



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 114787130 A

(43) 申请公布日 2022.07.22

(21) 申请号 202180007071.2

(22) 申请日 2021.03.24

(30) 优先权数据

2020-054507 2020.03.25 JP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2022.06.08

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/JP2021/012218 2021.03.24

(87) PCT国际申请的公布数据

W02021/193708 JA 2021.09.30

(71) 申请人 捷恩智株式会社

地址 日本东京千代田区大手町二丁目2番1号(邮递区号:100-8105)

申请人 捷恩智石油化学株式会社

公益财团法人相模中央化学研究所

(72) 发明人 稻垣顺一 木村敬二 高桥道子

相原秀典 林和史

(74) 专利代理机构 北京同立钧成知识产权代理有限公司 11205

专利代理师 贺财俊 刘芳

(51) Int.Cl.

C07D 209/88 (2006.01)

C07D 405/04 (2006.01)

C07D 405/12 (2006.01)

C09K 19/12 (2006.01)

C09K 19/14 (2006.01)

C09K 19/16 (2006.01)

C09K 19/18 (2006.01)

C09K 19/20 (2006.01)

C09K 19/30 (2006.01)

C09K 19/32 (2006.01)

C09K 19/34 (2006.01)

C09K 19/42 (2006.01)

G02F 1/13 (2006.01)

权利要求书16页 说明书125页

(54) 发明名称

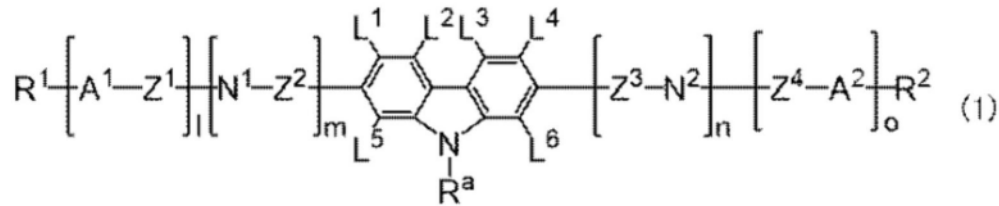
化合物、液晶组合物及液晶显示元件

(57) 摘要

一种化合物,其由式(1)表示。 $R^1$ 及 $R^2$ 为碳数1至15的烷基等; $R^a$ 为氢等;环 $A^1$ 及环 $A^2$ 为1,4-亚环己基、1,4-亚苯基等;环 $N^1$ 及环 $N^2$ 为1,2-亚环丙基、1,3-亚环戊基等; $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 为单键等; $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、 $L^4$ 、 $L^5$ 及 $L^6$ 为氟等;1及o为0或1,m及n为0、1、或2。

1. 一种化合物,其由式(1)表示。

[化1]



式(1)中,

$R^1$ 为氢、或碳数1至15的烷基,所述 $R^1$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

$R^2$ 为氢、氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-C\equiv C-C\equiv N$ 、或碳数1至15的烷基,所述 $R^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

$R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为碳数3至5的亚环烷基,所述环 $A^1$ 及环 $A^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 取代;

环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或9H-芴-2,7-二基,所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代;

$Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键或碳数1至6的亚烷基,所述 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

$L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、 $L^4$ 、 $L^5$ 、及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

在 $L^5$ 及 $L^6$ 均为氢时, $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

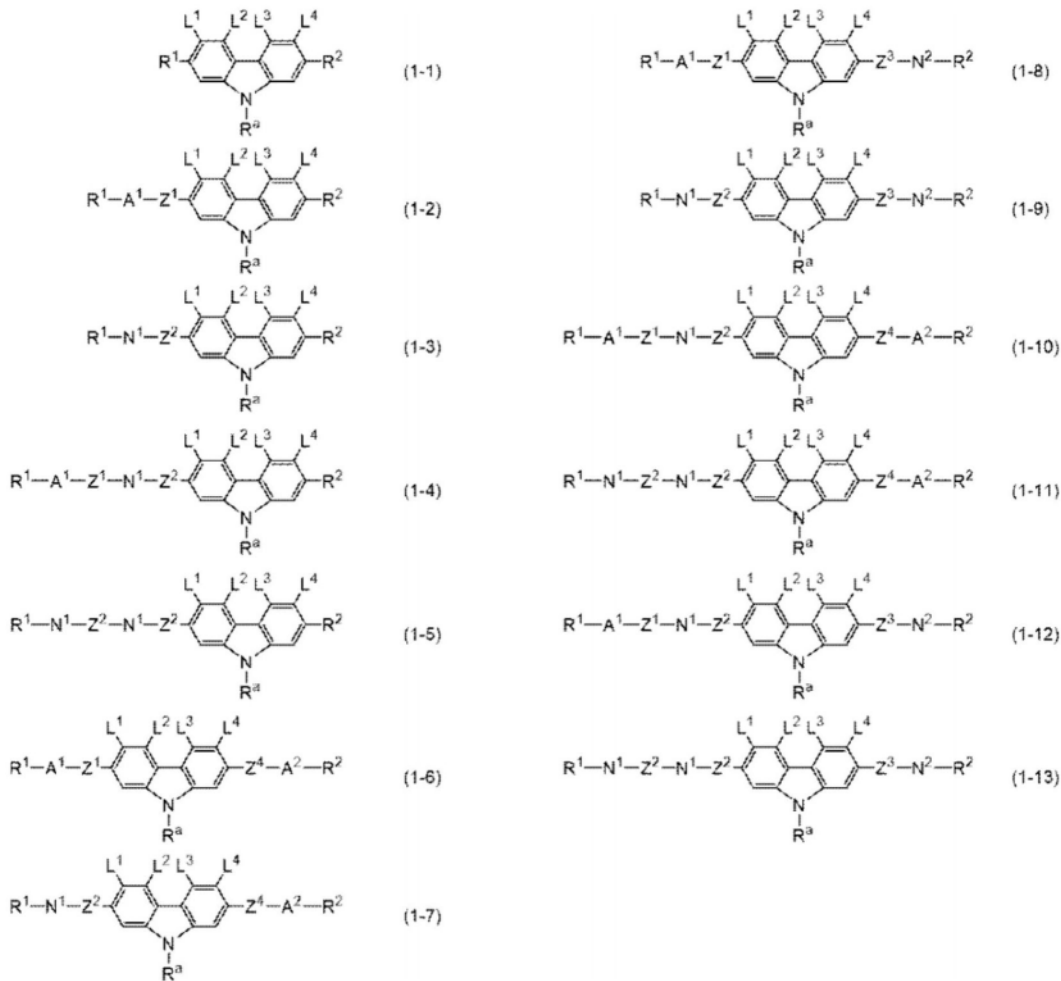
在 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 均为氢时, $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

1及o独立地为0、或1,m及n独立地为0、1、或2,1、m、n、及o的和为0至4的整数;

在1为0时, $R^1$ 不会成为氢,在o为0时, $R^2$ 不会成为氢。

2. 根据权利要求1所述的化合物,其由式(1-1)至式(1-13)表示。

[化2]



式 (1-1) 至式 (1-13) 中,

$R^1$  为氢、碳数 1 至 15 的烷基、碳数 1 至 14 的烷氧基、碳数 2 至 14 的烷氧基烷基、碳数 2 至 15 的烯基、或碳数 2 至 14 的烯基氧基;

$R^2$  为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-C\equiv N$ 、碳数 1 至 15 的烷基、碳数 1 至 14 的烷氧基、碳数 2 至 14 的烷氧基烷基、碳数 2 至 15 的烯基、或碳数 2 至 14 的烯基氧基;

$R^3$  为氢、碳数 1 至 6 的直链烷基、或碳数 3 至 6 的分支链烷基;

