7】

No.



No.



10

20

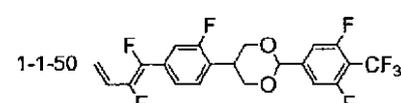
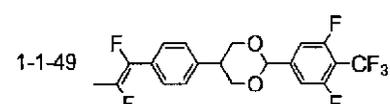
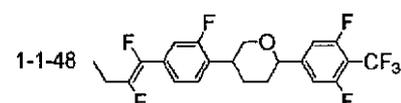
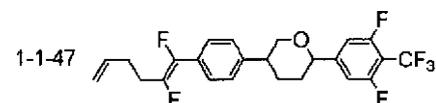
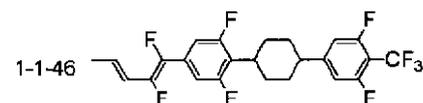
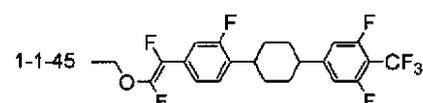
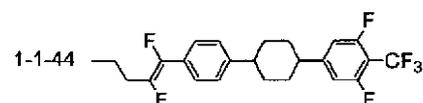
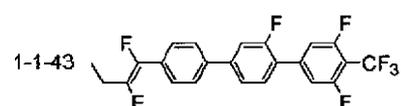
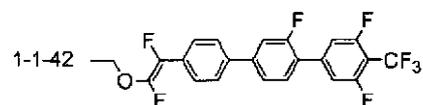
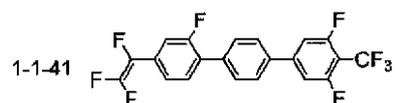
30

40

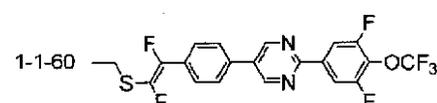
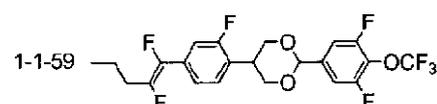
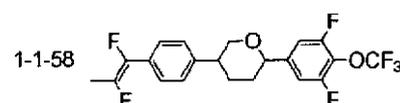
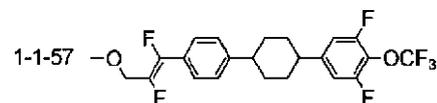
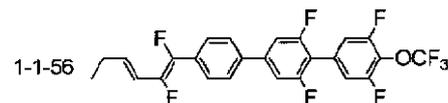
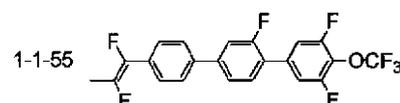
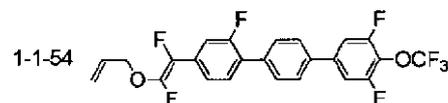
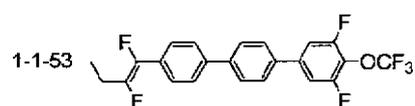
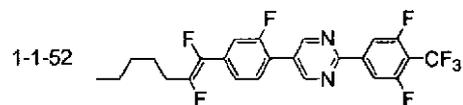
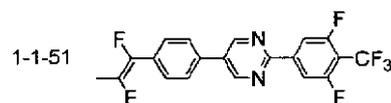
【 0 1 7 0 】

【化 3 8】

No.



No.



10

20

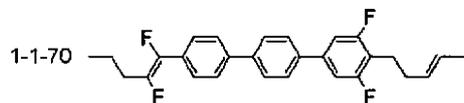
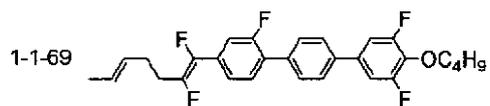
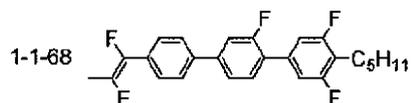
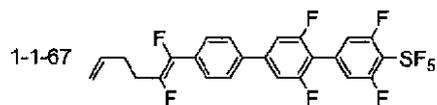
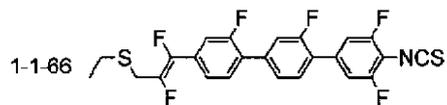
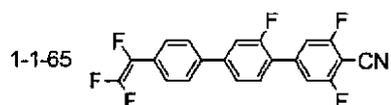
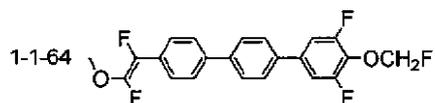
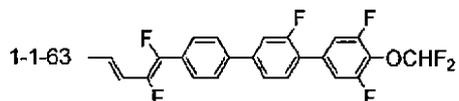
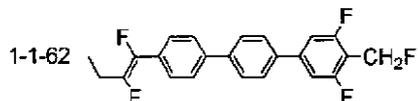
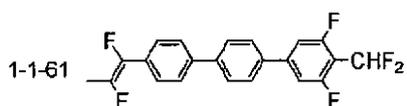
30

40

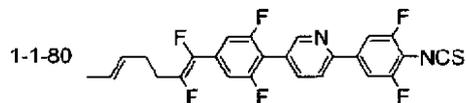
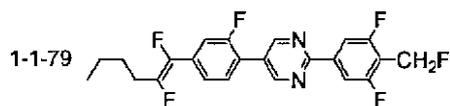
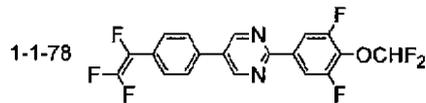
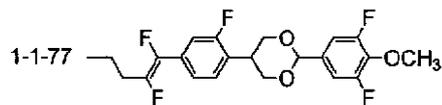
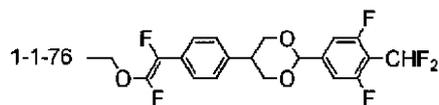
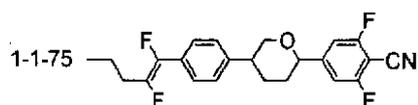
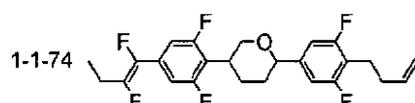
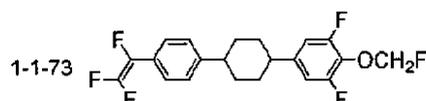
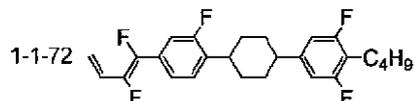
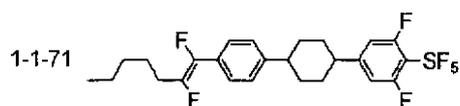
【 0 1 7 1】

【化 3 9】

No.



No.



10

20

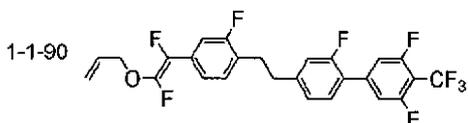
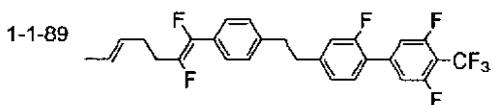
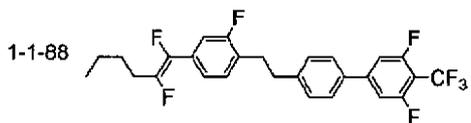
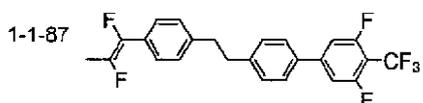
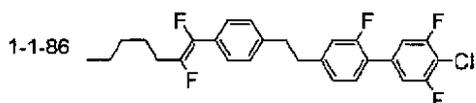
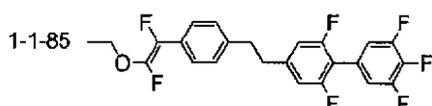
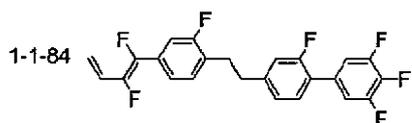
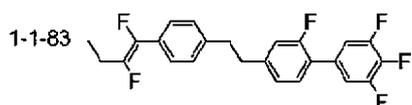
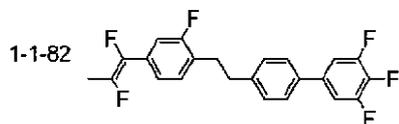
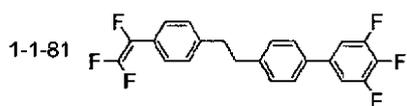
30

40

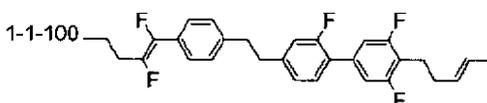
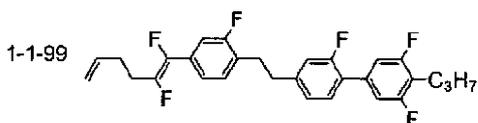
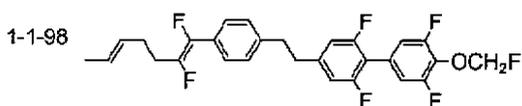
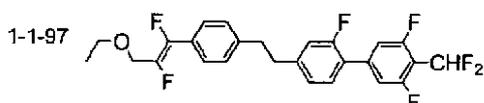
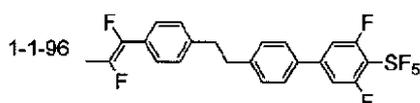
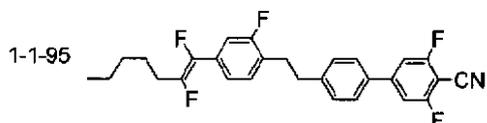
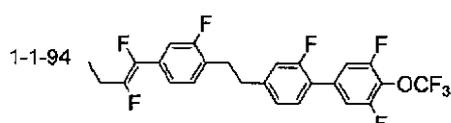
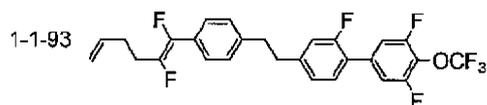
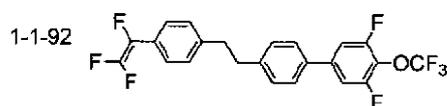
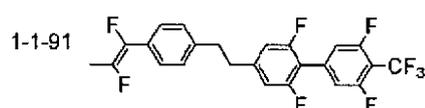
【 0 1 7 2 】

【化 4 0】

No.



No.



10

20

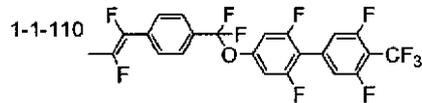
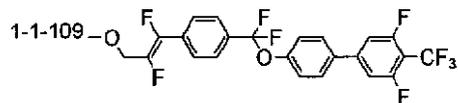
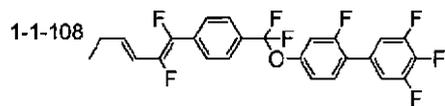
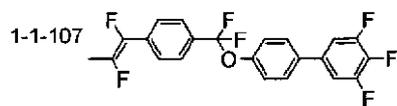
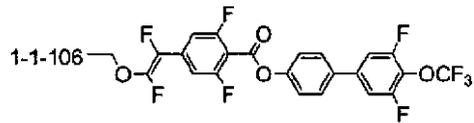
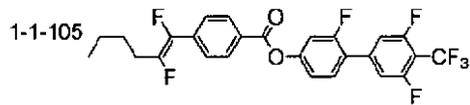
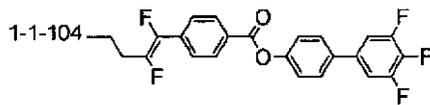
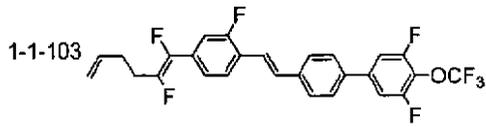
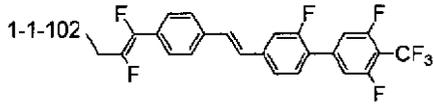
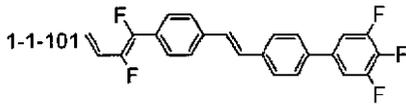
30

40

【 0 1 7 3 】

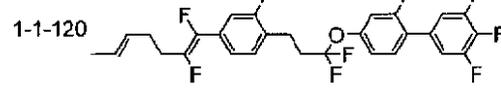
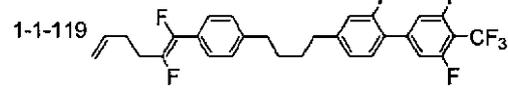
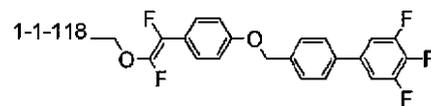
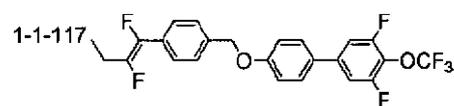
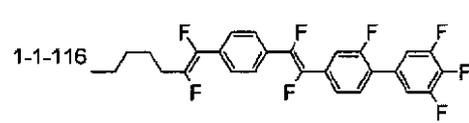
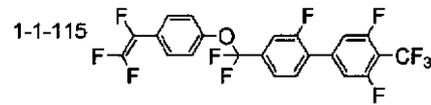
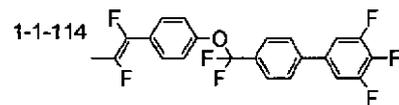
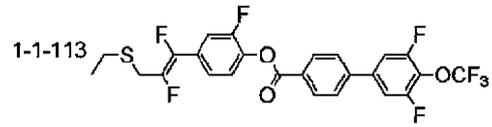
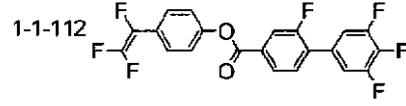
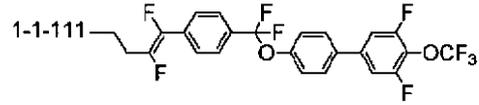
【化 4 1】

No.



【 0 1 7 4 】

No.



10

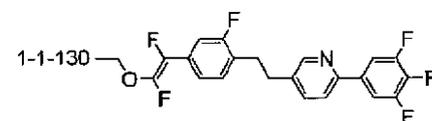
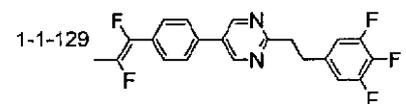
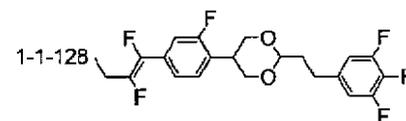
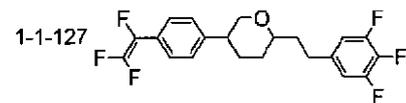
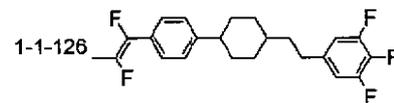
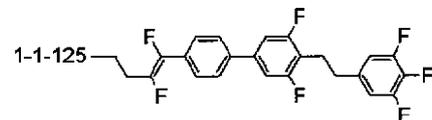
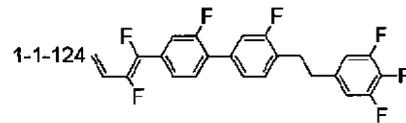
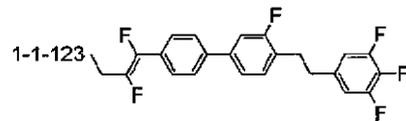
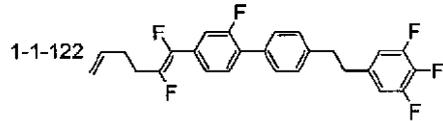
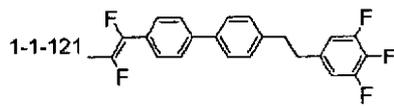
20

30

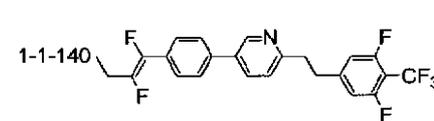
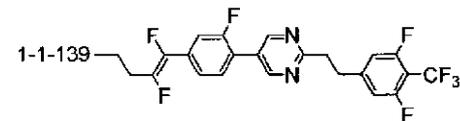
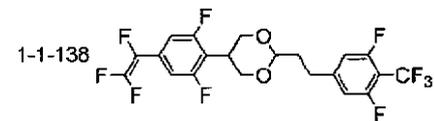
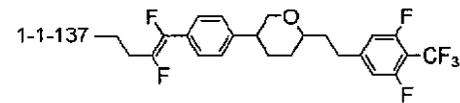
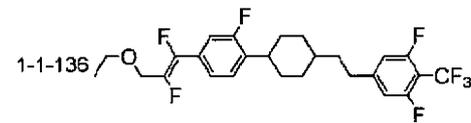
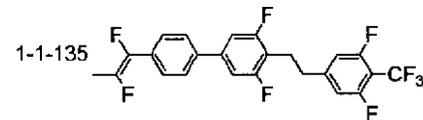
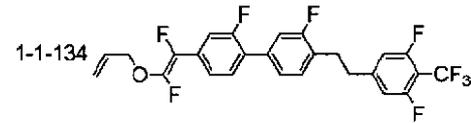
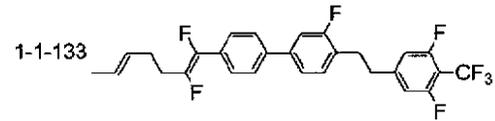
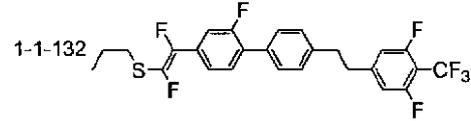
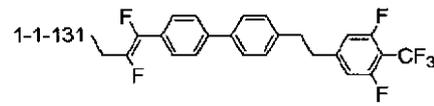
40

【化 4 2】

No.



No.



10

20

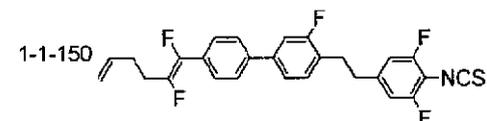
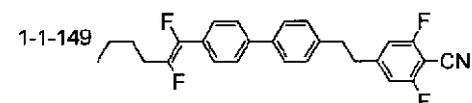
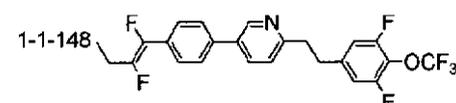
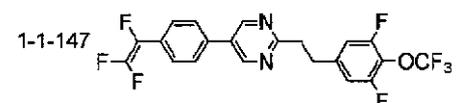
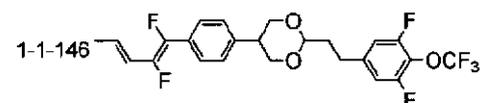
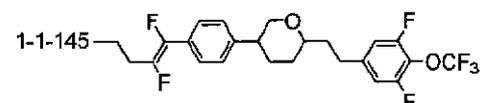
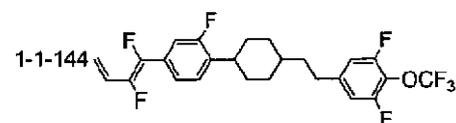
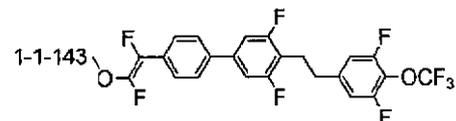
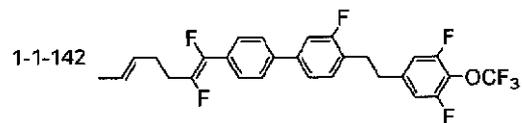
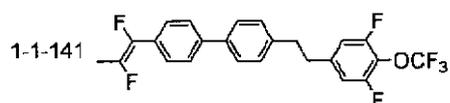
30

40

【 0 1 7 5 】

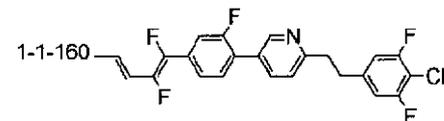
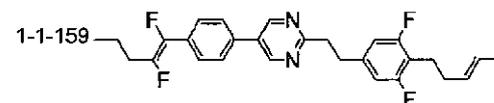
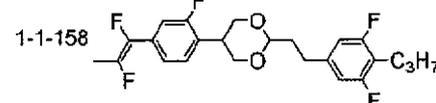
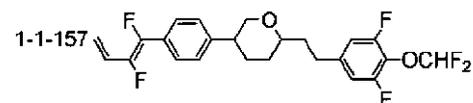
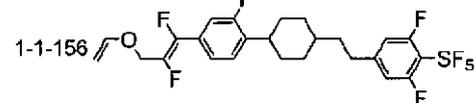
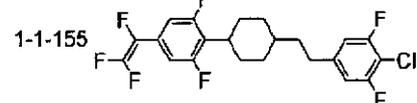
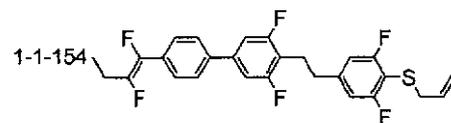
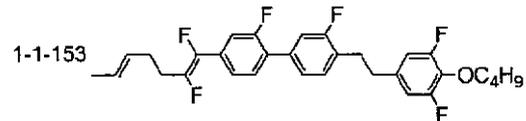
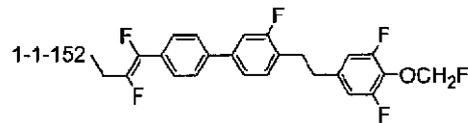
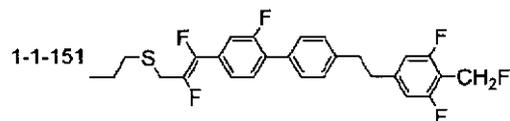
【化 4 3】

No.



【 0 1 7 6 】

No.



10

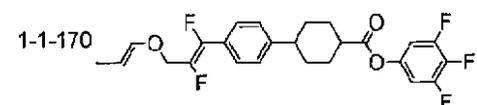
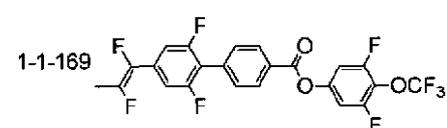
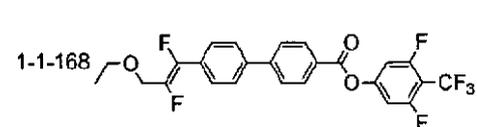
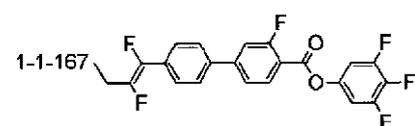
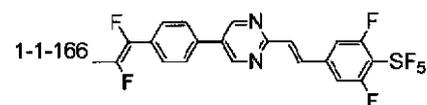
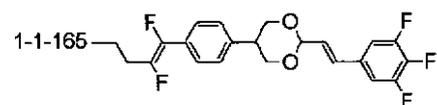
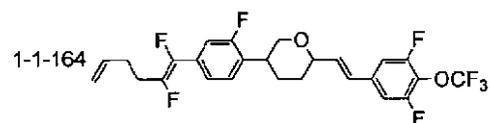
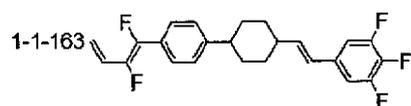
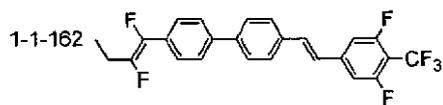
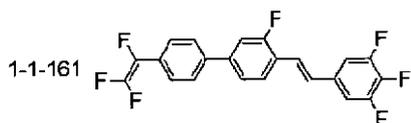
20

30

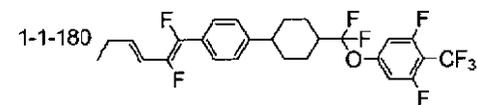
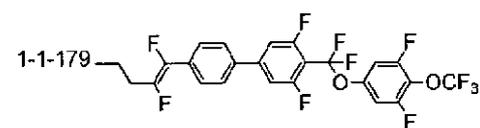
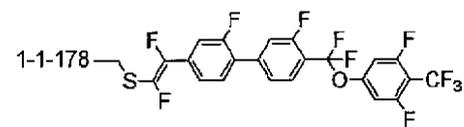
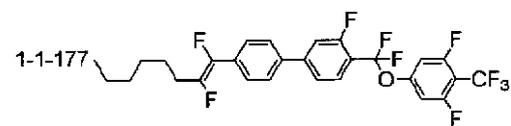
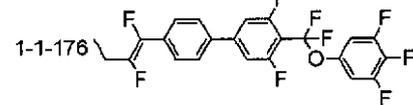
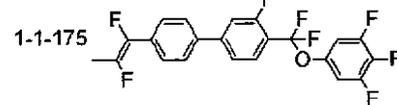
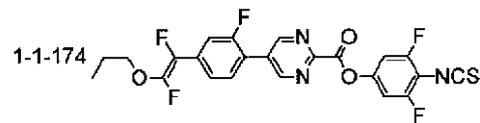
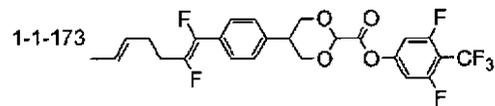
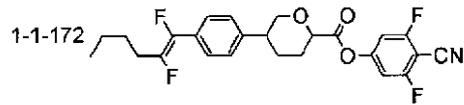
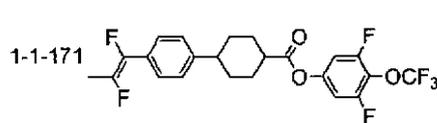
40

【化 4 4】

No.



No.



10

20

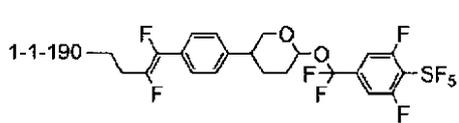
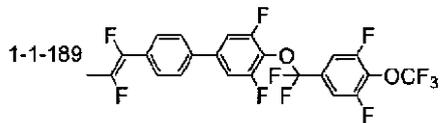
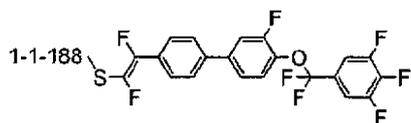
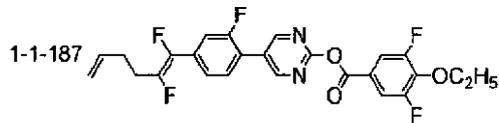
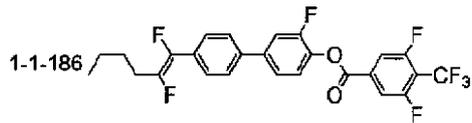
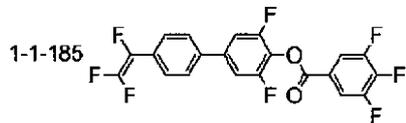
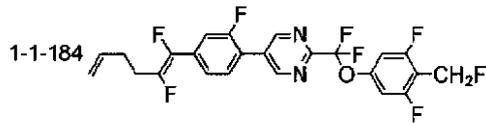
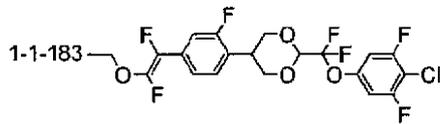
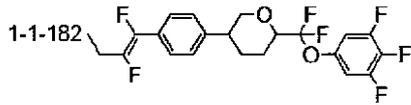
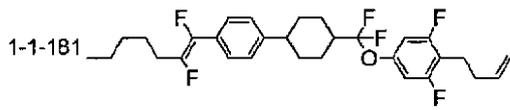
30

40

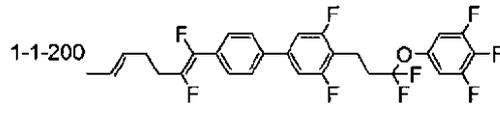
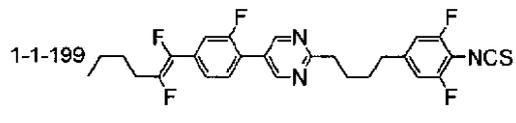
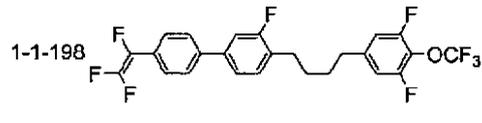
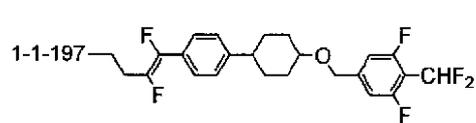
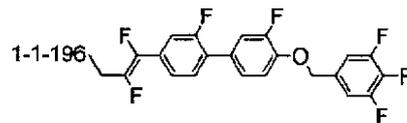
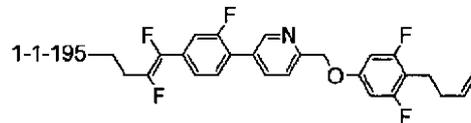
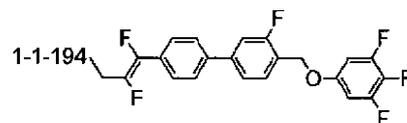
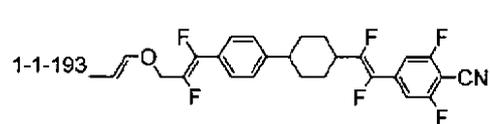
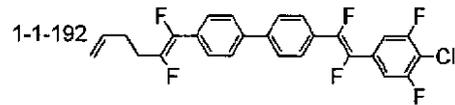
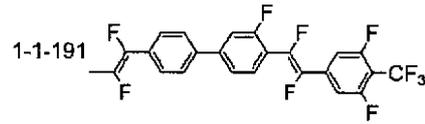
【 0 1 7 7 】

【化 4 5】

No.



No.



【 0 1 7 8 】

10

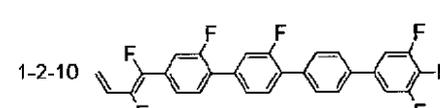
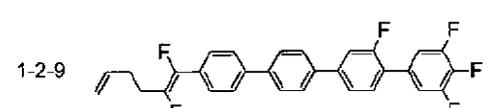
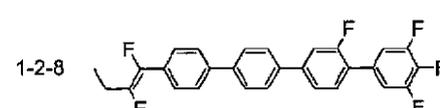
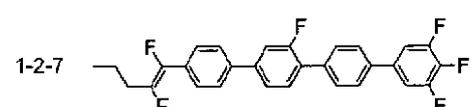
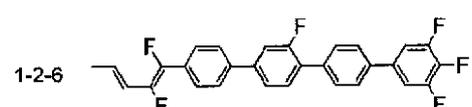
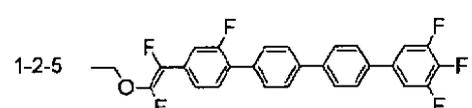
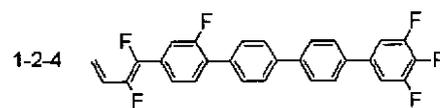
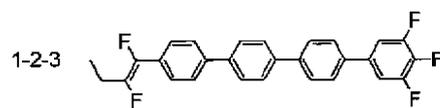
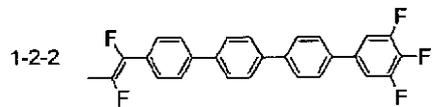
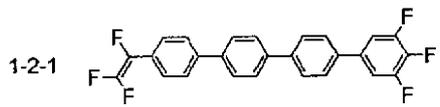
20

30

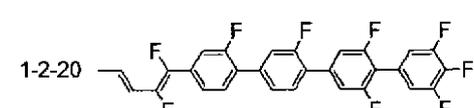
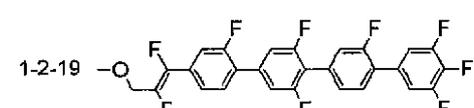
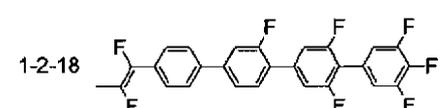
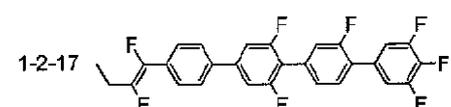
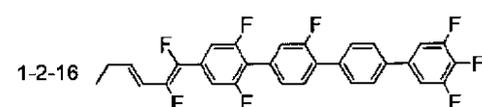
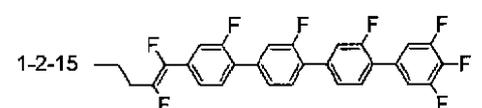
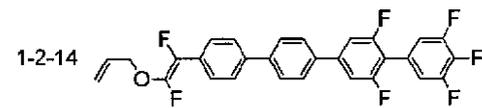
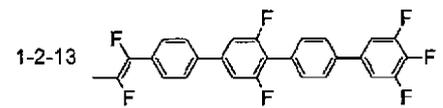
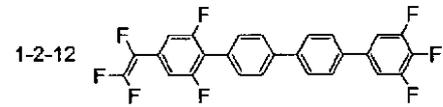
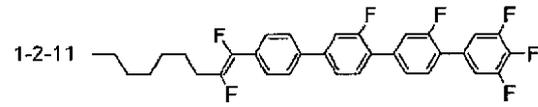
40

【化 4 6】

No.



No.



10

20

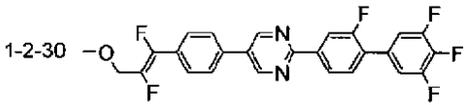
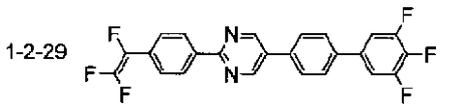
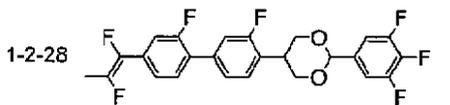
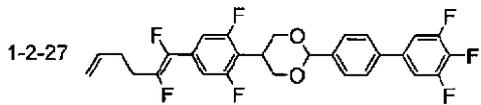
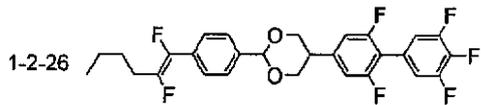
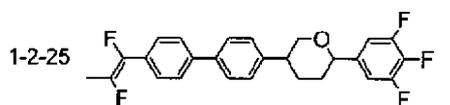
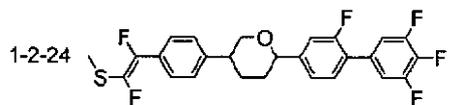
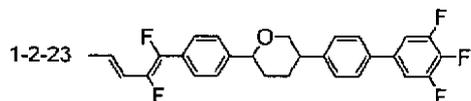
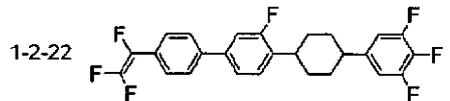
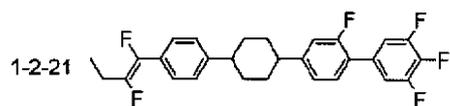
30

40

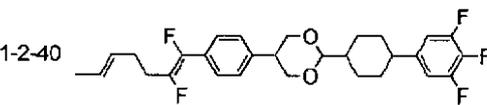
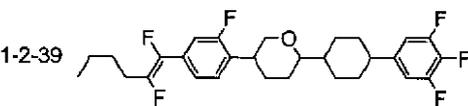
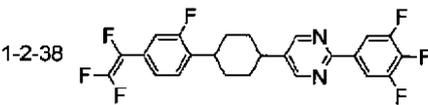
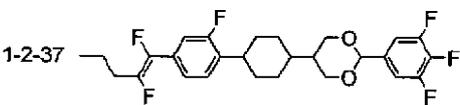
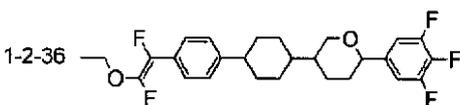
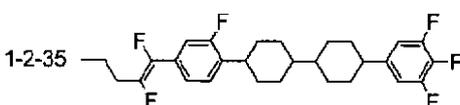
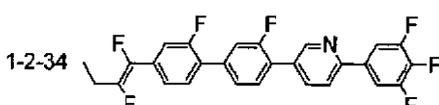
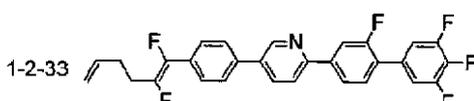
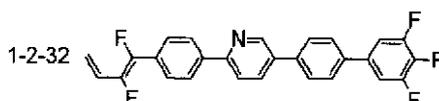
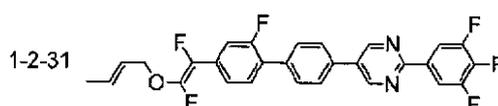
【 0 1 7 9 】

【化 4 7】

No.



No.



10

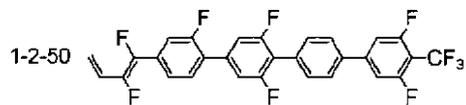
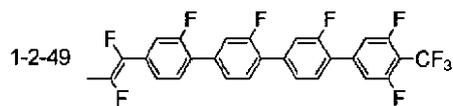
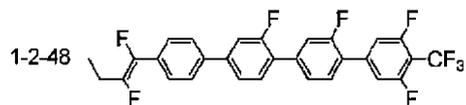
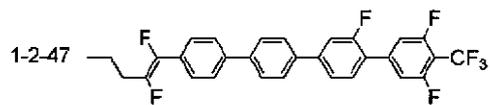
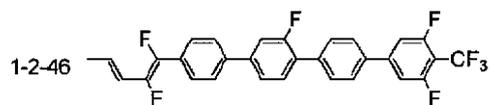
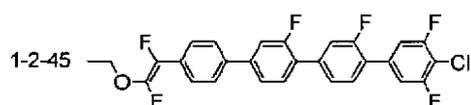
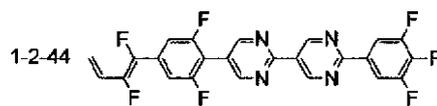
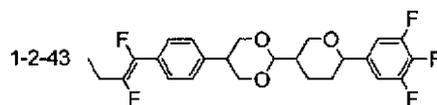
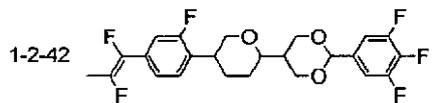
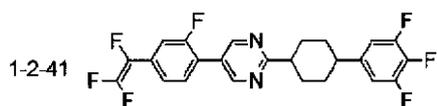
20

30

40

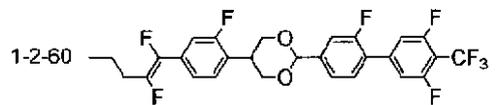
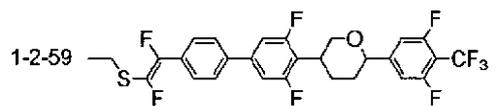
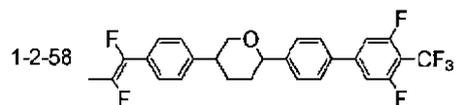
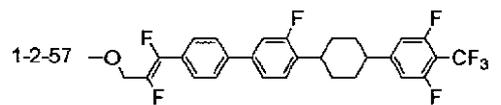
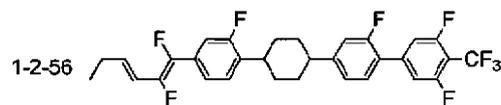
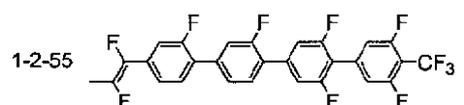
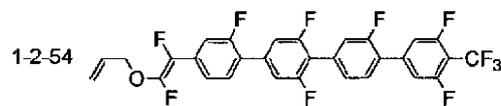
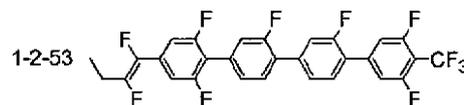
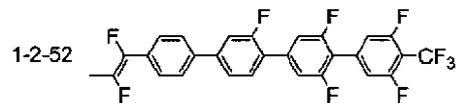
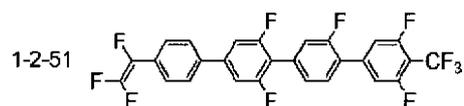
【化 4 8】

No.



【 0 1 8 1】

No.