环  $A^1$  及环  $A^2$  独立地为碳数 3 至 5 的亚环烷基, 所述环  $A^1$  及环  $A^2$  中, 至少一个  $-CH_2-$  可经  $-O-$  取代, 至少一个  $-(CH_2)_2-$  可经  $-CH=CH-$  取代;

环  $N^1$  及环  $N^2$  独立地为 1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或 9H-苈-2,7-二基, 所述环  $N^1$  及环  $N^2$  中, 至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或  $-OCH_2F$  取代;

$Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及  $Z^4$  独立地为单键或碳数 1 至 6 的亚烷基, 所述  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及  $Z^4$  中, 至少一个  $-CH_2-$  可经  $-O-$ 、 $-S-$ 、或  $-CO-$  取代, 至少一个  $-(CH_2)_2-$  可经  $-CH=CH-$  或  $-C\equiv C-$  取代, 至少一个氢可经氟或氯取代;

$L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ；

式(1-1)、式(1-3)、式(1-5)、式(1-7)、式(1-9)、式(1-11)、及式(1-13)中， $R^1$ 不会成为氢，式(1-1)至式(1-5)、式(1-8)、式(1-9)、式(1-12)、及式(1-13)中， $R^2$ 不会成为氢。

3. 根据权利要求2所述的化合物，其中所述式(1-1)至式(1-13)中，

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为氢、碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

$R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基；

环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为1,2-亚环丙基、1,3-亚环丁基、或1,3-亚环戊基；

环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪喃-2,4-二基、咪喃-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪喃-2,5-二基、苯并咪喃-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、或苯并[b]噻吩-2,6-二基，所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中，至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代；

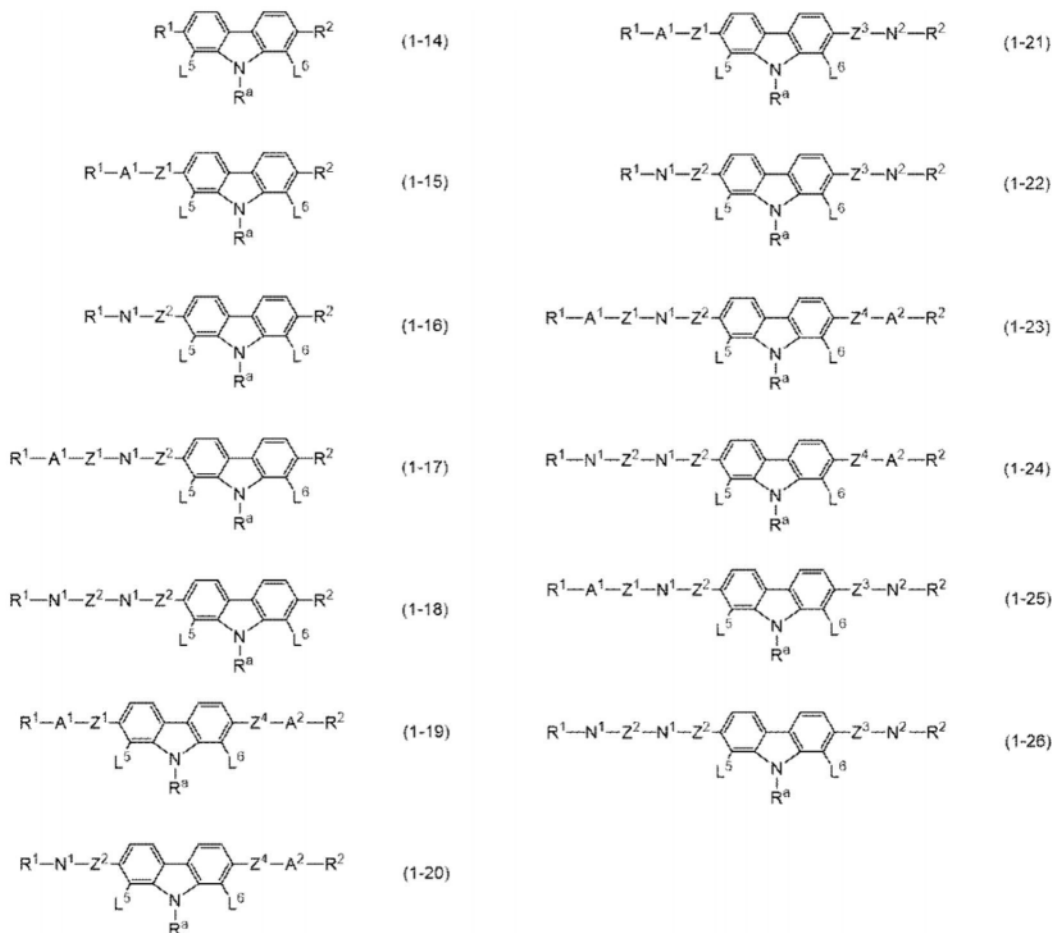
$Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CH-$ 、 $-CH=CF-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_2COO-$ 、 $-(CH_2)_2OCO-$ 、 $-OCO(CH_2)_2-$ 、 $-COO(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ 、 $-(CH_2)_2OCF_2-$ 、 $-OCF_2(CH_2)_2-$ 、 $-CF_2O(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ；

$L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ；

式(1-1)、式(1-3)、式(1-5)、式(1-7)、式(1-9)、式(1-11)、及式(1-13)中， $R^1$ 不会成为氢，式(1-1)至式(1-5)、式(1-8)、式(1-9)、式(1-12)、及式(1-13)中， $R^2$ 不会成为氢。

4. 根据权利要求1所述的化合物，其由式(1-14)至式(1-26)表示。

[化3]



式 (1-14) 至式 (1-26) 中,

$R^1$  为氢、碳数 1 至 15 的烷基、碳数 1 至 14 的烷氧基、碳数 2 至 14 的烷氧基烷基、碳数 2 至 15 的烯基、或碳数 2 至 14 的烯基氧基;

$R^2$  为氢、氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 、碳数 1 至 15 的烷基、碳数 1 至 14 的烷氧基、碳数 2 至 14 的烷氧基烷基、碳数 2 至 15 的烯基、或碳数 2 至 14 的烯基氧基;

$R^a$  为氢、碳数 1 至 6 的直链烷基、或碳数 3 至 6 的分支链烷基;

环  $A^1$  及环  $A^2$  独立地为碳数 3 至 5 的亚环烷基, 所述环  $A^1$  及环  $A^2$  中, 至少一个  $-\text{CH}_2-$  可经  $-\text{O}-$  取代, 至少一个  $-(\text{CH}_2)_2-$  可经  $-\text{CH}=\text{CH}-$  取代;

环  $N^1$  及环  $N^2$  独立地为 1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或 9H-芴-2,7-二基, 所述环  $N^1$  及环  $N^2$  中, 至少一个氢可经氟、氯、 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、或  $-\text{OCH}_2\text{F}$  取代;

$Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及  $Z^4$  独立地为单键或碳数 1 至 6 的亚烷基, 所述  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及  $Z^4$  中, 至少一个  $-\text{CH}_2-$  可经  $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、或  $-\text{CO}-$  取代, 至少一个  $-(\text{CH}_2)_2-$  可经  $-\text{CH}=\text{CH}-$  或  $-\text{C}\equiv\text{C}-$  取代, 至少一个氢可经氟或氯取代;

$L^5$  及  $L^6$  独立地为氢、氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{F}$ 、或  $-\text{C}\equiv\text{N}$ ,  $L^5$  及  $L^6$  的

至少一个为氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{F}$ 、或 $-\text{C}\equiv\text{N}$ ;

式(1-14)、式(1-16)、式(1-18)、式(1-20)、式(1-22)、式(1-24)、及式(1-26)中, $\text{R}^1$ 不会成为氢,式(1-14)至式(1-18)、式(1-21)、式(1-22)、式(1-25)、及式(1-26)中, $\text{R}^2$ 不会成为氢。

5. 根据权利要求4所述的化合物,其中所述式(1-14)至式(1-26)中,

$\text{R}^1$ 及 $\text{R}^2$ 独立地为氢、碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

$\text{R}^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

环 $\text{A}^1$ 及环 $\text{A}^2$ 独立地为1,2-亚环丙基、1,3-亚环丁基、或1,3-亚环戊基;

环 $\text{N}^1$ 及环 $\text{N}^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪喃-2,4-二基、咪喃-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪喃-2,5-二基、苯并咪喃-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、或苯并[b]噻吩-2,6-二基,所述环 $\text{N}^1$ 及环 $\text{N}^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、或 $-\text{OCH}_2\text{F}$ 取代;

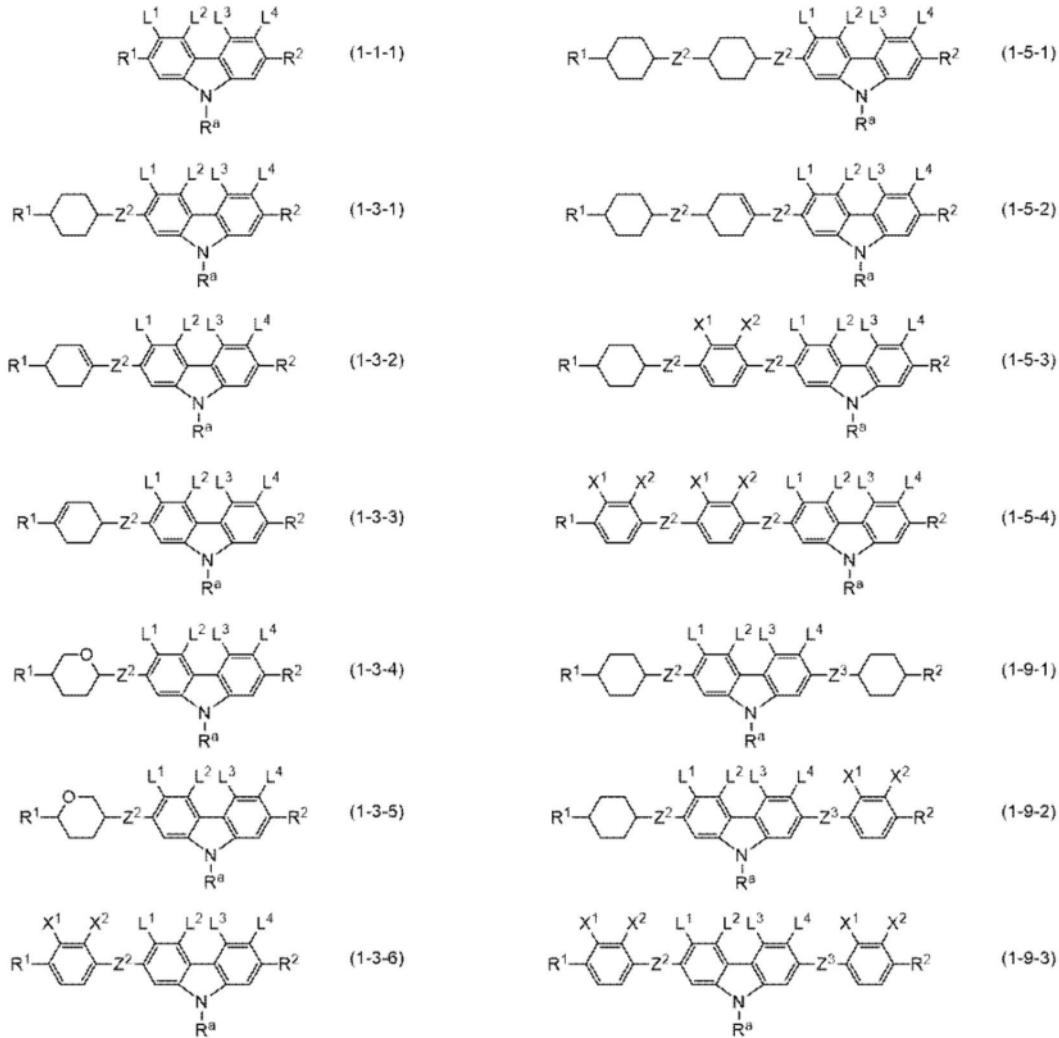
$Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OCO}-$ 、 $-\text{OCO}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2\text{O}-$ 、或 $-\text{OCH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ ;

$\text{L}^5$ 及 $\text{L}^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{F}$ 、或 $-\text{C}\equiv\text{N}$ , $\text{L}^5$ 及 $\text{L}^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{F}$ 、或 $-\text{C}\equiv\text{N}$ ;

式(1-14)、式(1-16)、式(1-18)、式(1-20)、式(1-22)、式(1-24)、及式(1-26)中, $\text{R}^1$ 不会成为氢,式(1-14)至式(1-18)、式(1-21)、式(1-22)、式(1-25)、及式(1-26)中, $\text{R}^2$ 不会成为氢。

6. 根据权利要求1至3中任一项所述的化合物,其由式(1-1-1)、式(1-3-1)至式(1-3-6)、式(1-5-1)至式(1-5-4)、或式(1-9-1)至式(1-9-3)表示。

[化4]



式(1-1-1)、式(1-3-1)至式(1-3-6)、式(1-5-1)至式(1-5-4)、及式(1-9-1)至式(1-9-3)中,

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

$R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

$Z^2$ 及 $Z^3$ 独立地为单键、-O-、-COO-、-OCO-、-CH<sub>2</sub>O-、-OCH<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-C≡C-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>COO-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCO-、-OCO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-COO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>O-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCF<sub>2</sub>-、-OCF<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>O-、-O(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-、-CH=CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CH=CH-、-CH=CH-CH<sub>2</sub>O-、或-OCH<sub>2</sub>-CH=CH-;

$L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、-CF<sub>3</sub>、-CHF<sub>2</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-OCHF<sub>2</sub>、或-OCH<sub>2</sub>F, $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、-CF<sub>3</sub>、-CHF<sub>2</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-OCHF<sub>2</sub>、或-OCH<sub>2</sub>F;

$X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

7. 根据权利要求6所述的化合物,其中所述式(1-1-1)、式(1-3-1)至式(1-3-6)、式(1-5-1)至式(1-5-4)、式(1-9-1)至式(1-9-3)中,

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至10的烯基氧基;