10

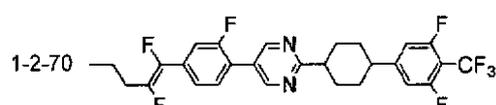
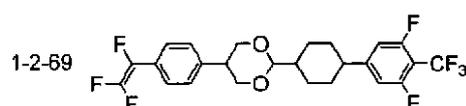
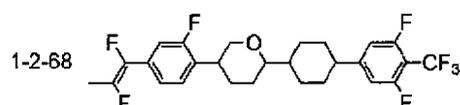
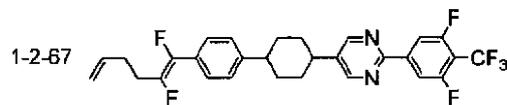
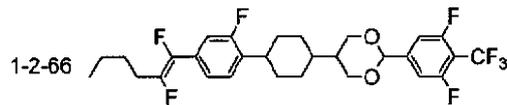
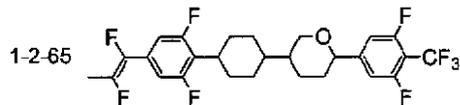
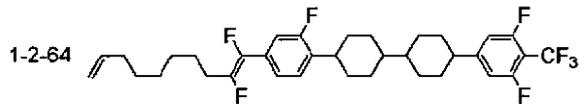
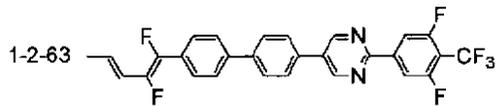
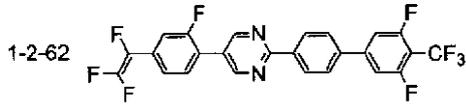
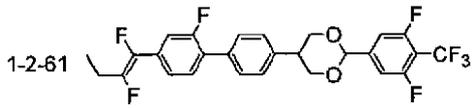
20

30

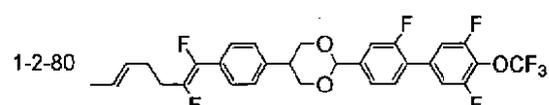
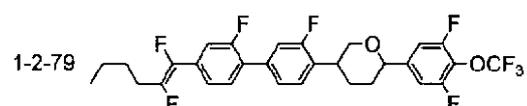
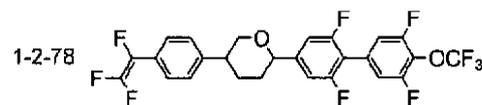
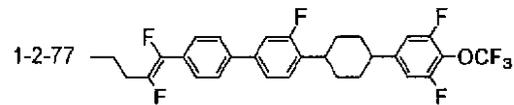
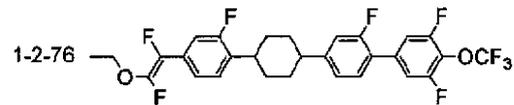
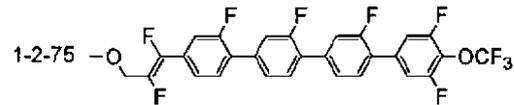
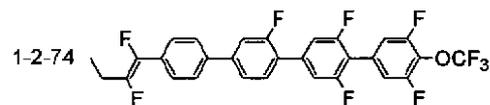
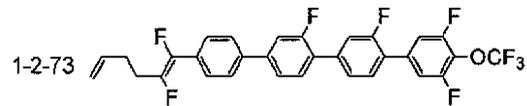
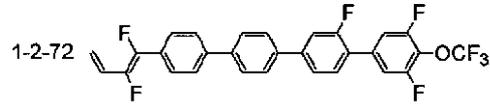
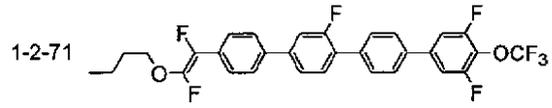
40

【化 4 9】

No.



No.



10

20

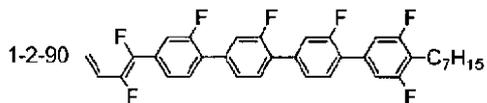
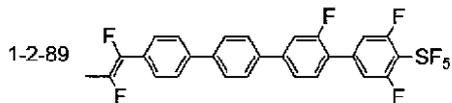
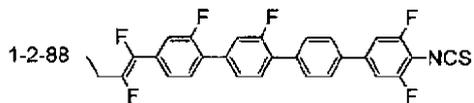
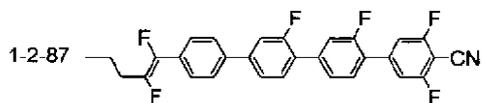
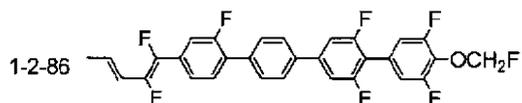
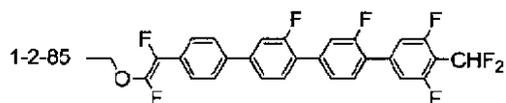
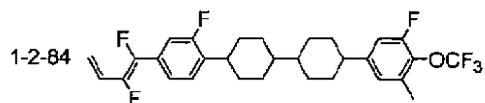
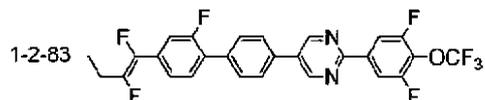
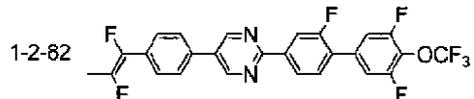
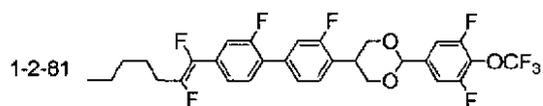
30

40

【 0 1 8 2 】

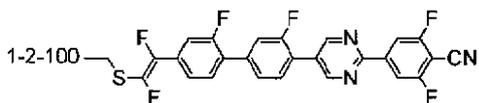
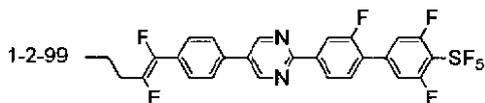
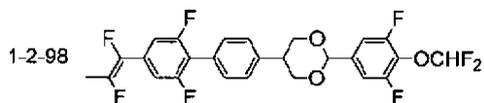
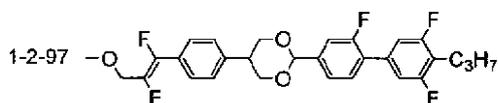
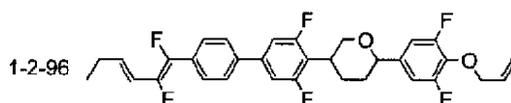
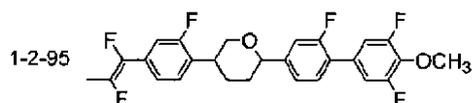
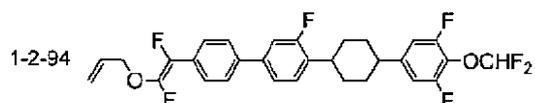
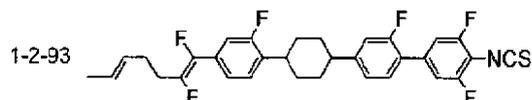
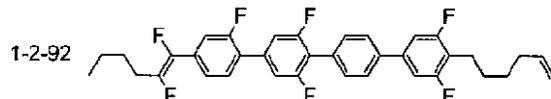
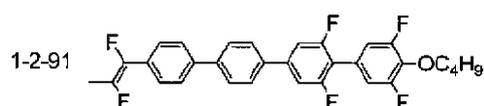
【化 5 0】

No.



【 0 1 8 3】

No.



10

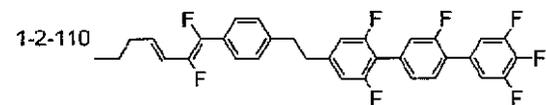
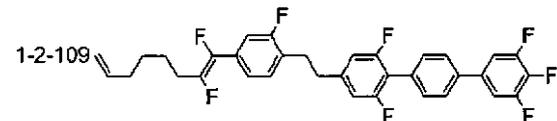
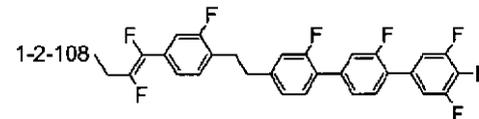
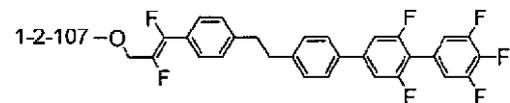
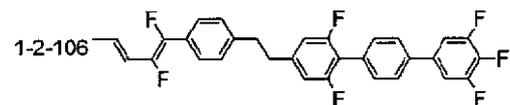
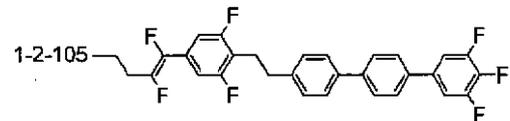
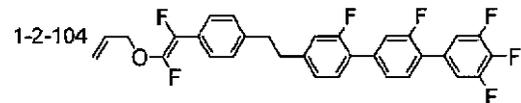
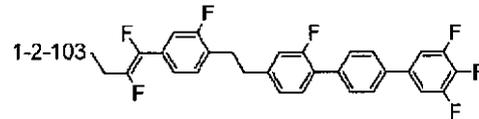
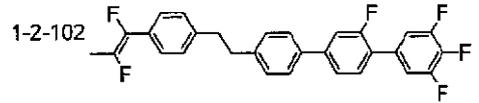
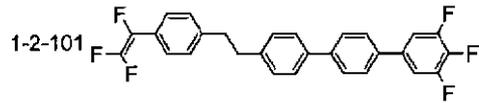
20

30

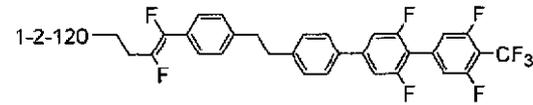
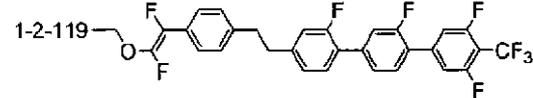
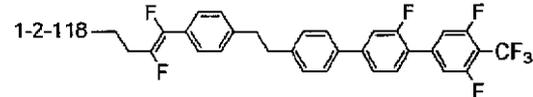
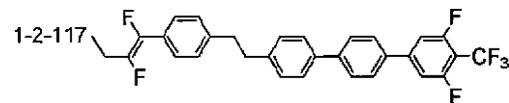
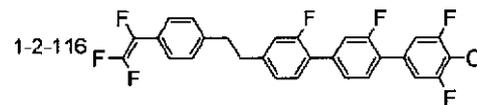
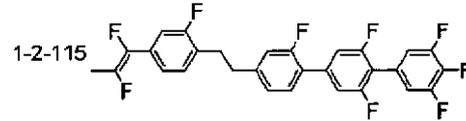
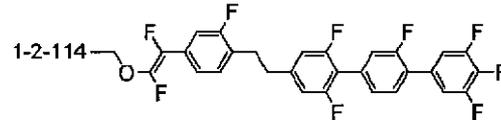
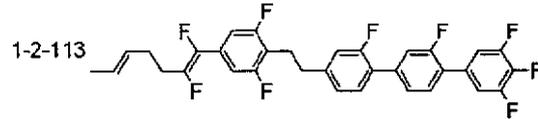
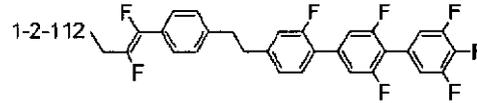
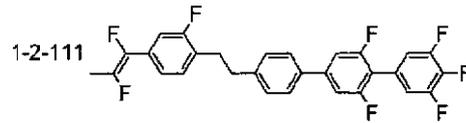
40

【化 5 1】

No.



No.



10

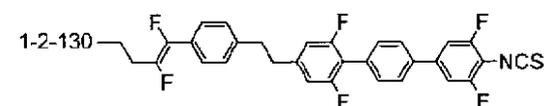
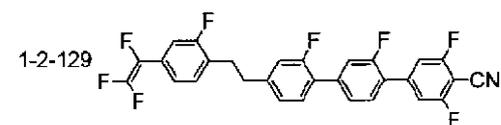
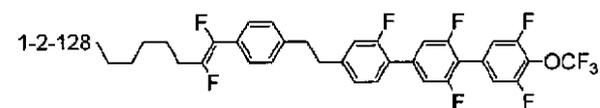
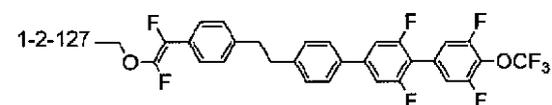
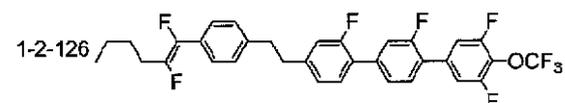
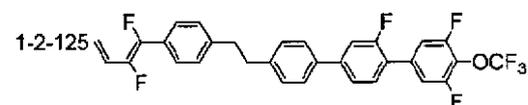
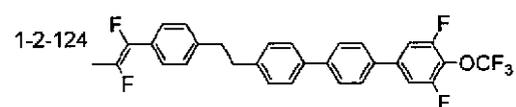
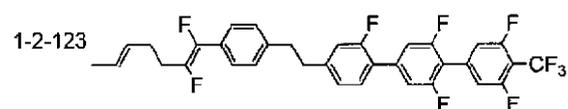
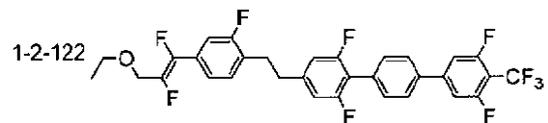
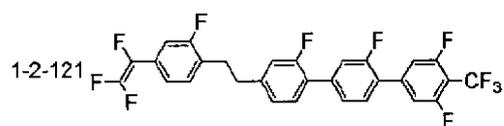
20

30

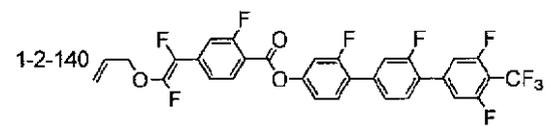
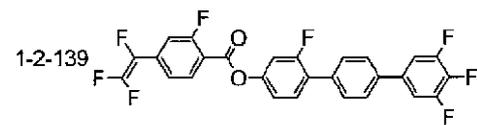
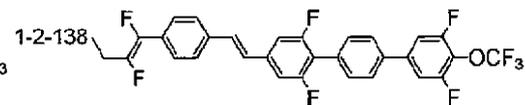
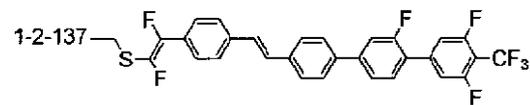
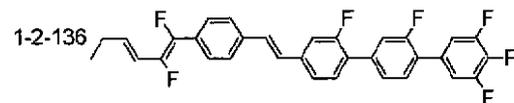
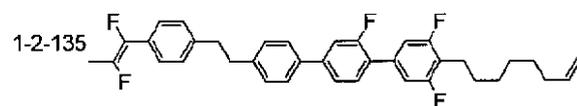
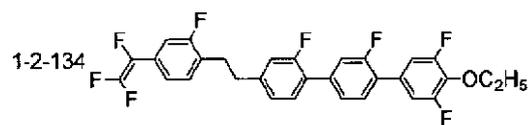
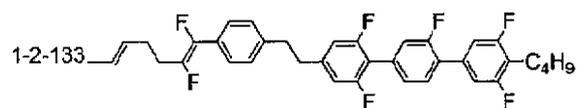
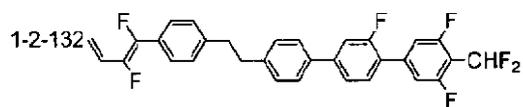
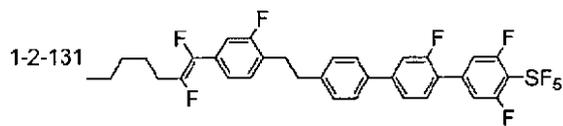
40

【化 5 2】

No.



No.



10

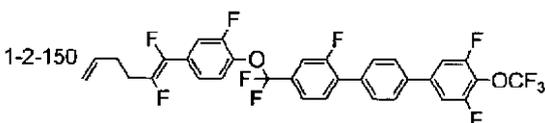
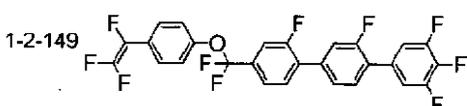
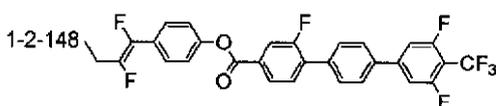
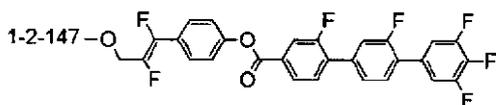
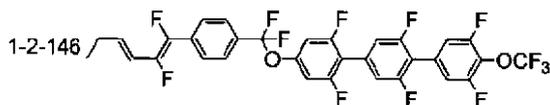
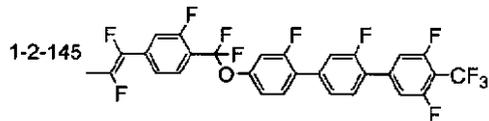
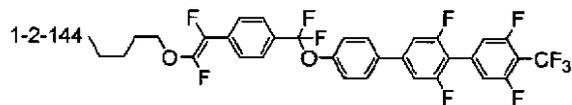
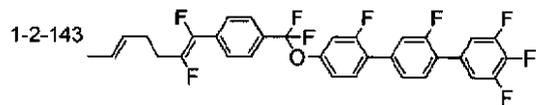
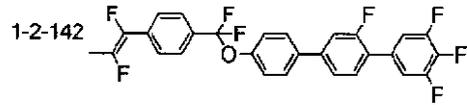
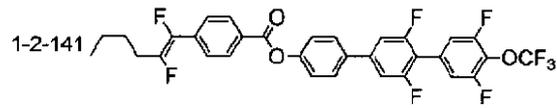
20

30

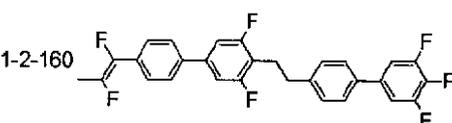
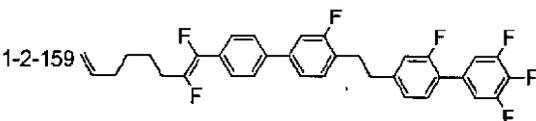
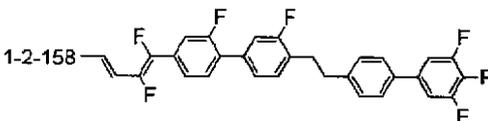
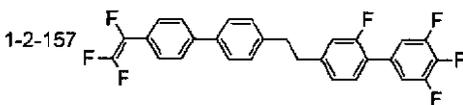
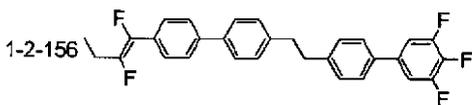
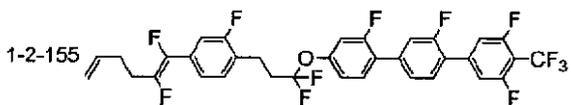
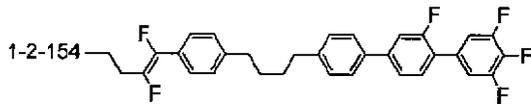
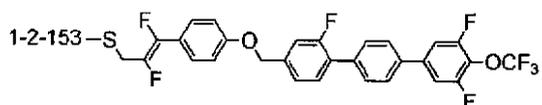
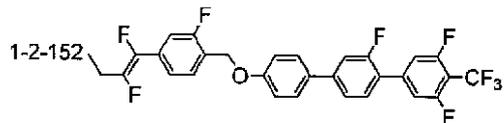
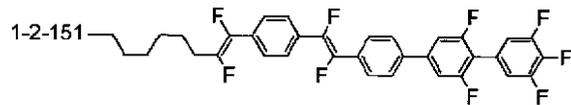
40

【化 5 3】

No.



No.