$R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

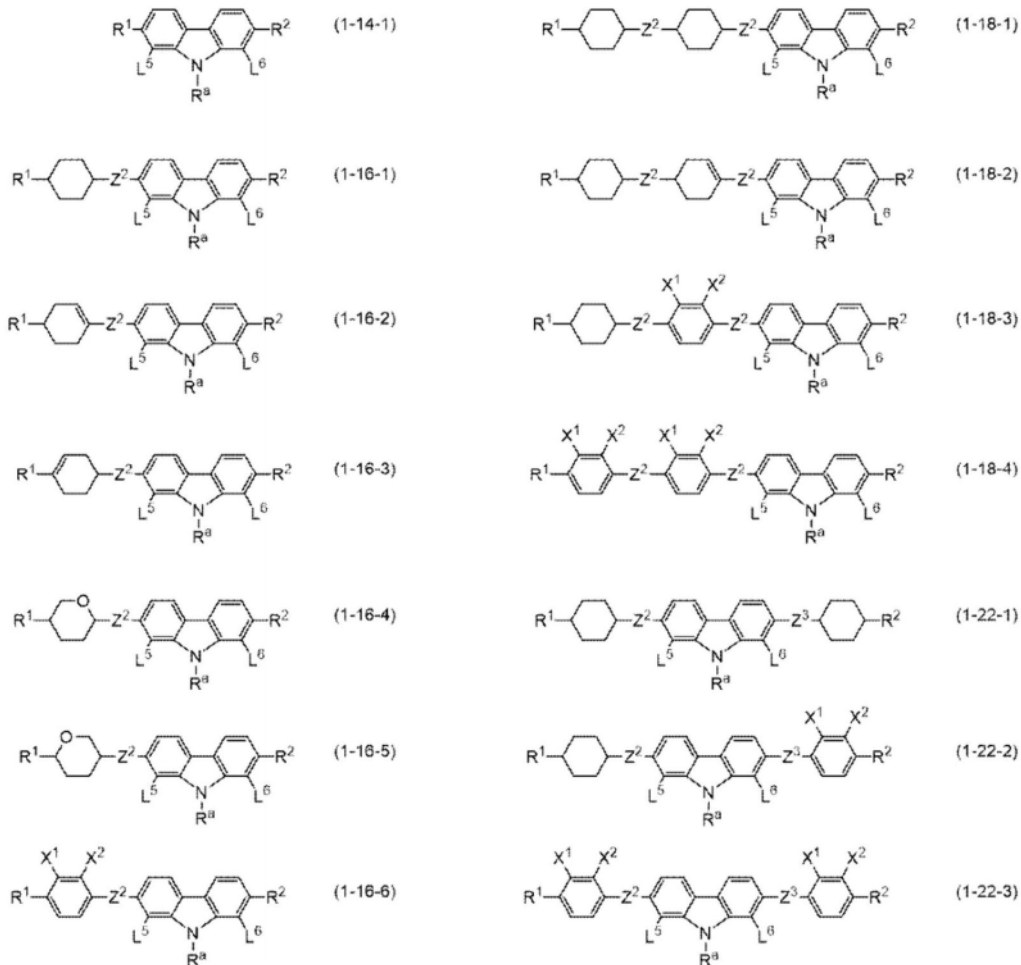
Z<sup>2</sup>及Z<sup>3</sup>独立地为单键、-COO-、-OCO-、-CH<sub>2</sub>O-、-OCH<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>O-、-O(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-、-CH=CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CH=CH-、-CH=CH-CH<sub>2</sub>O-、或-OCH<sub>2</sub>-CH=CH-；

L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>独立地为氢、氟、氯、-CF<sub>3</sub>或-OCF<sub>3</sub>，L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>的至少一个为氟、氯、-CF<sub>3</sub>或-OCF<sub>3</sub>，L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>的至少两个为氢；

X<sup>1</sup>及X<sup>2</sup>独立地为氢、氟、或氯。

8. 根据权利要求1、4、及5中任一项所述的化合物，其由式(1-14-1)、式(1-16-1)至式(1-16-6)、式(1-18-1)至式(1-18-4)、或式(1-22-1)至式(1-22-3)表示。

[化5]



式(1-14-1)、式(1-16-1)至式(1-16-6)、式(1-18-1)至式(1-18-4)、及式(1-22-1)至式(1-22-3)中，

R<sup>1</sup>及R<sup>2</sup>独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

R<sup>a</sup>为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基；

Z<sup>2</sup>及Z<sup>3</sup>独立地为单键、-O-、-COO-、-OCO-、-CH<sub>2</sub>O-、-OCH<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-C≡C-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>COO-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCO-、-OCO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-COO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>O-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCF<sub>2</sub>-、-OCF<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>O-、-O(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-、-CH=CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CH=CH-、-CH=CH-CH<sub>2</sub>O-、或-OCH<sub>2</sub>-CH=CH-；

$L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ， $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ；

$X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

9. 根据权利要求8所述的化合物，其中所述式(1-14-1)、式(1-16-1)至式(1-16-6)、式(1-18-1)至式(1-18-4)、及式(1-22-1)至式(1-22-3)中，

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

$R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基；

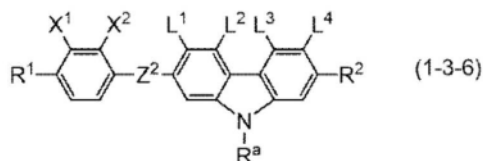
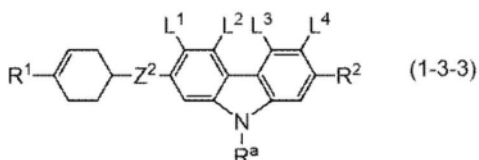
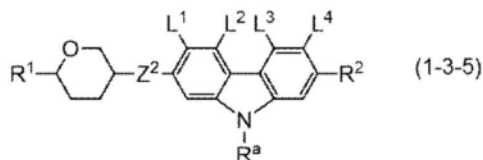
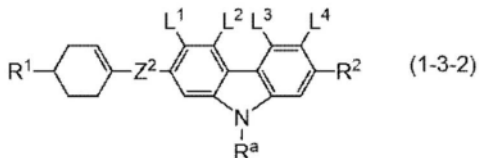
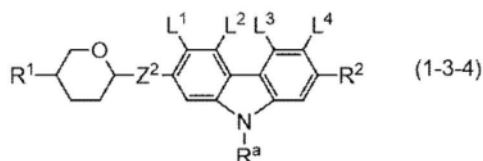
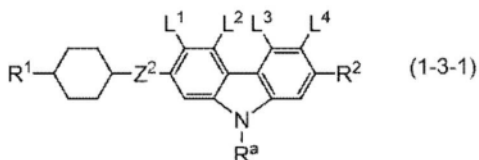
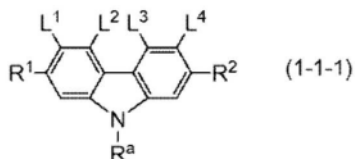
$Z^2$ 及 $Z^3$ 独立地为单键、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ；

$L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ， $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ；

$X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

10. 根据权利要求1至3、6、及7中任一项所述的化合物，其由式(1-1-1)、或式(1-3-1)至式(1-3-6)表示。

[化6]



式(1-1-1)、及式(1-3-1)至式(1-3-6)中，

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

$R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基；

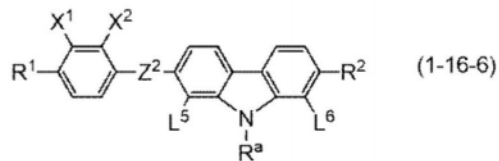
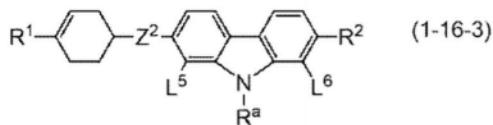
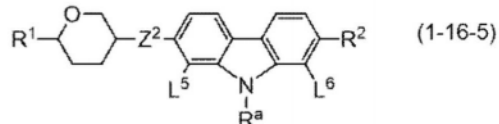
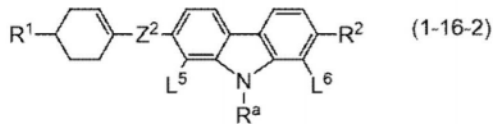
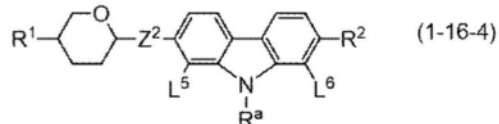
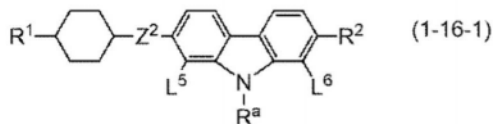
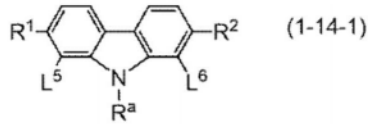
$Z^2$ 为单键、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ；

$L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少两个为氢；

$X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

11. 根据权利要求1、4、5、8、及9中任一项所述的化合物，其由式(1-14-1)、或式(1-16-1)至式(1-16-6)表示。

[化7]