【 0 1 8 6 】

10

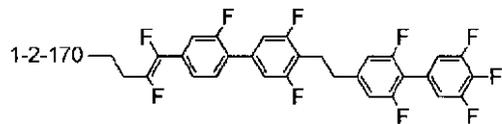
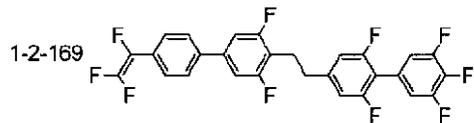
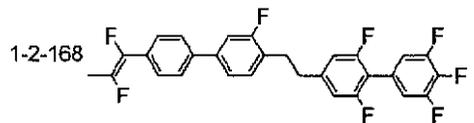
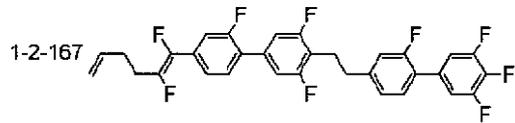
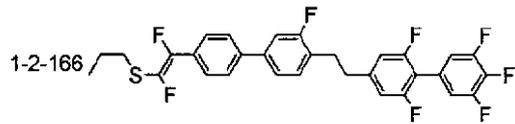
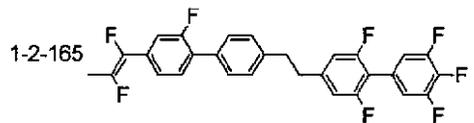
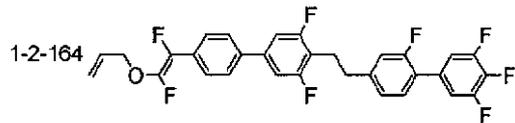
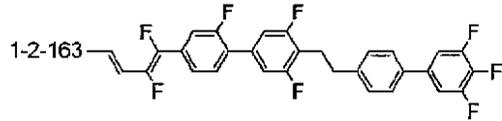
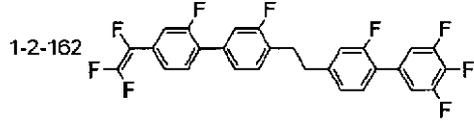
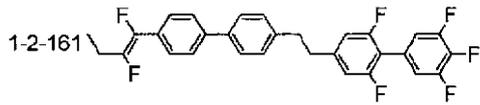
20

30

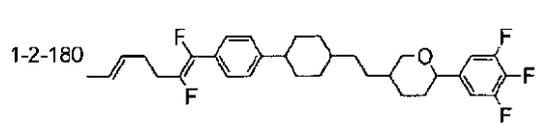
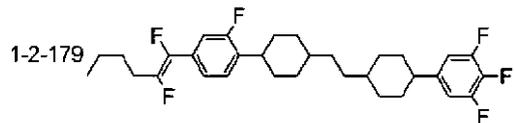
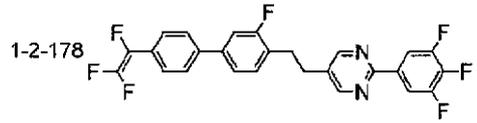
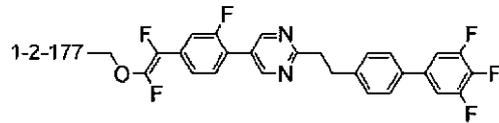
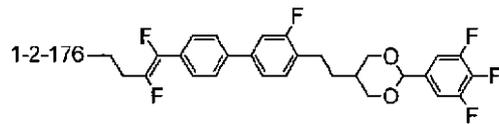
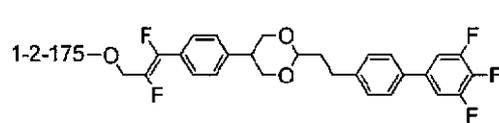
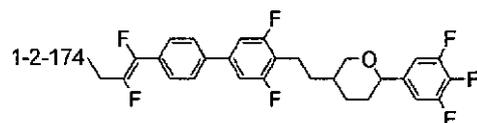
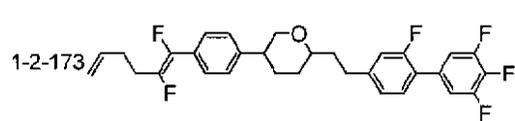
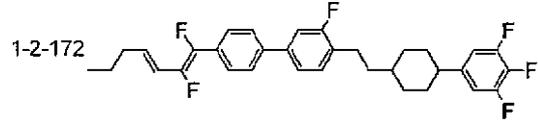
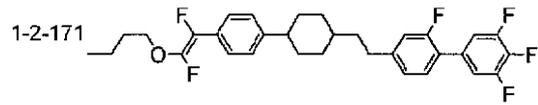
40

【化 5 4】

No.



No.



10

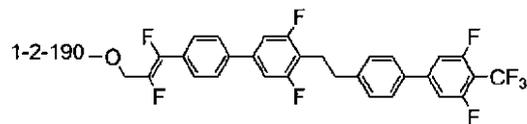
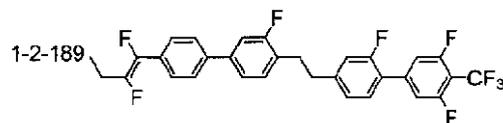
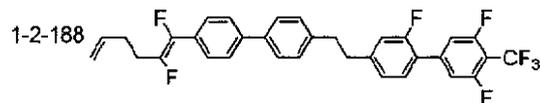
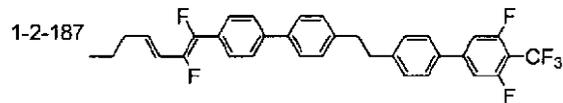
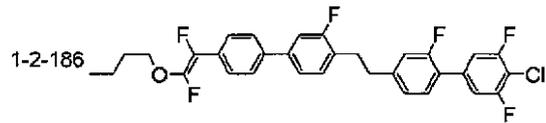
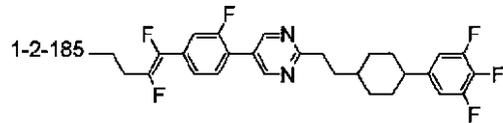
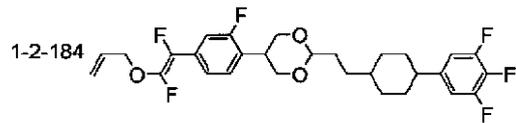
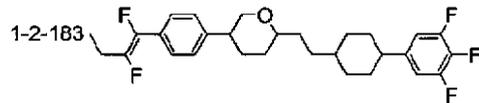
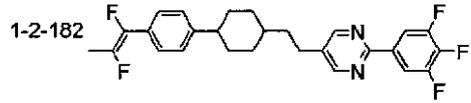
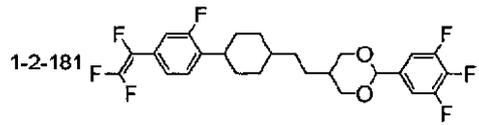
20

30

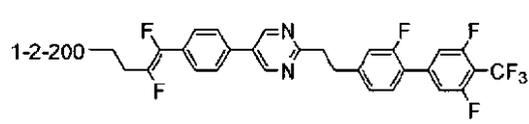
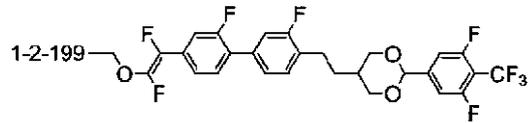
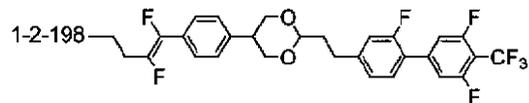
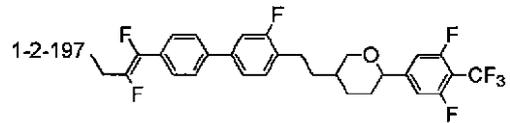
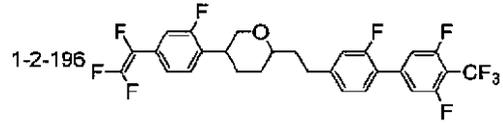
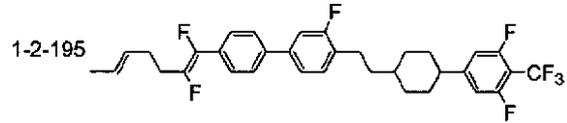
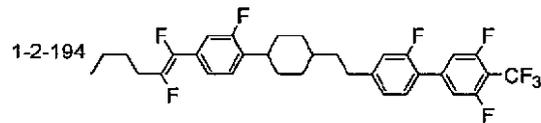
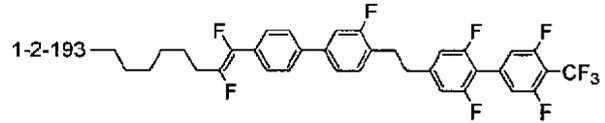
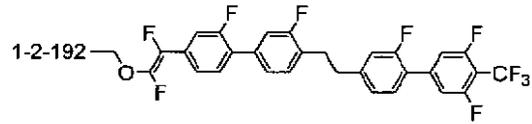
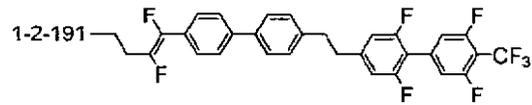
40

【化 5 5】

No.



No.



【 0 1 8 8 】

10

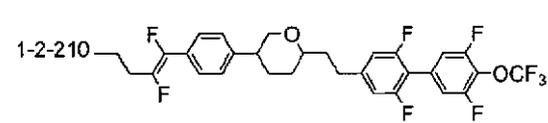
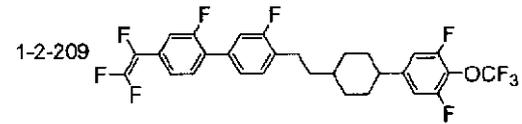
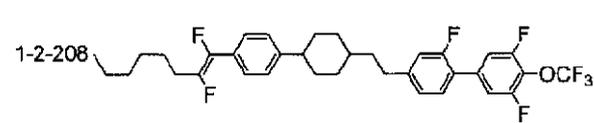
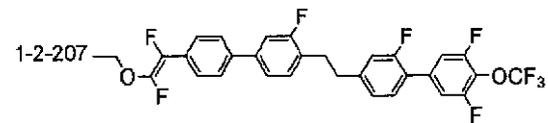
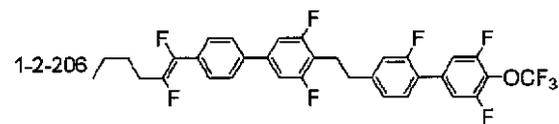
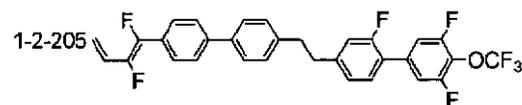
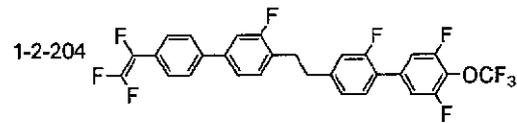
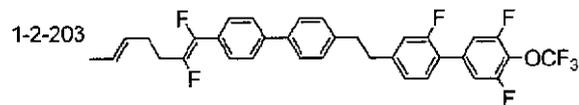
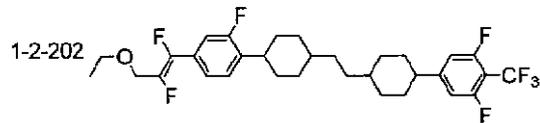
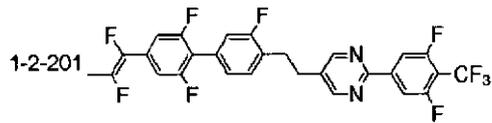
20

30

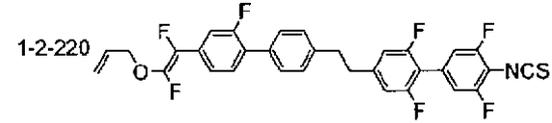
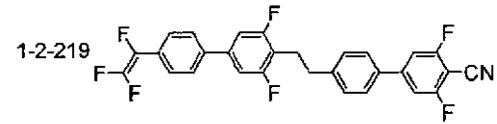
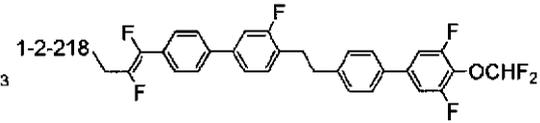
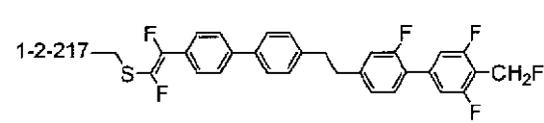
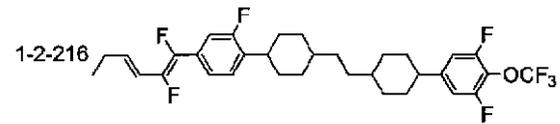
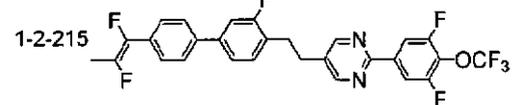
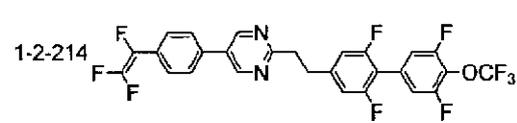
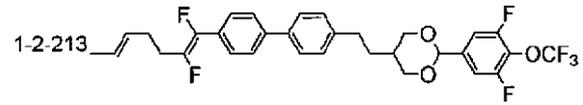
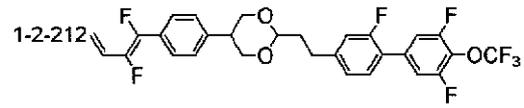
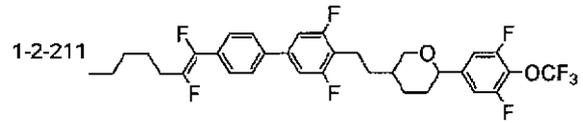
40

【化 5 6】

No.



No.



10

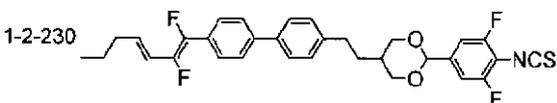
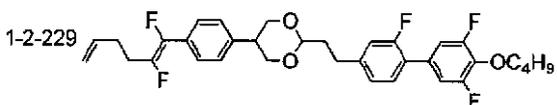
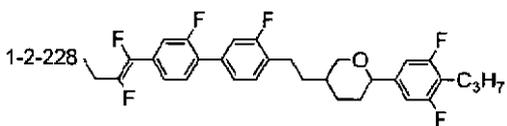
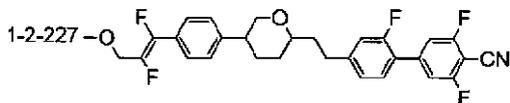
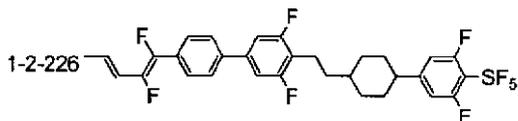
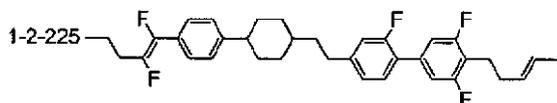
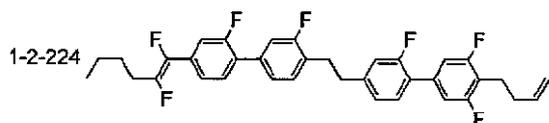
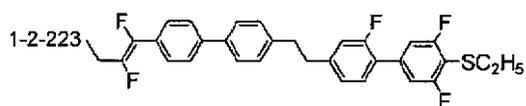
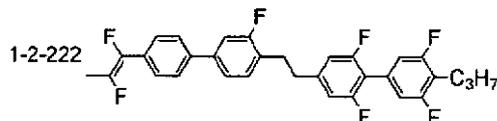
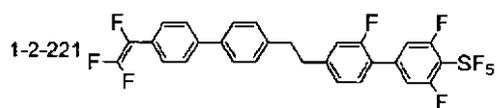
20

30

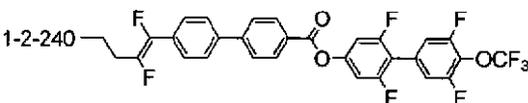
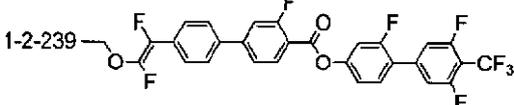
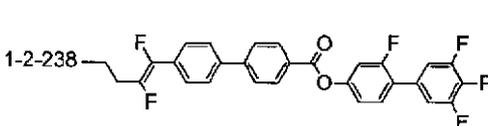
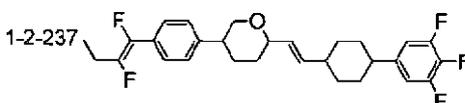
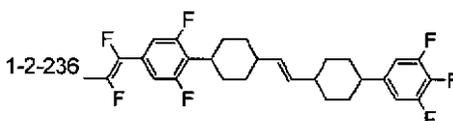
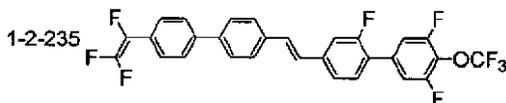
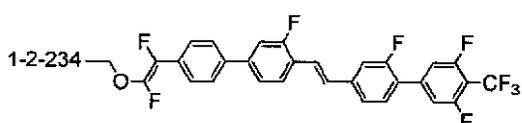
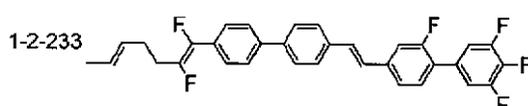
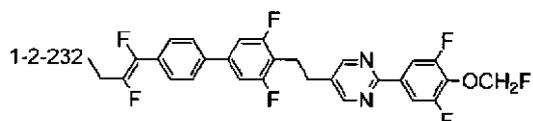
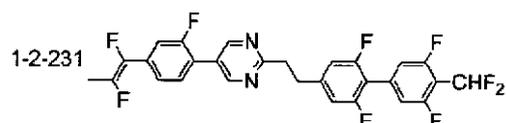
40

【化 5 7】

No.



No.



10

20

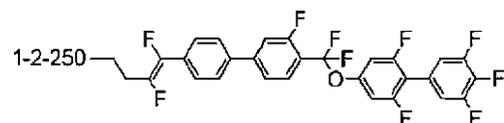
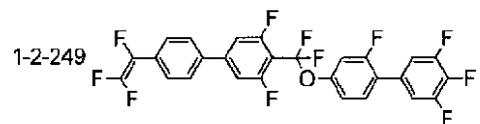
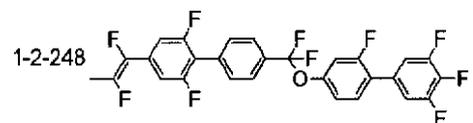
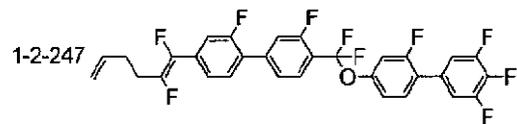
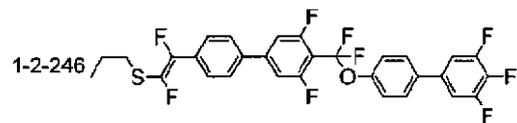
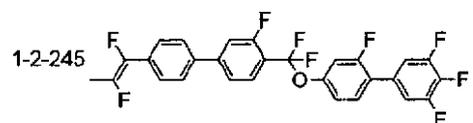
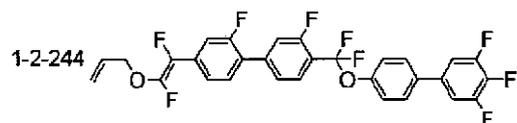
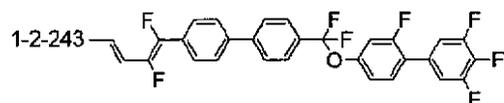
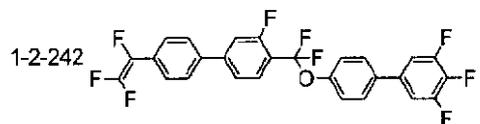
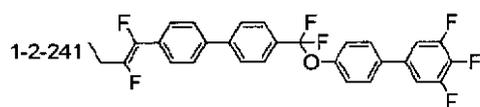
30

40

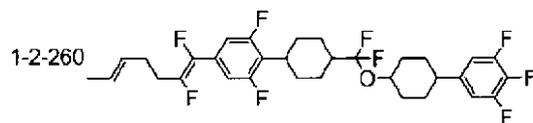
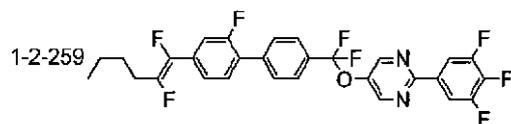
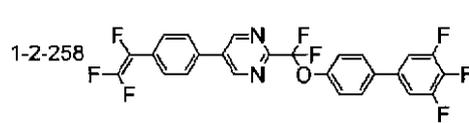
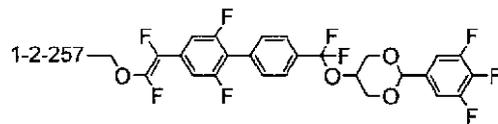
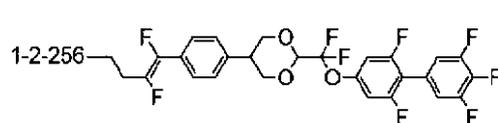
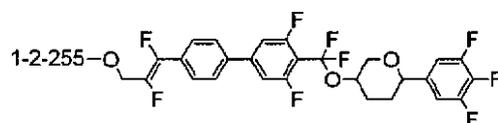
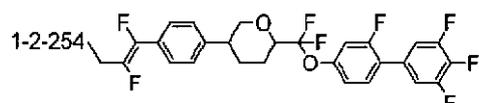
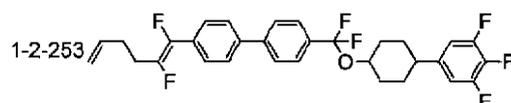
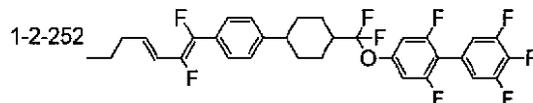
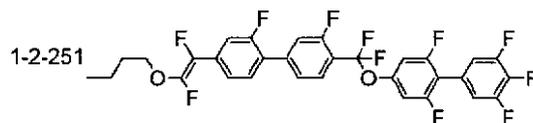
【 0 1 9 0 】

【化 5 8】

No.