式(1-14-1)、及式(1-16-1)至式(1-16-6)中，

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

$R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基；

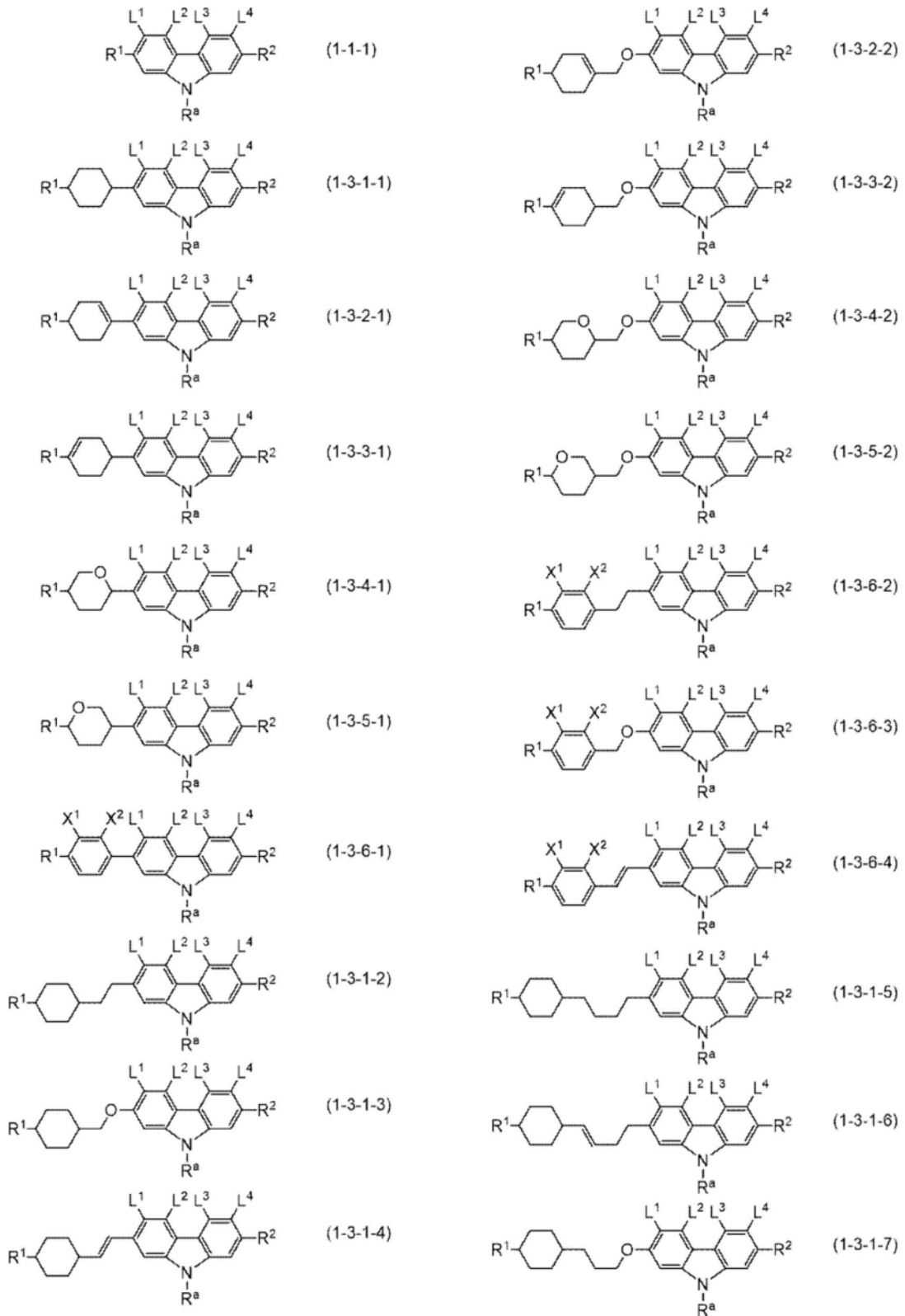
$Z^2$ 为单键、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ；

$L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ， $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ；

$X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

12. 根据权利要求1至3、6、7、及10中任一项所述的化合物，其由式(1-1-1)、式(1-3-1-1)至式(1-3-1-7)、式(1-3-2-1)、式(1-3-2-2)、式(1-3-3-1)、式(1-3-3-2)、式(1-3-4-1)、式(1-3-4-2)、式(1-3-5-1)、式(1-3-5-2)、或式(1-3-6-1)至式(1-3-6-4)表示，

[化8]



式(1-1-1)、式(1-3-1-1)至式(1-3-1-7)、式(1-3-2-1)、式(1-3-2-2)、式(1-3-3-1)、式(1-3-3-2)、式(1-3-4-1)、式(1-3-4-2)、式(1-3-5-1)、式(1-3-5-2)、及式(1-3-6-1)至式(1-3-6-4)中,

R<sup>1</sup>及R<sup>2</sup>独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

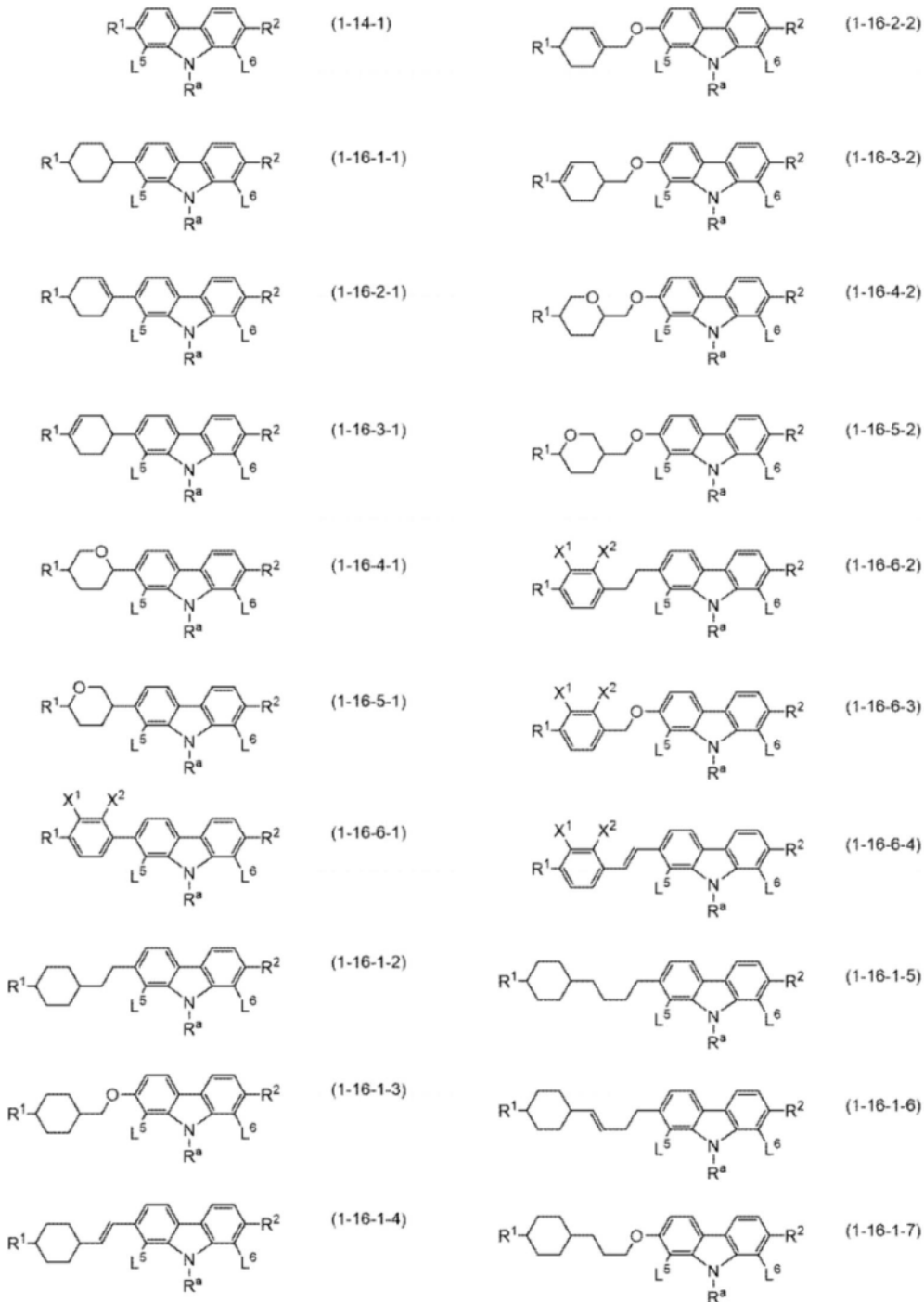
R<sup>a</sup>为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基；

L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>独立地为氢、氟、-CF<sub>3</sub>、或-OCF<sub>3</sub>，L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>的至少两个为氟、-CF<sub>3</sub>、或-OCF<sub>3</sub>，L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>的至少一个为氢；

X<sup>1</sup>及X<sup>2</sup>独立地为氢或氟。

13. 根据权利要求1、4、5、8、9、及11中任一项所述的化合物，其由式(1-14-1)、式(1-16-1-1)至式(1-16-1-7)、式(1-16-2-1)、式(1-16-2-2)、式(1-16-3-1)、式(1-16-3-2)、式(1-16-4-1)、式(1-16-4-2)、式(1-16-5-1)、式(1-16-5-2)、或式(1-16-6-1)至式(1-16-6-4)表示。

[化9]



式(1-14-1-1)、式(1-16-1-1)至式(1-16-1-7)、式(1-16-2-1)、式(1-16-2-2)、式(1-16-3-1)、式(1-16-3-2)、式(1-16-4-1)、式(1-16-4-2)、式(1-16-5-1)、式(1-16-5-2)、及式(1-16-6-1)至式(1-16-6-4)中,

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

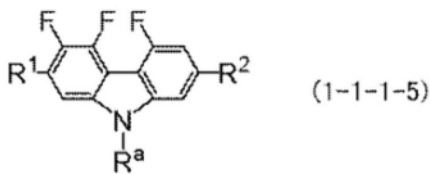
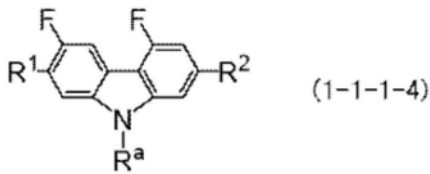
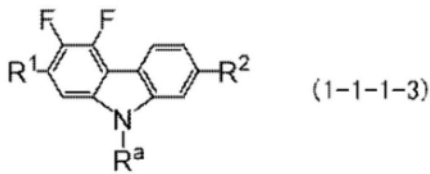
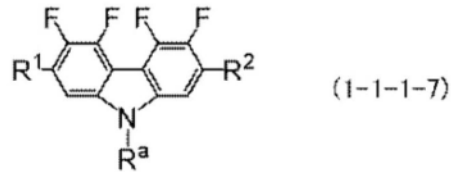
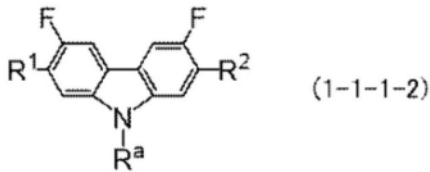
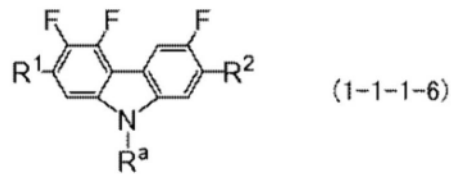
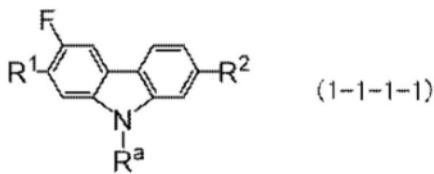
$R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基;

$L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ,  $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ;

$X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢或氟。

14. 根据权利要求1至3、6、7、10、及12中任一项所述的化合物,其由式(1-1-1-1)至式(1-1-1-7)表示。

[化10]



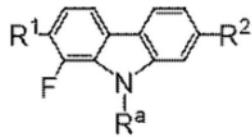
式(1-1-1-1)至式(1-1-1-7)中,

$R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至7的烷基、碳数1至6的烷氧基、碳数2至6的烷氧基烷基、碳数2至7的烯基、或碳数2至7的烯基氧基。

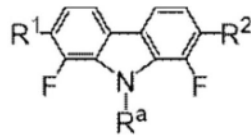
$R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基。

15. 根据权利要求1、4、5、8、9、11、及13中任一项所述的化合物,其由式(1-14-1-1)、或式(1-14-1-2)表示。

[化11]



(1-14-1-1)



(1-14-1-2)

式 (1-14-1-1)、或式 (1-14-1-2) 中,

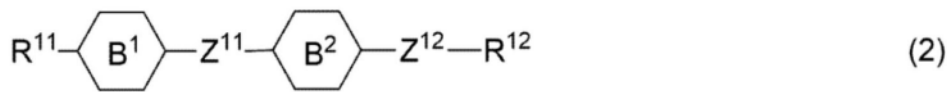
$R^1$  及  $R^2$  独立地为碳数 1 至 7 的烷基、碳数 1 至 6 的烷氧基、碳数 2 至 6 的烷氧基烷基、碳数 2 至 7 的烯基、或碳数 2 至 7 的烯基氧基。

$R^a$  为氢、碳数 1 至 4 的直链烷基、或碳数 3 或 4 的分支链烷基。

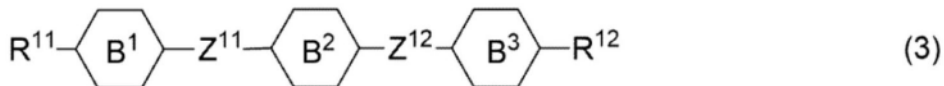
16. 一种液晶组合物, 含有如权利要求 1 至 15 中任一项所述的化合物的至少一种。

17. 根据权利要求 16 所述的液晶组合物, 含有选自式 (2) 至式 (4) 所表示的化合物的群组中的至少一种化合物。

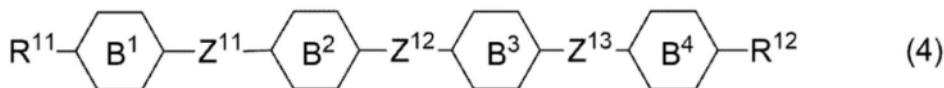
[化 12]



(2)



(3)



(4)