No.



10

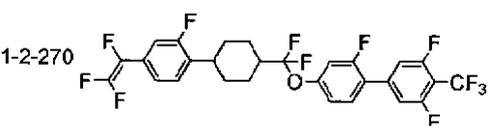
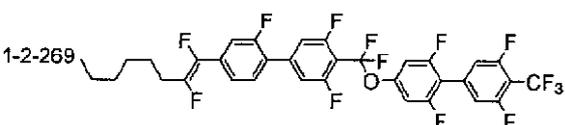
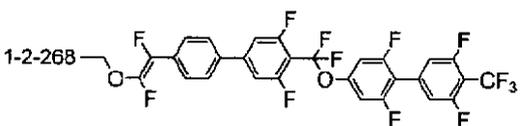
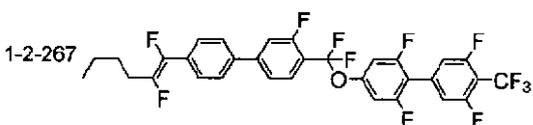
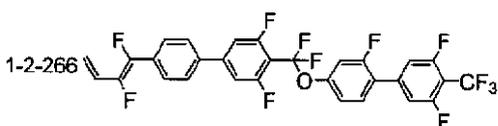
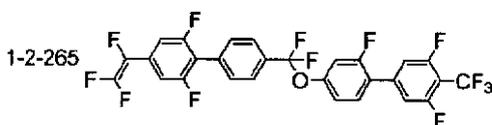
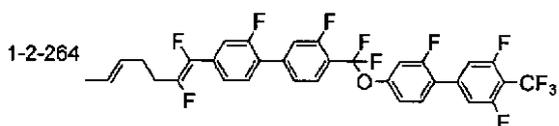
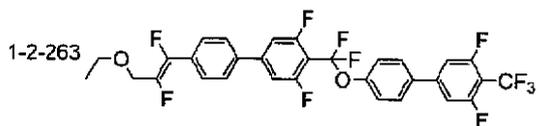
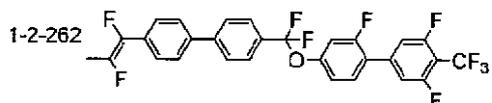
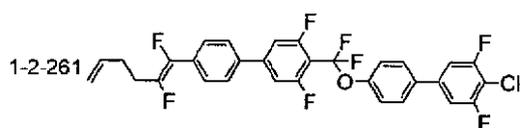
20

30

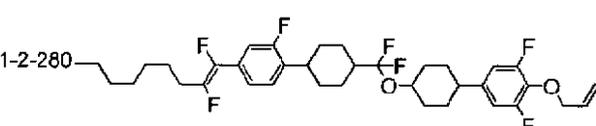
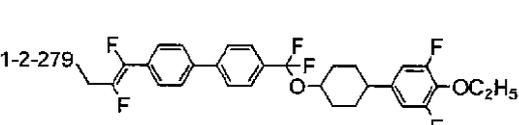
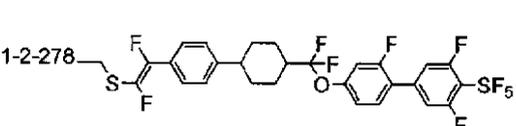
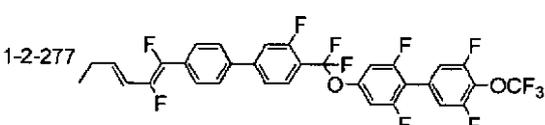
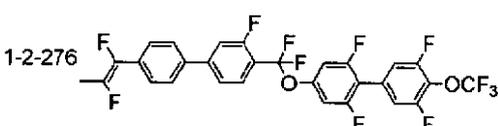
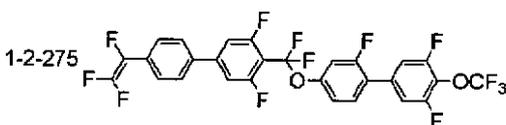
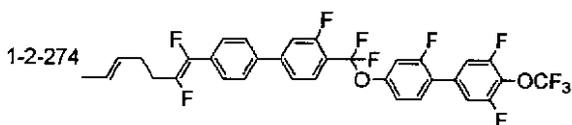
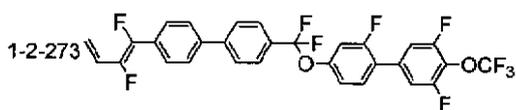
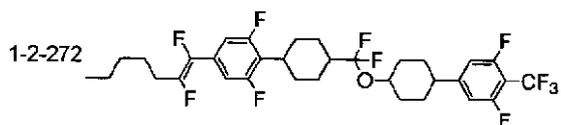
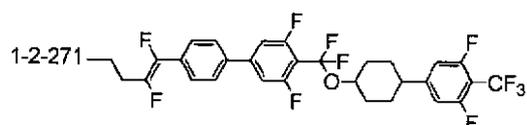
40

【化 5 9】

No.



No.



10

20

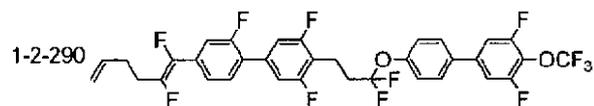
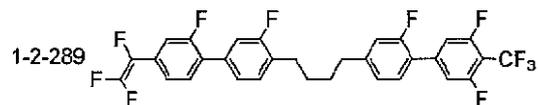
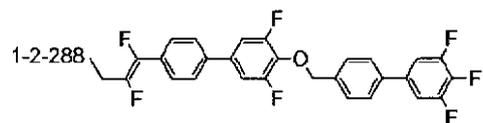
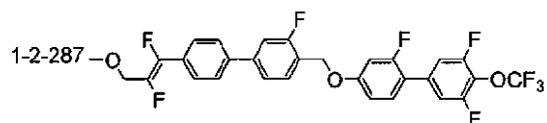
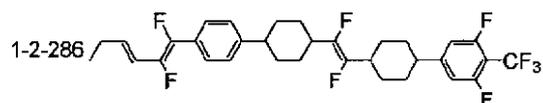
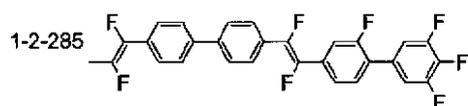
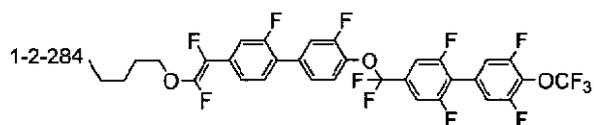
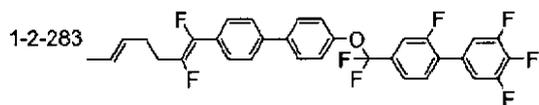
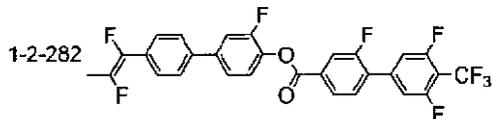
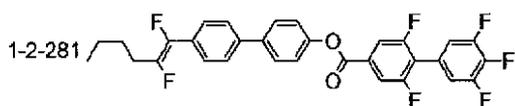
30

40

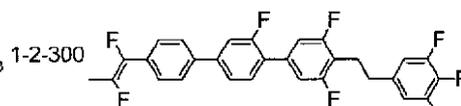
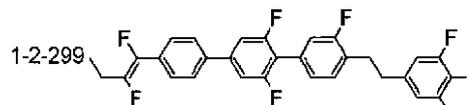
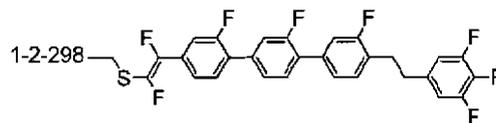
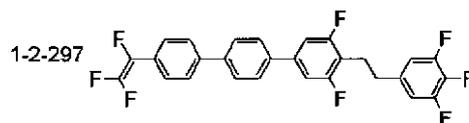
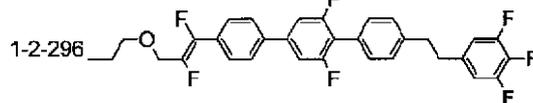
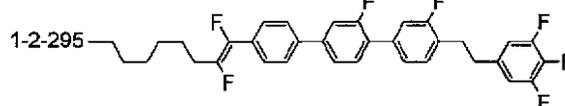
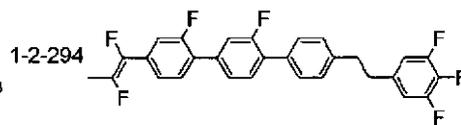
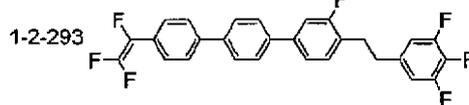
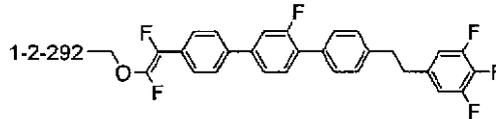
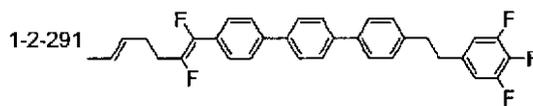
【 0 1 9 2 】

【化 6 0】

No.



No.



10

20

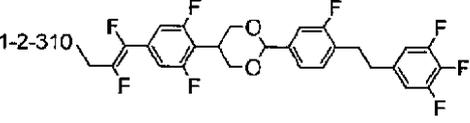
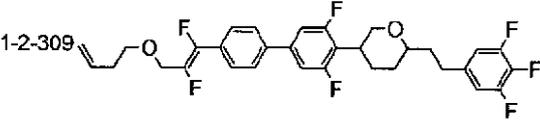
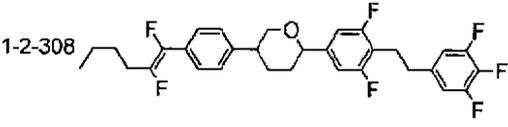
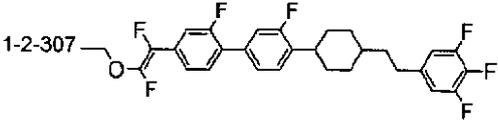
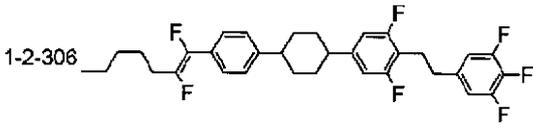
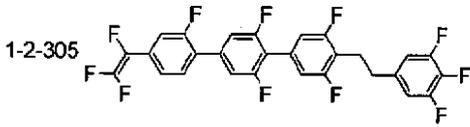
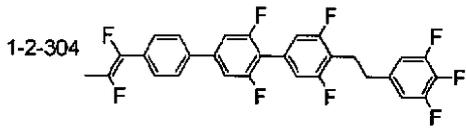
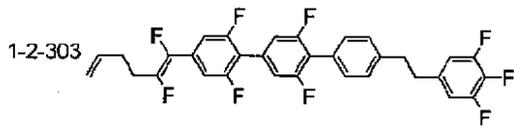
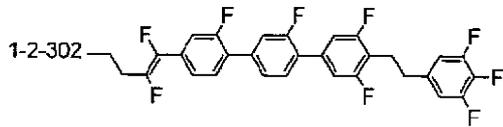
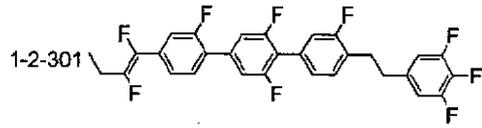
30

40

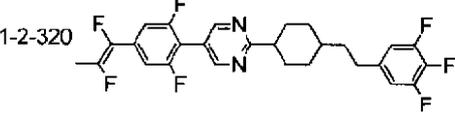
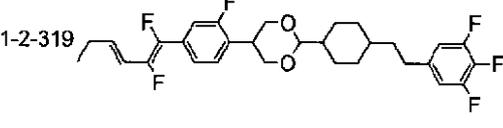
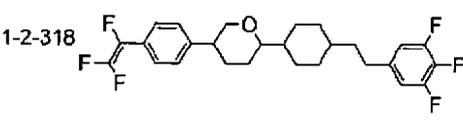
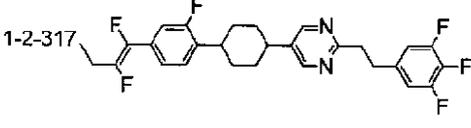
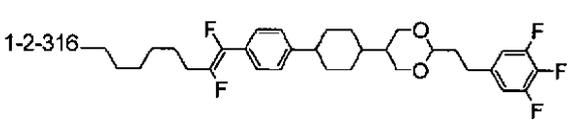
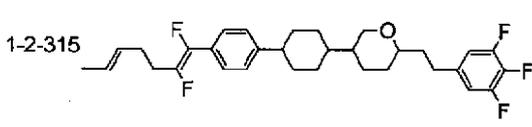
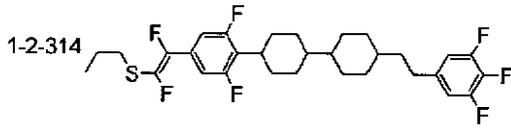
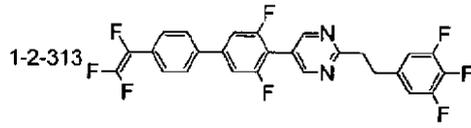
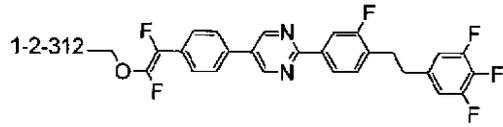
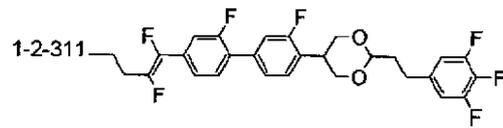
【 0 1 9 3】

【化 6 1】

No.



No.



10

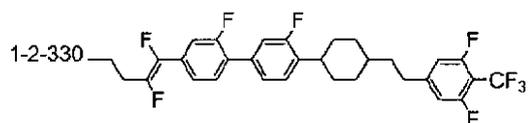
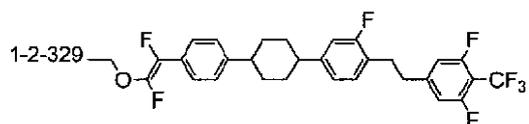
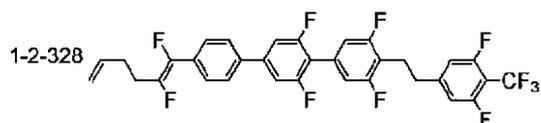
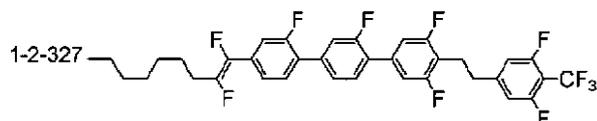
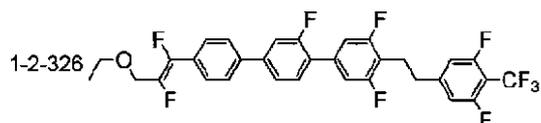
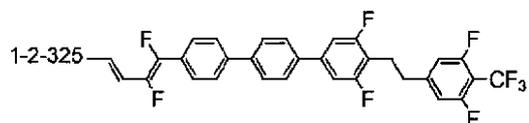
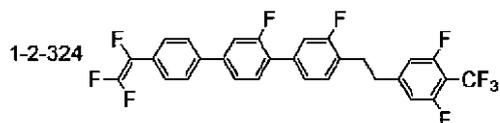
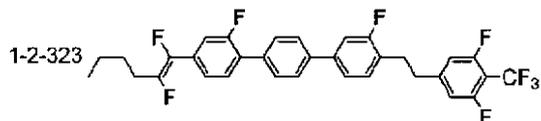
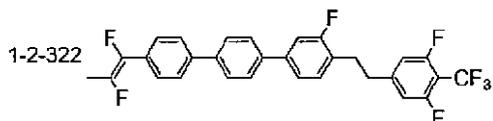
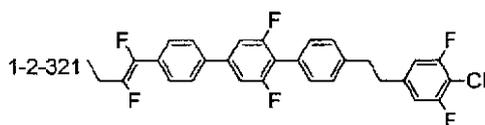
20

30

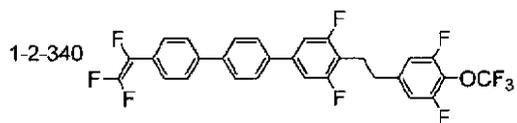
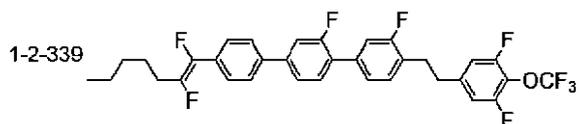
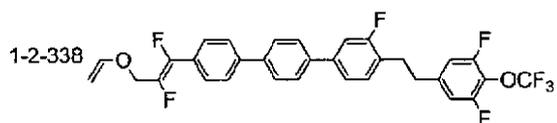
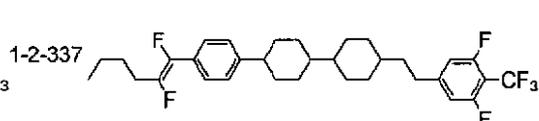
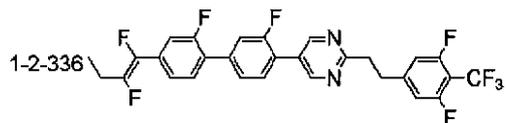
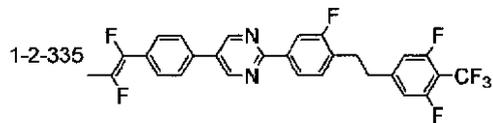
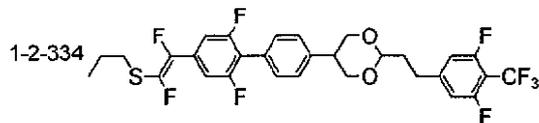
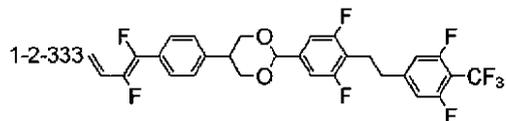
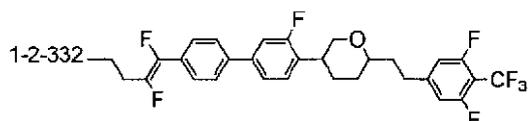
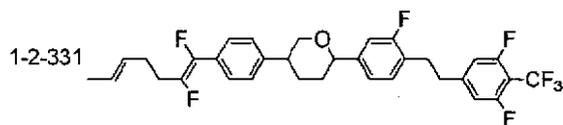
40

【化 6 2】

No.



No.