式 (2) 至式 (4) 中,

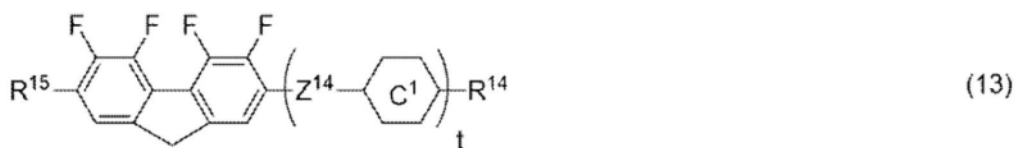
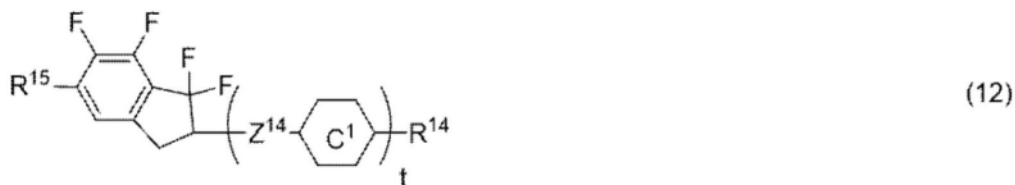
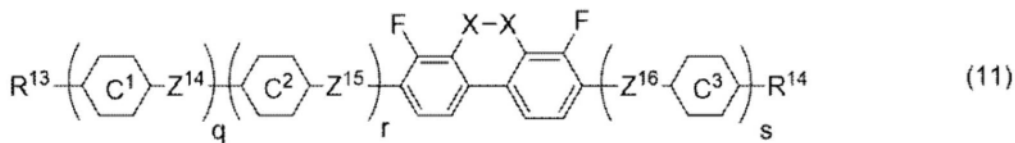
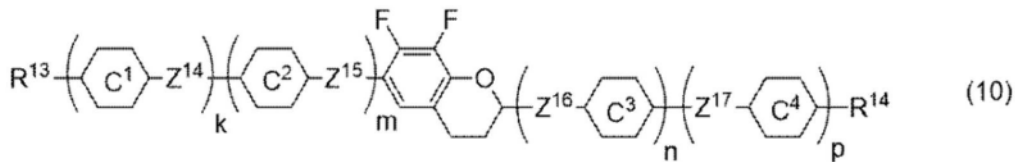
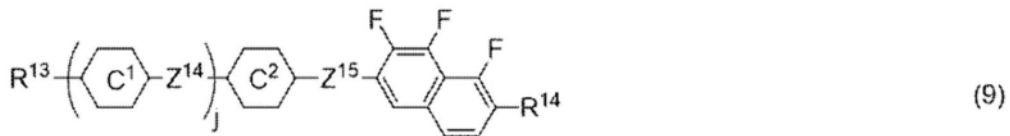
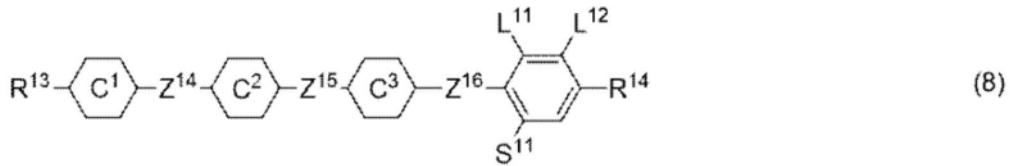
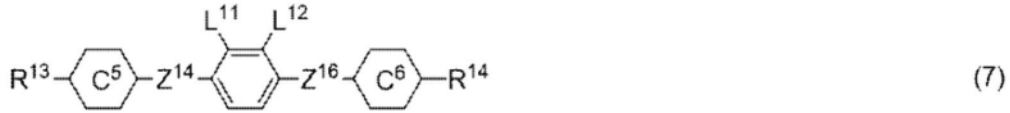
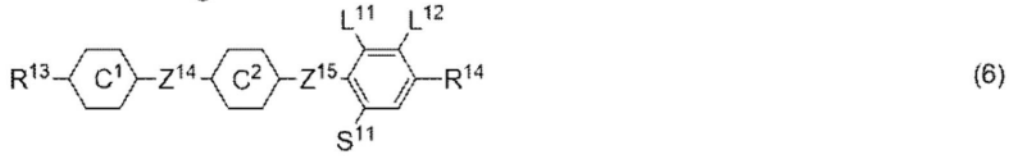
$R^{11}$  及  $R^{12}$  独立地为碳数 1 至 10 的烷基或碳数 2 至 10 的烯基, 所述  $R^{11}$  及  $R^{12}$  中, 至少一个  $-CH_2-$  可经  $-O-$  取代, 至少一个氢可经氟取代;

环  $B^1$ 、环  $B^2$ 、环  $B^3$ 、及环  $B^4$  独立地为 1,4-亚环己基、1,4-亚苯基、2-氟-1,4-亚苯基、2,5-二氟-1,4-亚苯基、或嘧啶-2,5-二基;

$Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 、及  $Z^{13}$  独立地为单键、 $-COO-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、或  $-C\equiv C-$ 。

18. 根据权利要求 16 或 17 所述的液晶组合物, 进而含有选自式 (5) 至式 (13) 所表示的化合物的群组中的至少一种化合物。

[化 13]



式(5)至式(13)中,

$R^{13}$ 及 $R^{14}$ 独立地为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{13}$ 及 $R^{14}$ 中,至少一个- $CH_2$ -可经-O-取代,至少一个氢可经氟取代;

$R^{15}$ 为氢、氟、碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{15}$ 中,至少一个- $CH_2$ -可经-O-取代,至少一个氢可经氟取代;

环 $C^1$ 、环 $C^2$ 、环 $C^3$ 、及环 $C^4$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、至少一个氢可经氟取代的1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二基、或十氢萘-2,6-二基;

环 $C^5$ 及环 $C^6$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二

基、或十氢萘-2,6-二基;

$Z^{14}$ 、 $Z^{15}$ 、 $Z^{16}$ 、及 $Z^{17}$ 独立地为单键、-COO-、-CH<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、或-OCF<sub>2</sub>-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-;

$L^{11}$ 及 $L^{12}$ 独立地为氟或氯;

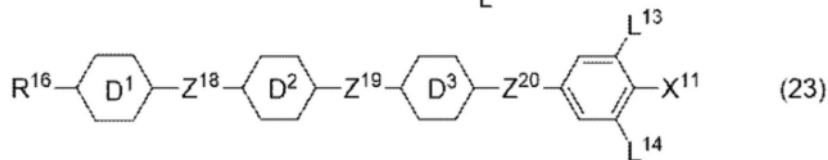
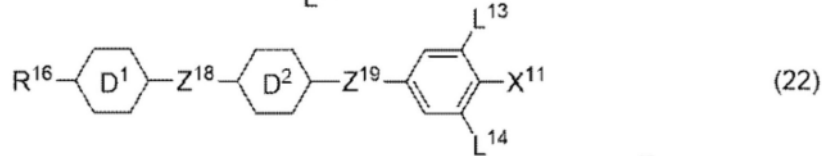
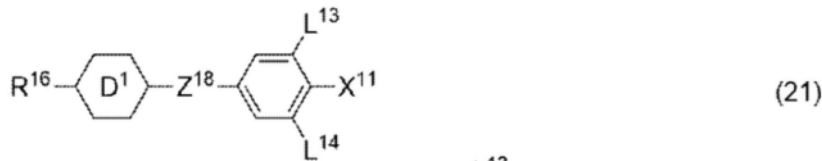
$S^{11}$ 为氢或甲基;

X为-CHF-或-CF<sub>2</sub>-;

j、k、m、n、p、q、r、及s独立地为0或1,k、m、n、及p的和为1或2,q、r、及s的和为0、1、2、或3,t为1、2、或3。

19. 根据权利要求16至18中任一项所述的液晶组合物,进而含有选自式(21)至式(23)所表示的化合物的群组中的至少一种化合物。

[化14]



式(21)至式(23)中,

$R^{16}$ 为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{16}$ 中,至少一个-CH<sub>2</sub>-可经-O-取代,至少一个氢可经氟取代;

$X^{11}$ 为氟、氯、-CF<sub>3</sub>、-CHF<sub>2</sub>、-CH<sub>2</sub>F、-OCF<sub>3</sub>、-OCHF<sub>2</sub>、-OCF<sub>2</sub>CHF<sub>2</sub>、或-OCF<sub>2</sub>CHF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>;

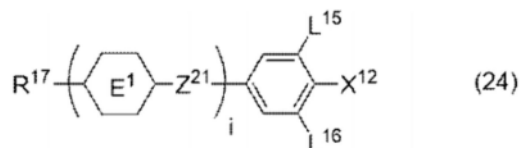
环D<sup>1</sup>、环D<sup>2</sup>、及环D<sup>3</sup>独立地为1,4-亚环己基、至少一个氢可经氟取代的1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、或嘧啶-2,5-二基;