10

20

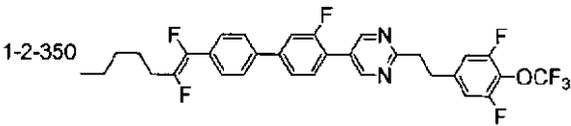
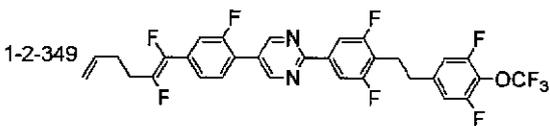
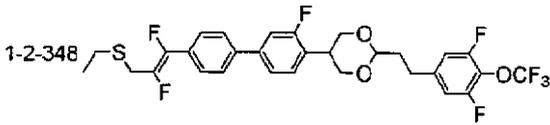
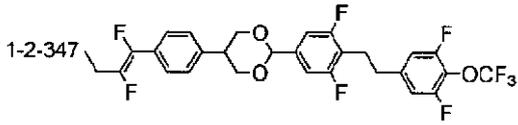
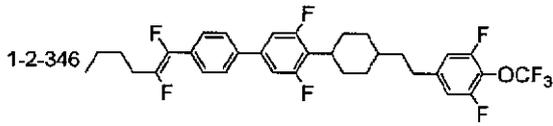
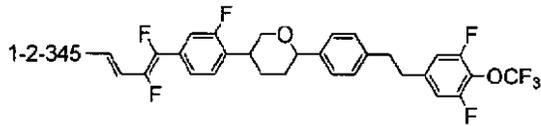
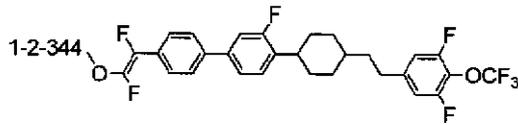
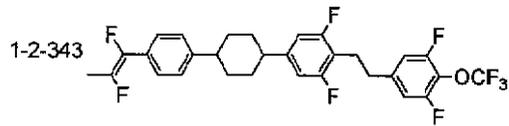
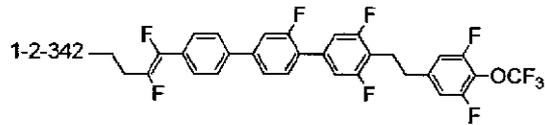
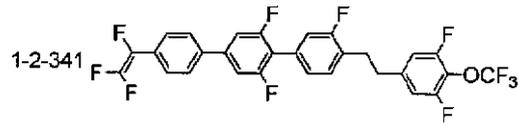
30

40

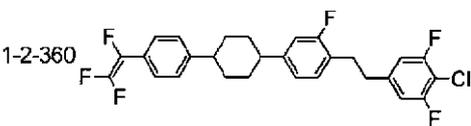
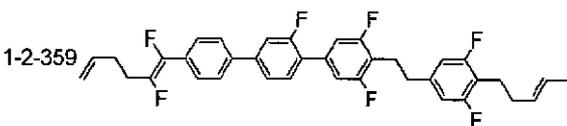
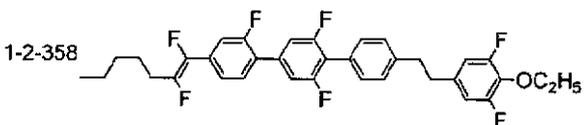
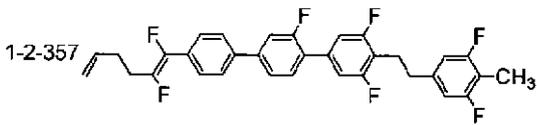
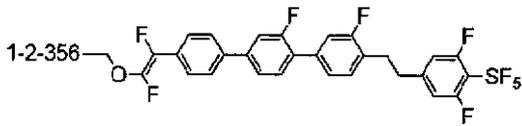
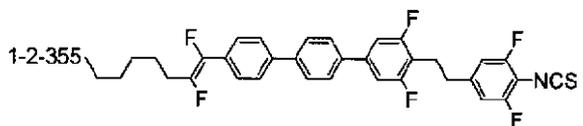
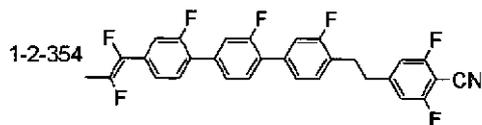
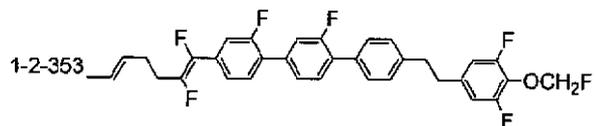
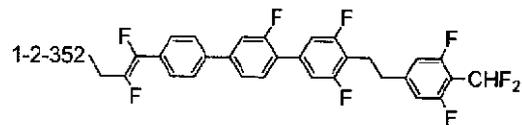
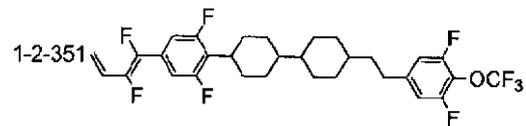
【 0 1 9 5 】

【化 6 3】

No.



No.



【 0 1 9 6 】

10

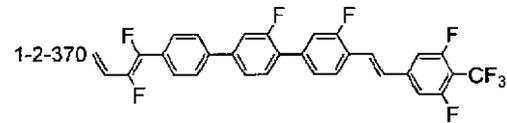
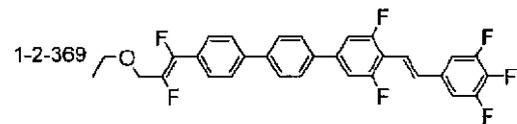
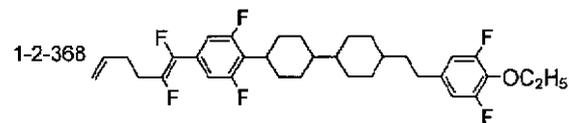
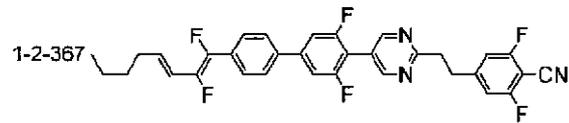
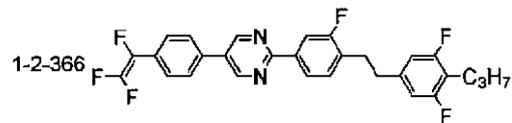
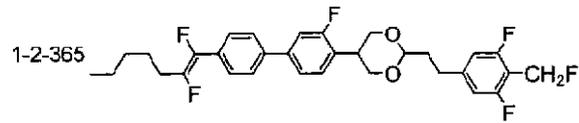
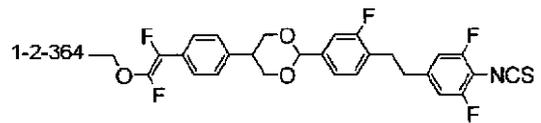
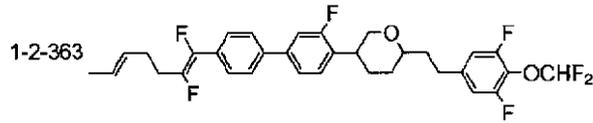
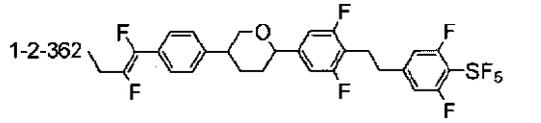
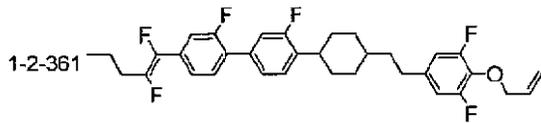
20

30

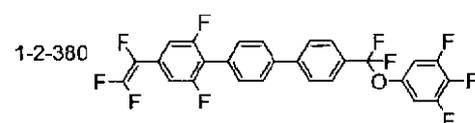
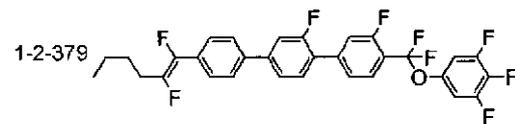
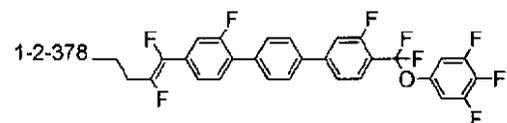
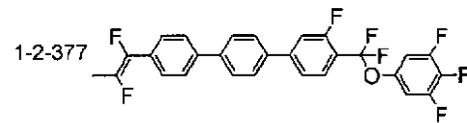
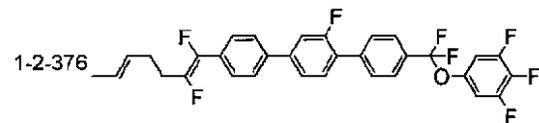
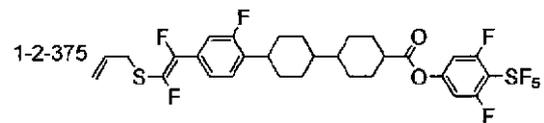
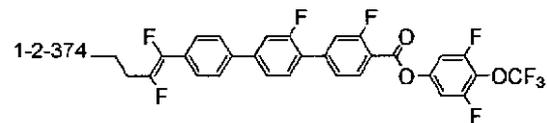
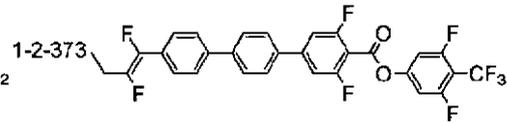
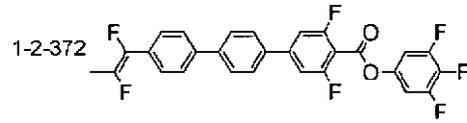
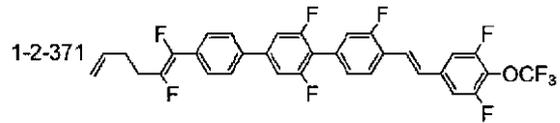
40

【化 6 4】

No.



No.



10

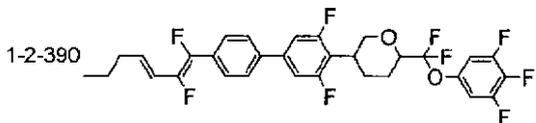
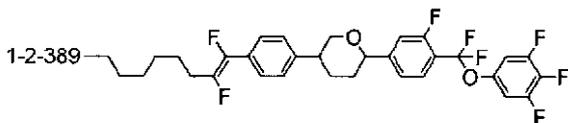
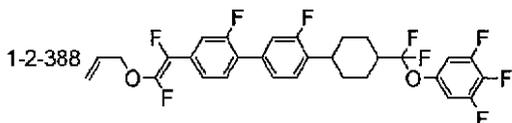
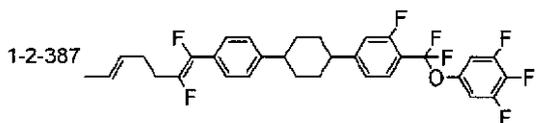
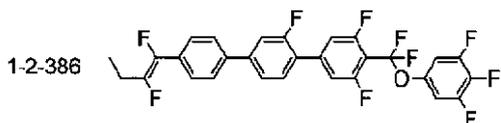
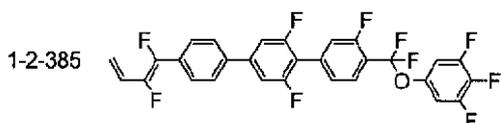
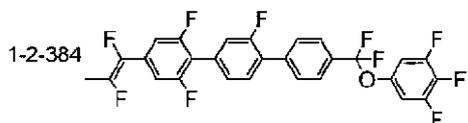
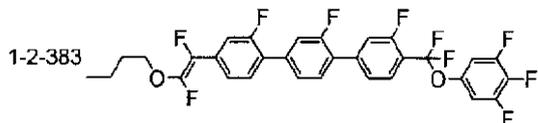
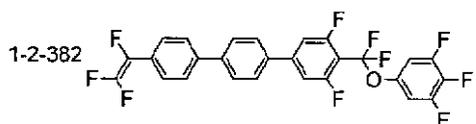
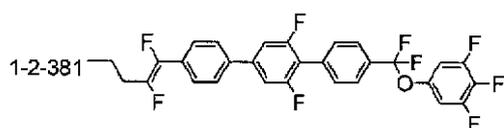
20

30

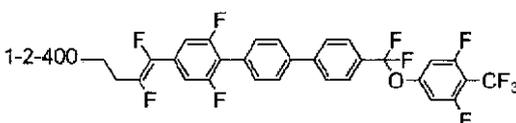
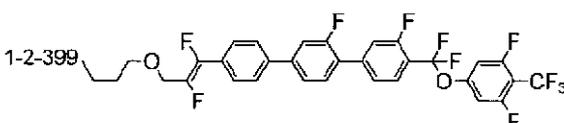
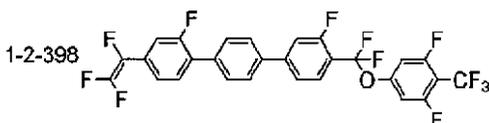
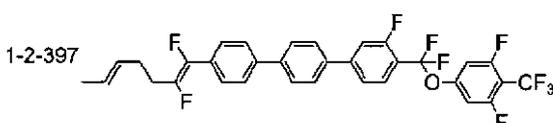
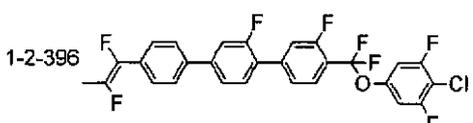
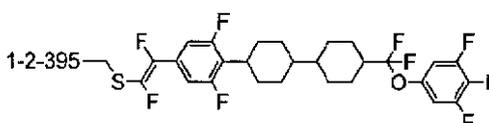
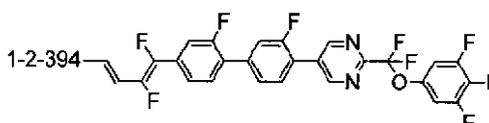
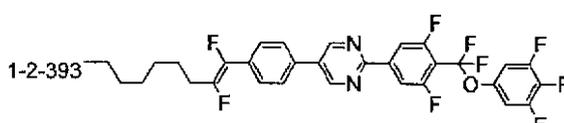
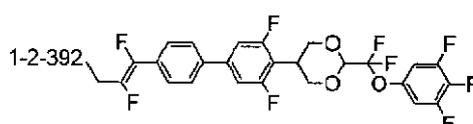
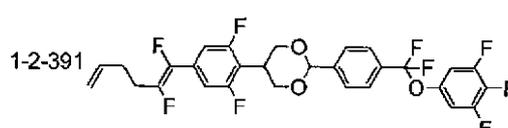
40

【化 6 5】

No.



No.



10

20

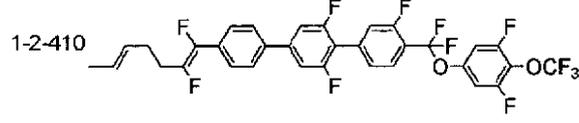
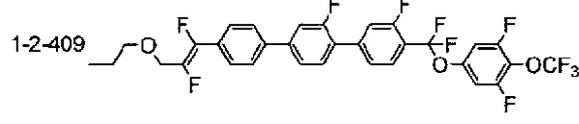
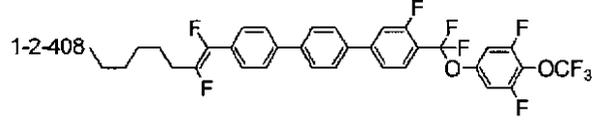
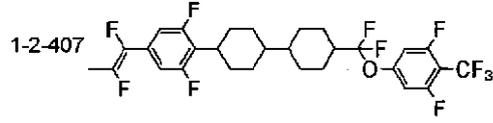
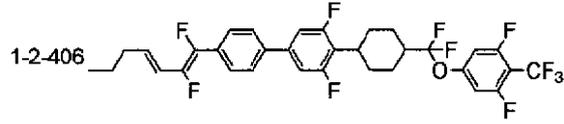
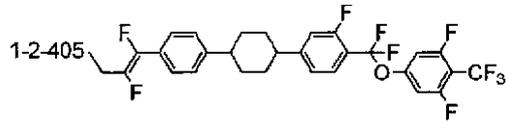
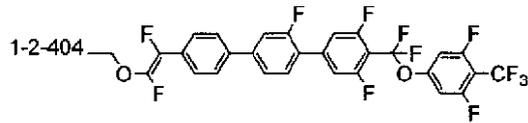
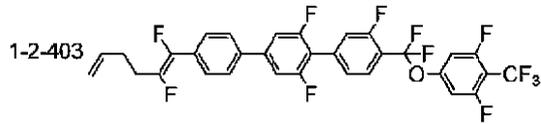
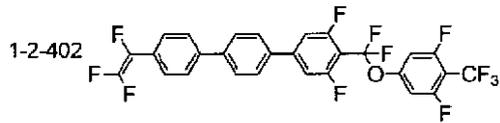
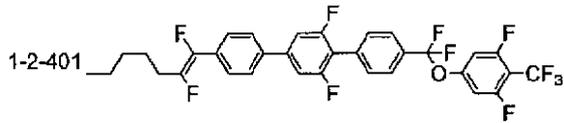
30

40

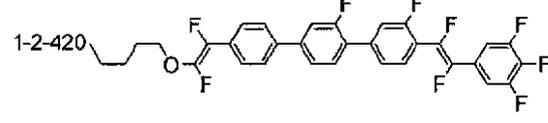
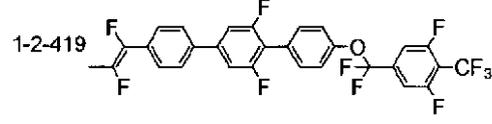
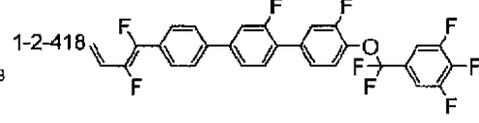
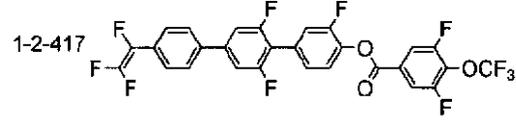
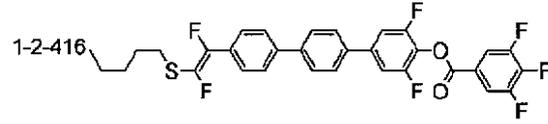
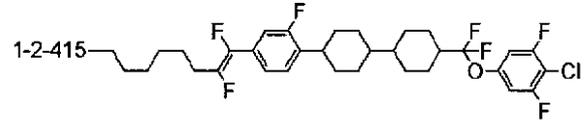
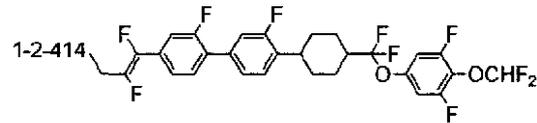
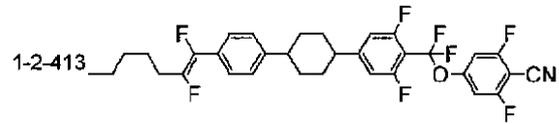
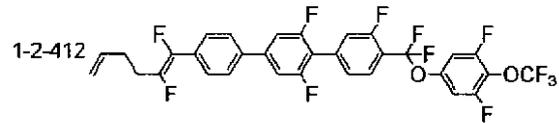
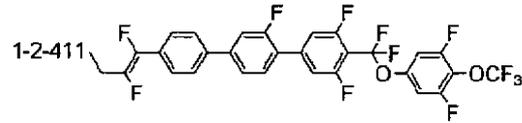
【 0 1 9 8 】

【化 6 6】

No.



No.



10

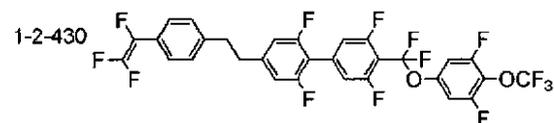
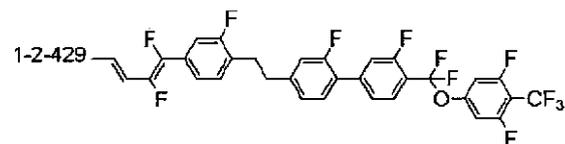
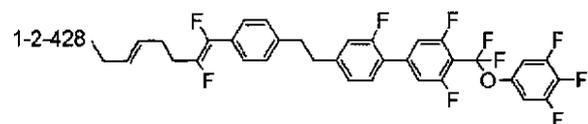
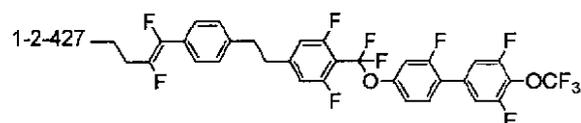
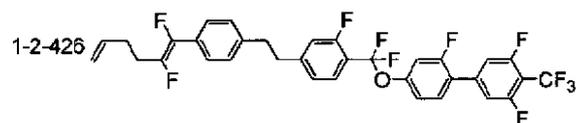
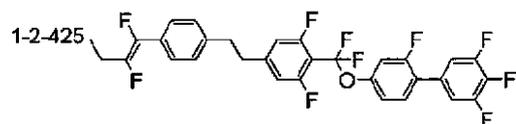
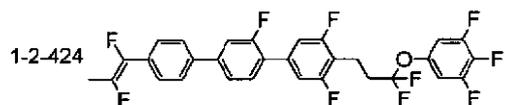
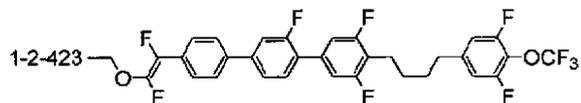
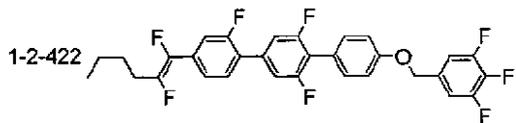
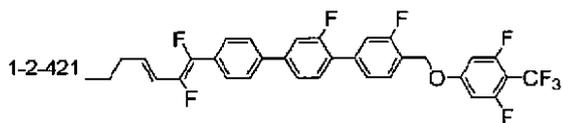
20

30

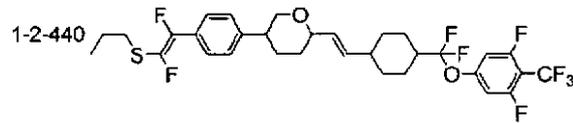
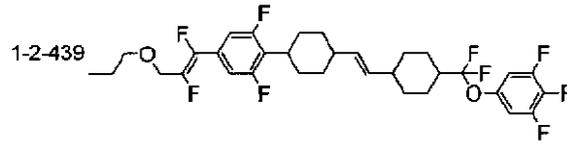
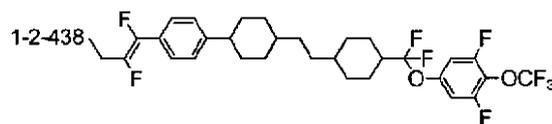
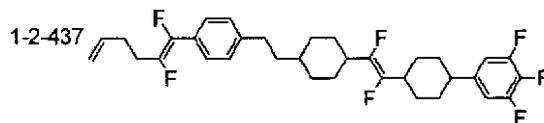
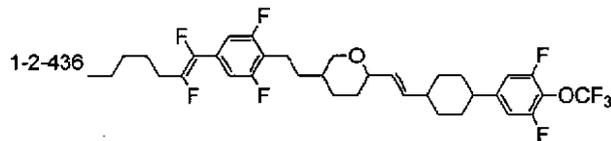
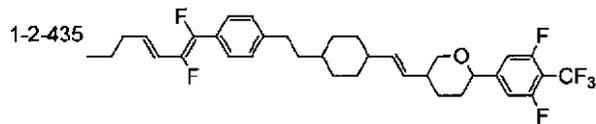
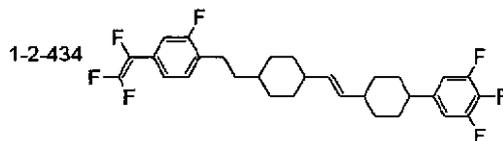
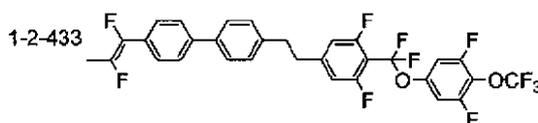
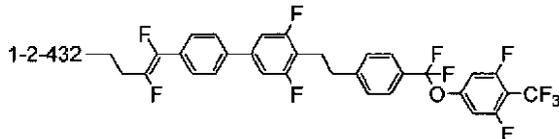
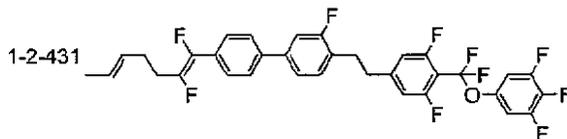
40

【化 6 7】

No.



No.



10

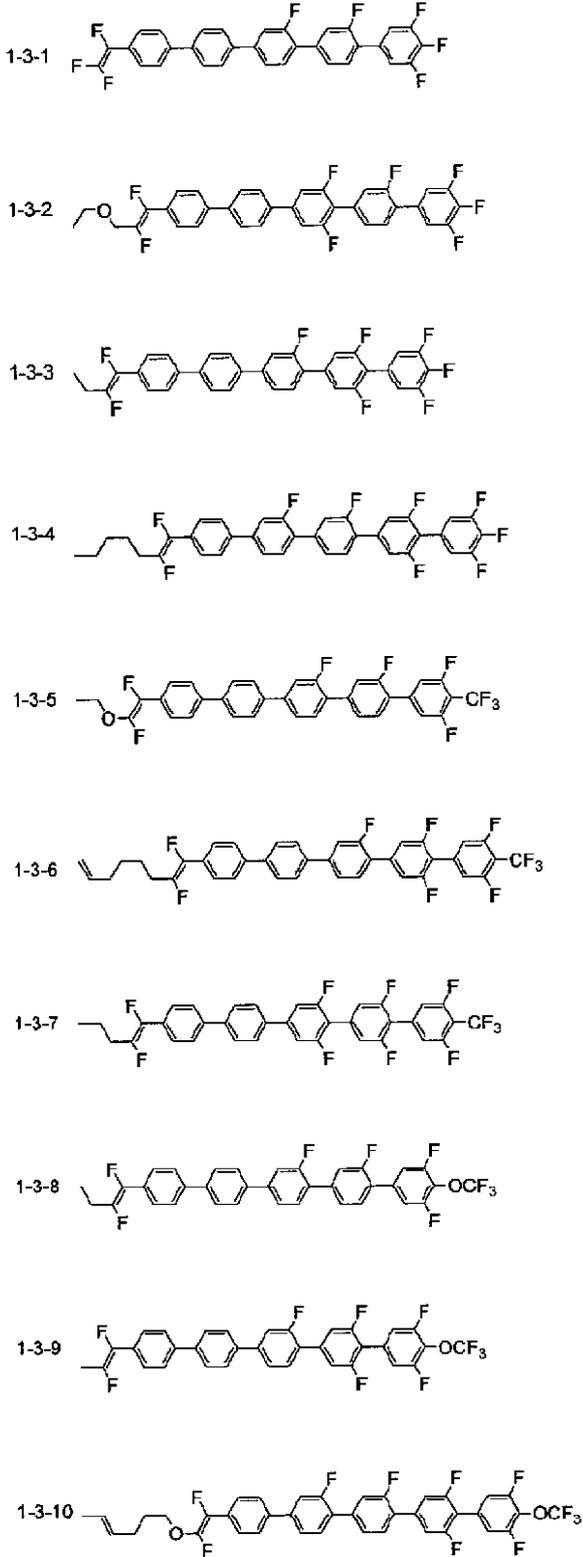
20

30

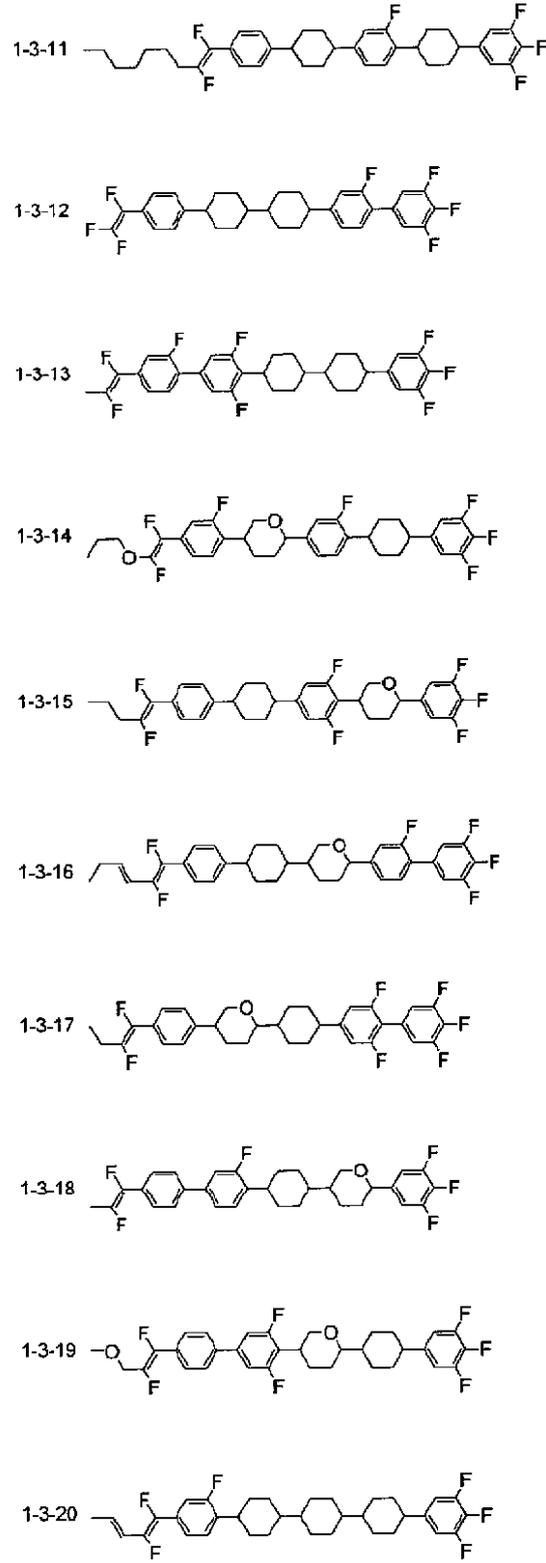
40

【化 6 8】

No.



No.



10

20

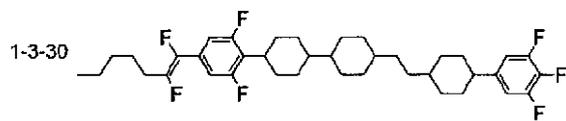
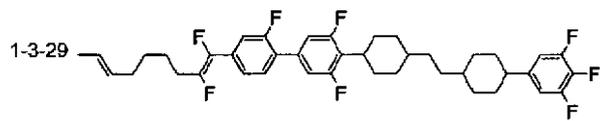
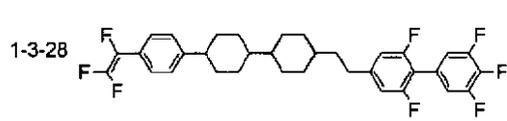
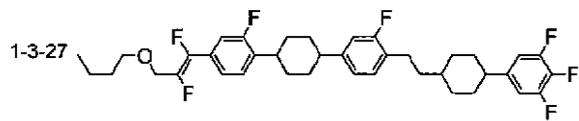
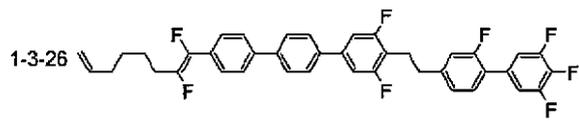
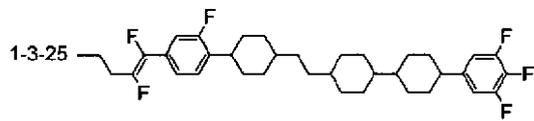
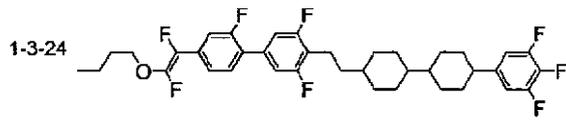
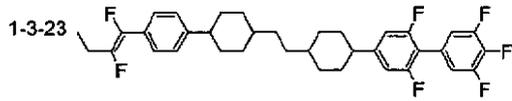
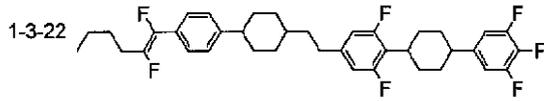
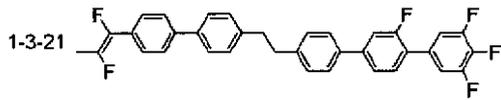
30

40

【 0 2 0 1】

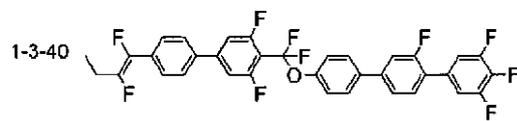
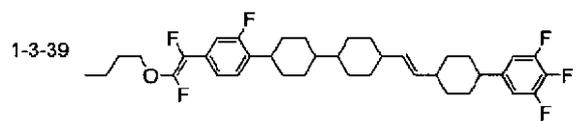
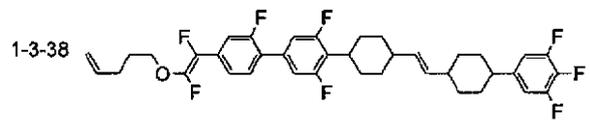
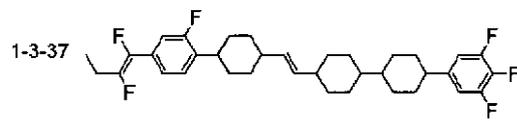
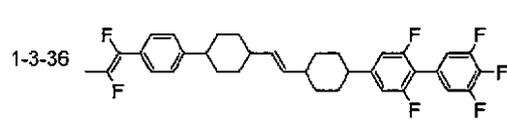
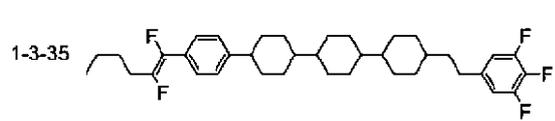
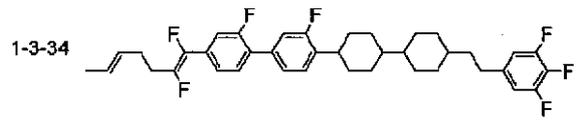
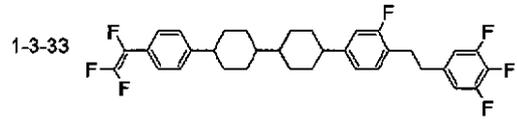
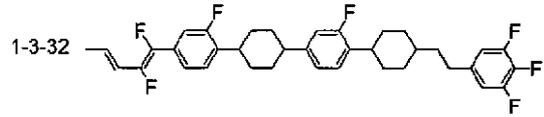
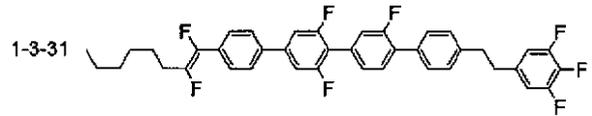
【化 6 9】

No.



【 0 2 0 2 】

No.



10

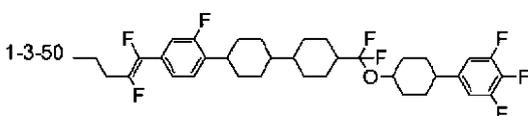
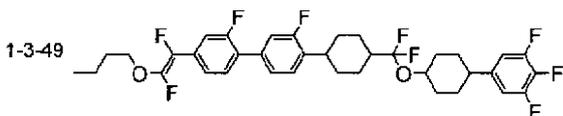
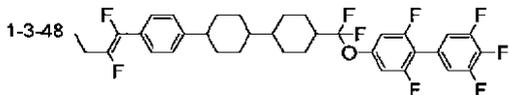
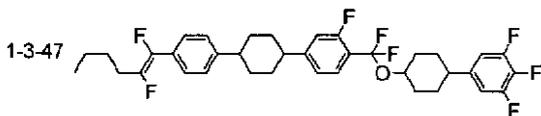
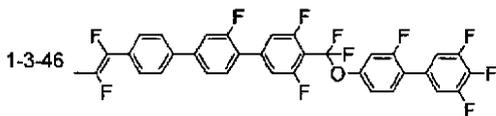
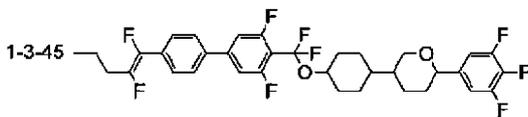
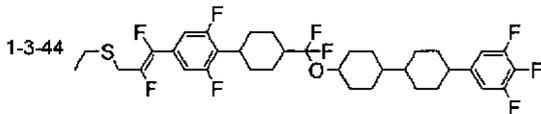
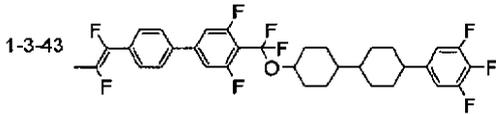
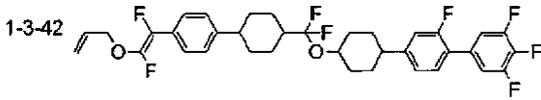
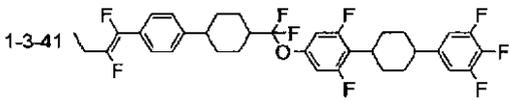
20

30

40

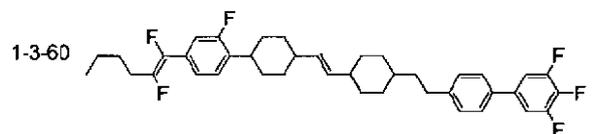
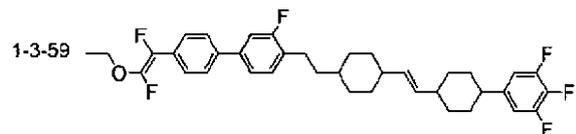
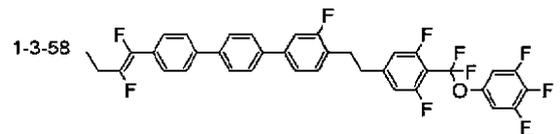
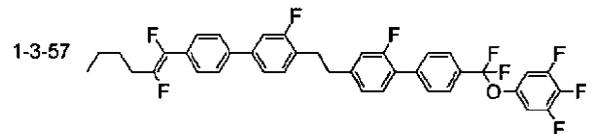
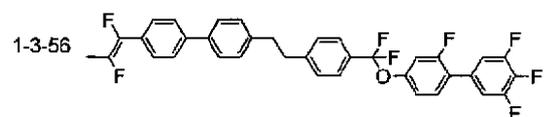
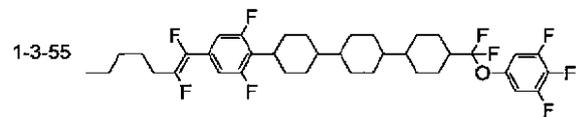
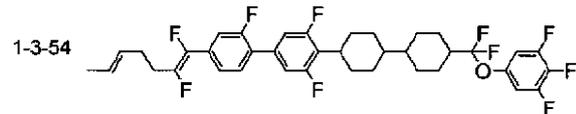
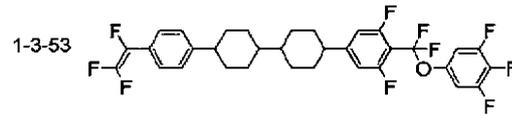
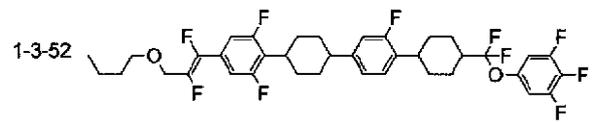
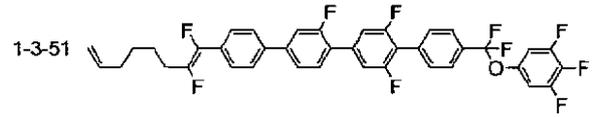
【化 7 0】

No.



【 0 2 0 3】

No.



10

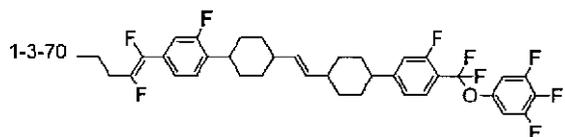
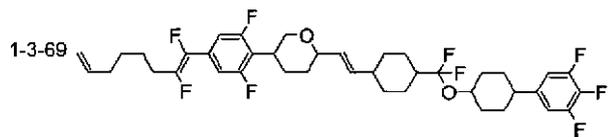
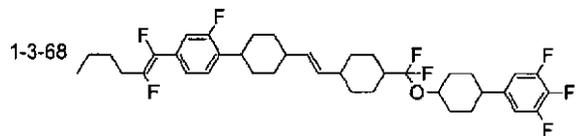
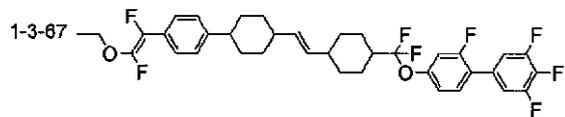
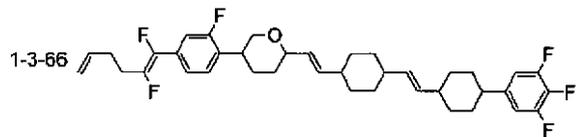
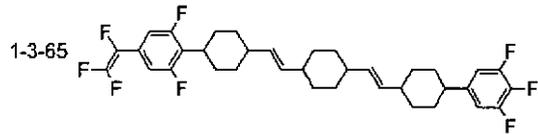
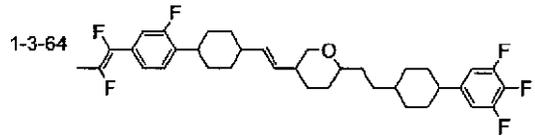
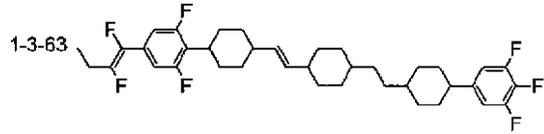
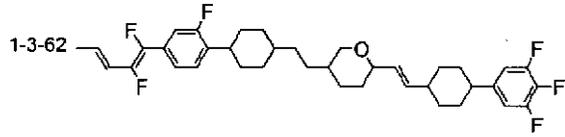
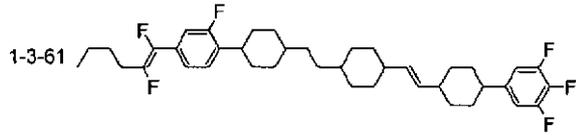
20

30

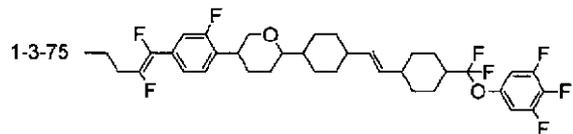
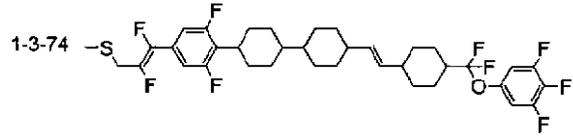
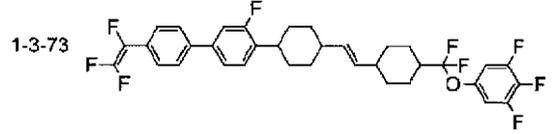
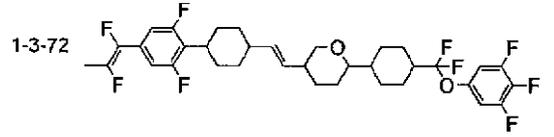
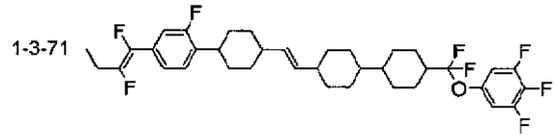
40

【化 7 1】

No.



No.



10

20

30

40

【 0 2 0 4】

[比較例 1]

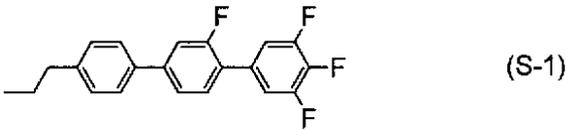
比較化合物として、化合物 (S-1) を合成した。この化合物は、独国特許出願公開第 4 1 0 7 1 2 0 号明細書に記載された化合物 (I) に包含され、本発明の化合物に類似し

50

ているからである。

【0205】

【化72】



$^1\text{H-NMR}$ (ppm; CDCl_3): 7.53 (d, 2H)、7.47 - 7.38 (m, 4H)、7.29 (d, 2H)、7.23 (dt, 2H)、2.65 (t, 2H)、1.69 (sex, 2H)、0.98 (t, 3H) .

10

比較化合物(S-1)の物性は、次のとおりであった。

転移温度: $C = 64.8$ I. $T_{NI} = 37.7$; $\eta = 52.9 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $n = 0.190$; $\Delta\epsilon = 22.2$.

【0206】

【表1】

表1. 化合物(1-1-12)と比較化合物(S-1)の物性

	化合物(No. 1-1-12)	比較化合物(S-1)
上限温度(T_{NI})	125.0°C	37.7°C
粘度(η)	73.7mPa·s	52.9mPa·s
光学異方性(Δn)	0.270	0.190
誘電率異方性($\Delta\epsilon$)	22.1	22.2

20

実施例2で得られた化合物(No. 1-1-12)と比較化合物(S-1)の物性を表1にまとめた。表1から、化合物(No. 1-1-12)は、上限温度が高く、光学異方性が大きい点で優れていることが分かった。

30

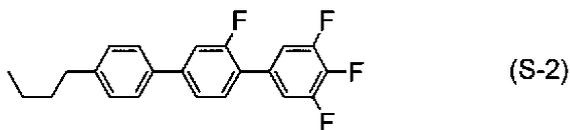
【0207】

[比較例2]

比較化合物として、化合物(S-2)を合成した。この化合物は、独国特許出願公開第4107120号明細書に記載された化合物(I)に包含され、本発明の化合物に類似しているからである。

【0208】

【化73】



40

$^1\text{H-NMR}$ (ppm; CDCl_3): 7.54 (d, 2H)、7.49 - 7.37 (m, 4H)、7.31 (d, 2H)、7.22 (dt, 2H)、2.62 (t, 2H)、1.59 (quin, 2H)、1.31 (sex, 2H)、0.90 (t, 3H) .

比較化合物(S-2)の物性は、次のとおりであった。

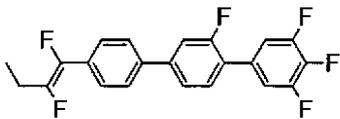
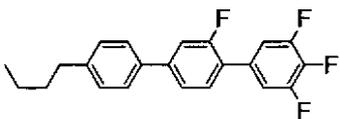
転移温度: $C = 59.5$ I. $T_{NI} = 30.4$; $\eta = 56.5 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $n = 0.164$; $\Delta\epsilon = 20.1$.

【0209】

50

【表 2】

表2. 化合物(1-1-13)と比較化合物(S-2)の物性

	化合物(No. 1-1-13)	比較化合物(S-2)
		
上限温度(T_{NI})	102.7°C	30.4°C
粘度(η)	66.2mPa·s	56.5mPa·s
光学異方性(Δn)	0.267	0.164
誘電率異方性($\Delta \epsilon$)	21.1	20.1

10

実施例3で得られた化合物(No. 1-1-13)と比較化合物(S-2)の物性を表2にまとめた。表2から、化合物(No. 1-1-13)は、上限温度が高く、光学異方性が大きい点で優れていることが分かった。

【0210】

1-2. 組成物(1)の実施例

次に本発明の液晶組成物(1)を詳細に説明する。実施例における化合物は、下記の表3の定義に基づいて記号により表した。表3において、1,4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。実施例において記号の後にあるカッコ内の番号は化合物の番号に対応する。()の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合(百分率)は、液晶組成物の全重量に基づいた重量百分率(重量%)である。最後に、組成物の物性値をまとめた。物性は、先に記載した方法にしたがって測定し、測定値を外挿することなくそのまま記載した。

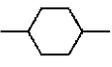
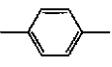
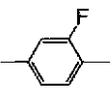
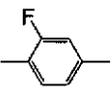
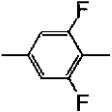
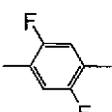
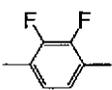
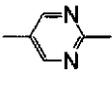
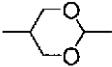
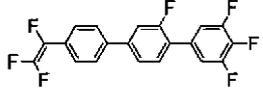
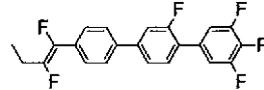
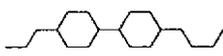
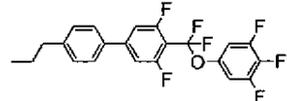
20

【0211】

【表 3】

表3. 記号を用いた化合物の表記法



1) 左末端基 R-	記号	4) 環構造 -A _n -	記号
C _n H _{2n+1} -	n-		H
C _n H _{2n+1} O-	nO-		B
C _m H _{2m+1} OC _n H _{2n} -	mOn-		B(F)
CH ₂ =CH-	V-		B(2F)
C _n H _{2n+1} -CH=CH-	nV-		B(F,F)
CH ₂ =CH-C _n H _{2n} -	Vn-		B(2F,5F)
C _m H _{2m+1} -CH=CH-C _n H _{2n} -	mVn-		B(2F,3F)
CF ₂ =CH-	FFV-		Py
CF ₂ =CH-C _n H _{2n} -	FFVn-		G
CF ₂ =CF-	FFVF-		
C _n H _{2n+1} -CF=CF-	nFVF-		
2) 右末端基 -R'	記号		
-C _n H _{2n+1}	-n		
-OC _n H _{2n+1}	-On		
-COOCH ₃	-EMe		
-CH=CH ₂	-V		
-CH=CH-C _n H _{2n+1}	-Vn		
-C _n H _{2n} -CH=CH ₂	-nV		
-C _m H _{2m} -CH=CH-C _n H _{2n+1}	-mVn		
-CH=CF ₂	-VFF		
-F	-F		
-Cl	-CL		
-OCF ₃	-OCF3		
-OCHF ₂	-OCHF2		
-CF ₃	-CF3		
-CN	-C		
3) 結合基 -Z _n -	記号		
-C _n H _{2n} -	n		
-C _n F _{2n} -	Fn		
-COO-	E		
-CH=CH-	V		
-CH ₂ O-	1O		
-OCH ₂ -	O1		
-CF ₂ O-	X		
-C≡C-	T		
5) 表記例			
例1 FFVF-BB(F)B(F,F)-F		例2 2FVF-BB(F)B(F,F)-F	
			
例3 3-HH-4		例4 3-BB(F,F)XB(F,F)-F	
			

【実施例 4】

FFVF - BB (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 1)	3 %	
1 FVF - BB (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 2)	3 %	
5 - HB - CL	(2 - 2)	1 6 %	
3 - HH - 4	(1 2 - 1)	1 2 %	
3 - HH - 5	(1 2 - 1)	4 %	
3 - HHB - F	(3 - 1)	4 %	
3 - HHB - CL	(3 - 1)	3 %	
4 - HHB - CL	(3 - 1)	4 %	
3 - HHB (F) - F	(3 - 2)	1 0 %	10
4 - HHB (F) - F	(3 - 2)	3 %	
5 - HHB (F) - F	(3 - 2)	9 %	
7 - HHB (F) - F	(3 - 2)	8 %	
5 - HBB (F) - F	(3 - 2 3)	4	
%			
1 O 1 - HBBH - 5	(1 4 - 1)	3 %	
3 - HHBB (F , F) - F	(4 - 6)	2 %	
4 - HHBB (F , F) - F	(4 - 6)	3 %	
5 - HHBB (F , F) - F	(4 - 6)	3 %	
3 - HH2BB (F , F) - F	(4 - 1 5)	3 %	20
4 - HH2BB (F , F) - F	(4 - 1 5)	3 %	

NI = 1 1 3 . 9 ; n = 0 . 1 0 1 .

【 0 2 1 3 】

【実施例 5】

1 FVF - BB (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 2)	3 %	
2 FVF - BB (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 3)	4 %	
3 - HHB (F , F) - F	(3 - 3)	9 %	
3 - H2HB (F , F) - F	(3 - 1 5)	8 %	
4 - H2HB (F , F) - F	(3 - 1 5)	8 %	
5 - H2HB (F , F) - F	(3 - 1 5)	8 %	30
3 - HBB (F , F) - F	(3 - 2 4)	2 1 %	
5 - HBB (F , F) - F	(3 - 2 4)	2 0 %	
3 - H2BB (F , F) - F	(3 - 2 7)	8 %	
5 - HHBB (F , F) - F	(4 - 6)	3 %	
5 - HHEBB - F	(4 - 1 7)	2 %	
3 - HH2BB (F , F) - F	(4 - 1 5)	2 %	
1 O 1 - HBBH - 5	(1 4 - 1)	4 %	

NI = 9 3 . 1 ; n = 0 . 1 0 6 ; = 1 0 . 0 ; V t h = 1 . 5 3 V ; = 3 6 . 0 m P a · s .

上記組成物 1 0 0 部に Op - 0 5 を 0 . 2 5 部添加したときのピッチは 5 9 . 5 μ m であった。 40

【 0 2 1 4 】

【実施例 6】

FFVF - BB (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 1)	3 %	
2 FVF - BB (F) B (F , F) - CF 3	(1 - 1 - 4 3)	3 %	
5 - HB - F	(2 - 2)	1 2 %	
6 - HB - F	(2 - 2)	9 %	
7 - HB - F	(2 - 2)	7 %	
2 - HHB - OCF 3	(3 - 1)	7 %	
3 - HHB - OCF 3	(3 - 1)	7 %	50

4 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	7 %	
5 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	5 %	
3 - H H 2 B - O C F 3	(3 - 4)	4 %	
5 - H H 2 B - O C F 3	(3 - 4)	4 %	
3 - H H B (F , F) - O C H F 2	(3 - 3)	4 %	
3 - H H B (F , F) - O C F 3	(3 - 3)	5 %	
3 - H H 2 B (F) - F	(3 - 5)	3 %	
3 - H B B (F) - F	(3 - 2 3)	7 %	
5 - H B B (F) - F	(3 - 2 3)	7 %	
5 - H B B H - 3	(1 4 - 1)	3 %	10
3 - H B (F) B H - 3	(1 4 - 2)	3 %	
【 0 2 1 5 】			
[実施例 7]			
1 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 2)	3 %	
2 F V F - B B (F , F) X B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 7 6)	3 %	
5 - H B - C L	(2 - 2)	8 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	8 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	4 %	
3 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	8 %	
3 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	2 0 %	20
5 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	1 5 %	
3 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	8 %	
4 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	3 %	
5 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	3 %	
2 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 9)	3 %	
3 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 9)	5 %	
5 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 9)	3 %	
3 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	6 %	
【 0 2 1 6 】			
[実施例 8]			30
2 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 3)	4 %	
2 F V F - B B B (F) B (F , F) - F	(1 - 2 - 8)	4 %	
3 - H B - C L	(2 - 2)	3 %	
5 - H B - C L	(2 - 2)	4 %	
3 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	5 %	
3 - H 2 H B - O C F 3	(3 - 1 3)	5 %	
5 - H 4 H B - O C F 3	(3 - 1 9)	1 5 %	
V - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %	
3 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %	
5 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %	40
3 - H 4 H B (F , F) - C F 3	(3 - 2 1)	8 %	
5 - H 4 H B (F , F) - C F 3	(3 - 2 1)	1 0 %	
5 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	5 %	
5 - H 4 H B (F , F) - F	(3 - 2 1)	7 %	
2 - H 2 B B (F) - F	(3 - 2 6)	5 %	
3 - H 2 B B (F) - F	(3 - 2 6)	5 %	
3 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 9)	5 %	
【 0 2 1 7 】			
[実施例 9]			
2 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 3)	5 %	50

2 F V F - B B (F) B (F , F) X B (F , F) - F	(1 - 2 - 3 8 6)	5 %	
5 - H B - C L	(2 - 2)	7 %	
7 - H B (F , F) - F	(2 - 4)	3 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	1 0 %	
3 - H H - 5	(1 2 - 1)	5 %	
3 - H B - O 2	(1 2 - 5)	1 5 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	8 %	
3 - H H B - O 1	(1 3 - 1)	5 %	
2 - H H B (F) - F	(3 - 2)	7 %	
3 - H H B (F) - F	(3 - 2)	7 %	10
5 - H H B (F) - F	(3 - 2)	7 %	
3 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	6 %	
3 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	5 %	
4 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	5 %	

【 0 2 1 8 】

[实 施 例 1 0]

F F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 1)	3 %	
1 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 2)	3 %	
5 - H B - C L	(2 - 2)	3 %	
7 - H B (F) - F	(2 - 3)	7 %	20
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	9 %	
3 - H H - E M e	(1 2 - 2)	2 3 %	
3 - H H E B - F	(3 - 1 0)	8 %	
5 - H H E B - F	(3 - 1 0)	8 %	
3 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	1 0 %	
4 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	5 %	
5 - H G B (F , F) - F	(3 - 1 0 3)	6 %	
2 - H 2 G B (F , F) - F	(3 - 1 0 6)	4 %	
3 - H 2 G B (F , F) - F	(3 - 1 0 6)	4 %	
5 - G H B (F , F) - F	(3 - 1 0 9)	7 %	30

N I = 8 0 . 8 ; n = 0 . 0 7 4 .

【 0 2 1 9 】

[实 施 例 1 1]

1 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 2)	3 %	
2 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 3)	5 %	
3 - H B - O 2	(1 2 - 5)	1 0 %	
5 - H B - C L	(2 - 2)	1 3 %	
3 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	7 %	
3 - P y B (F) - F	(2 - 1 5)	1 0 %	
5 - P y B (F) - F	(2 - 1 5)	1 0 %	40
3 - P y B B - F	(3 - 8 0)	1 0 %	
4 - P y B B - F	(3 - 8 0)	1 0 %	
5 - P y B B - F	(3 - 8 0)	1 0 %	
5 - H B B (F) B - 2	(1 4 - 5)	6 %	
5 - H B B (F) B - 3	(1 4 - 5)	6 %	

N I = 8 9 . 5 ; n = 0 . 1 9 2 ; = 9 . 4 ; V t h = 1 . 6 4 V ; = 4 0 .

6 m P a · s .

【 0 2 2 0 】

[实 施 例 1 2]

1 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 2)	3 %	50
-------------------------------------	-----------------	-----	----

2 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 3)	5 %	
3 - H H - V	(1 2 - 1)	2 5 %	
3 - B B (F , F) X B (F , F) - F	(3 - 9 7)	1 8 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	2 %	
2 - H B B - F	(3 - 2 2)	3 %	
3 - H B B - F	(3 - 2 2)	4 %	
3 - H H B - C L	(3 - 1)	7 %	
1 - B B (F) B - 2 V	(1 3 - 6)	6 %	
2 - B B (F) B - 2 V	(1 3 - 6)	6 %	
3 - B B (F) B - 2 V	(1 3 - 6)	3 %	10
2 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	4 %	
3 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	4 %	
4 - B B (F) B (F , F) X B (F , F) - F	(4 - 4 7)	1 0 %	
N I = 9 2 . 4 ; n = 0 . 1 5 1 ; = 9 . 4 ; V t h = 1 . 6 9 V ; = 2 5 .			
3 m P a · s .			

【 0 2 2 1 】

[実施例 1 3]

1 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 2)	3 %	
2 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 3)	4 %	
3 - H B - C	(5 - 1)	5 %	20
3 - B E B (F) C	(5 - 1 4)	4 %	
1 V 2 - B E B (F) C	(5 - 1 4)	1 2 %	
3 - H H B - C	(5 - 2 8)	6 %	
3 - H H B (F) - C	(5 - 2 9)	6 %	
3 - H B - O 2	(1 2 - 5)	1 1 %	
2 - H H - 3	(1 2 - 1)	1 1 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	1 0 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	8 %	
3 - H H B - O 1	(1 3 - 1)	4 %	
3 - H 2 B T B - 2	(1 3 - 1 7)	4 %	30
3 - H 2 B T B - 3	(1 3 - 1 7)	4 %	
3 - H 2 B T B - 4	(1 3 - 1 7)	4 %	
3 - H B (F) T B - 2	(1 3 - 1 8)	4 %	
N I = 1 0 9 . 7 ; n = 0 . 1 4 8 ; = 1 1 . 8 ; V t h = 1 . 8 7 V ; = 2			
5 . 9 m P a · s .			

【 0 2 2 2 】

[実施例 1 4]

2 F V F - B B (F) B (F , F) - F	(1 - 1 - 1 3)	4 %	
2 F V F - B B B (F) B (F , F) - F	(1 - 2 - 8)	4 %	
3 - H B - O 1	(1 2 - 5)	1 5 %	40
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	5 %	
3 - H B (2 F , 3 F) - O 2	(6 - 1)	1 2 %	
5 - H B (2 F , 3 F) - O 2	(6 - 1)	1 2 %	
2 - H H B (2 F , 3 F) - 1	(7 - 1)	1 2 %	
3 - H H B (2 F , 3 F) - 1	(7 - 1)	1 0 %	
3 - H H B (2 F , 3 F) - O 2	(7 - 1)	7 %	
5 - H H B (2 F , 3 F) - O 2	(7 - 1)	1 3 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	6 %	

【 産業上の利用可能性 】

【 0 2 2 3 】

本発明の液晶性化合物は、熱、光などに対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する。本発明の液晶組成物は、この化合物を含有し、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学的異方性、大きな誘電率異方性、および適切な弾性定数を有する。この組成物は、少なくとも2つの物性に関して適切なバランスを有する。本発明の液晶表示素子は、この組成物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、および長い寿命を有する。したがって、パソコン、テレビなどに用いる液晶表示素子に広く利用できる。

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		テーマコード(参考)
C 0 7 C 323/09	(2006.01)	C 0 7 C 323/09		
C 0 7 C 323/07	(2006.01)	C 0 7 C 323/07		
C 0 9 K 19/12	(2006.01)	C 0 9 K 19/12		
C 0 9 K 19/20	(2006.01)	C 0 9 K 19/20		
C 0 9 K 19/14	(2006.01)	C 0 9 K 19/14		
C 0 9 K 19/30	(2006.01)	C 0 9 K 19/30		
C 0 9 K 19/34	(2006.01)	C 0 9 K 19/34		
C 0 9 K 19/18	(2006.01)	C 0 9 K 19/18		
C 0 9 K 19/54	(2006.01)	C 0 9 K 19/54	B	
G 0 2 F 1/13	(2006.01)	C 0 9 K 19/54	C	
		C 0 9 K 19/54	D	
		G 0 2 F 1/13	5 0 0	

Fターム(参考)	4H006	AA01	AB64	BJ10	BJ50	BM10	BM30	BM71	BP10	BP30	KA31
	4H027	BA01	BD02	BD03	BD07	BD08	BD09	BD20	CB01	CD04	CE04
		CE05	CG04	CG05	CH05	CK01	CK04	CK05	CL01	CL04	CL05
		CM01	CM04	CM05	CN04	CN05	CP04	CP05	CQ01	CQ04	CQ05
		CR01	CR04	CR05	CS04	CS05	CT04	CT05	CU01	CU04	CU05
		CW01	DE04	DE05	DF04	DF05	DH04	DH05			