$Z^{18}$ 、 $Z^{19}$ 、及 $Z^{20}$ 独立地为单键、-COO-、-CH<sub>2</sub>O-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-C≡C-、或-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-;

$L^{13}$ 及 $L^{14}$ 独立地为氢或氟。

20. 根据权利要求16至19中任一项所述的液晶组合物,进而含有选自式(24)所表示的化合物的群组中的至少一种化合物。

[化15]



式(24)中,

$R^{17}$ 为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{17}$ 中,至少一个-CH<sub>2</sub>-可经-O-取代,至少一个氢可经氟取代;

$X^{12}$ 为 $-C\equiv N$ 或 $-C\equiv C-C\equiv N$ ;

环 $E^1$ 为1,4-亚环己基、至少一个氢可经氟取代的1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、或嘧啶-2,5-二基;

$Z^{21}$ 为单键、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、或 $-C\equiv C-$ ;

$L^{15}$ 及 $L^{16}$ 独立地为氢或氟;

$i$ 为1、2、3、或4。

21. 一种液晶显示元件,包含如权利要求16至20中任一项所述的液晶组合物。

## 化合物、液晶组合物及液晶显示元件

### 技术领域

[0001] 本发明涉及一种具有咪唑环的液晶性化合物、液晶组合物及液晶显示元件。更详细而言,涉及一种具有咪唑环且介电各向异性为负的液晶性化合物、含有其的液晶组合物及包含所述组合物的液晶显示元件。

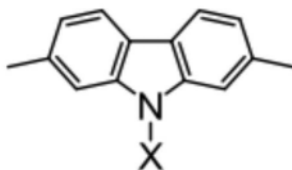
### 背景技术

[0002] 在液晶显示元件中,基于液晶分子的运行模式的分类为相变(phase change,PC)、扭转向列(twisted nematic,TN)、超扭转向列(super twisted nematic,STN)、电控双折射(electrically controlled birefringence,ECB)、光学补偿弯曲(optically compensated bend,OCB)、共面切换(in-plane switching,IPS)、垂直取向(vertical alignment,VA)、边缘场切换(fringe field switching,FFS)、电场感应光反应取向(field-induced photo-reactive alignment,FPA)等模式。基于元件的驱动方式的分类为无源矩阵(passive matrix,PM)与有源矩阵(active matrix,AM)。PM被分类为静态式(static)、多路复用式(multiplex)等,AM被分类为薄膜晶体管(thin film transistor,TFT)、金属-绝缘体-金属(metal insulator metal,MIM)等。

[0003] 在所述元件中封入液晶组合物。所述组合物的物性与元件的特性相关联。组合物中的物性的例子为对于热或光的稳定性、向列相的温度范围、粘度、光学各向异性、介电各向异性、比电阻、弹性常数等。组合物是将许多液晶性化合物混合来制备。化合物所需的物性为:对于水、空气、热、光等环境的高的稳定性,液晶相的宽广的温度范围,小的粘度,适当的光学各向异性,大的介电各向异性,适当的弹性常数,与其他液晶性化合物的良好的相容性等。优选为具有向列相的高的上限温度的化合物。优选为在向列相、近晶相等液晶相中具有低的下限温度的化合物。具有小的粘度的化合物有助于元件的短的响应时间。光学各向异性的适当的值依存于元件的运行模式的种类。在以低的电压驱动元件时优选为具有正或负且大的介电各向异性的化合物。在制备组合物时优选为具有与其他液晶性化合物的良好的相容性的化合物。有时也以冰点下的温度使用元件,因此优选为在低的温度下具有良好的相容性的化合物。

[0004] 迄今为止,合成有大量的液晶性化合物。目前仍在继续开发新的液晶性化合物。其原因在于:对于新颖的化合物,期待现有的化合物中不存在的良好物性。其原因在于:新颖的化合物有时也对组合物中的至少两个物性赋予适当的平衡。与下述具有二价基的化合物相关的报告例少。再者,下述二价基中,X为氢、或取代基。

[0005] [化1]

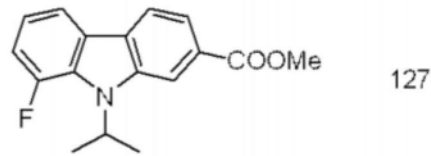
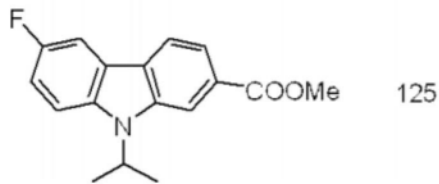
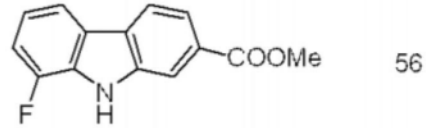
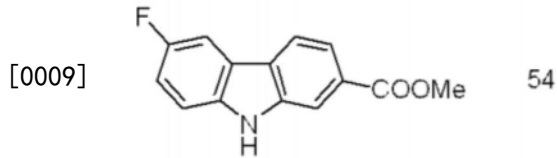
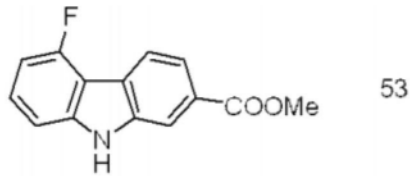


[0006]

[0007] 例如,专利文献1中,在41页的表4中公开有编号为53、54、及56的化合物,在45页的

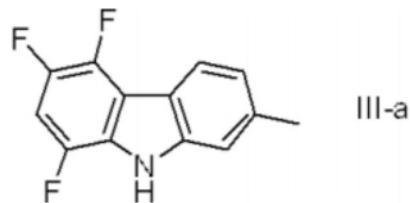
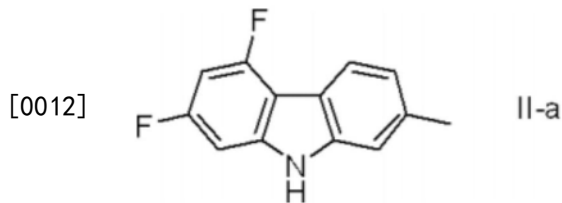
表8中公开有编号为125、及127的化合物。

[0008] [化2]



[0010] 专利文献2中,在10页中公开有实施例3的II-a化合物,在14页中公开有实施例7的III-a化合物。

[0011] [化3]



[0013] 现有技术文献

[0014] 专利文献

[0015] 专利文献1:国际公开第2007/018168号

[0016] 专利文献2:国际公开第2017/084231号

## 发明内容

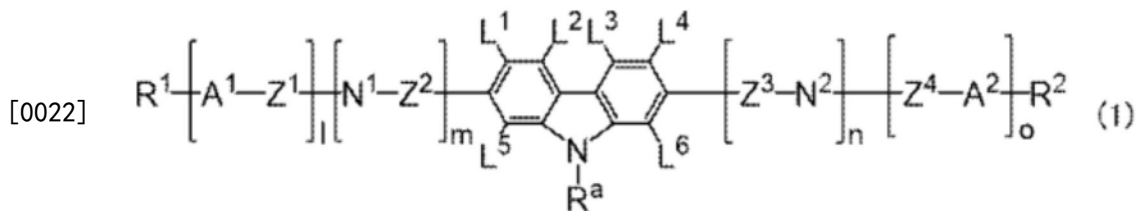
[0017] 发明所要解决的问题

[0018] 第一课题为提供一种液晶性化合物,其充分满足对于热或光的高的稳定性、高的透明点(或向列相的高的上限温度)、液晶相的低的下限温度、小的粘度、适当的光学各向异性、负且大的介电各向异性、适当的弹性常数、与其他液晶性化合物的良好的相容性等物性的至少一个。与类似的化合物相比较而言,提供一种具有负且大的介电各向异性的化合物。第二课题为提供一种液晶组合物,其含有所述化合物,并充分满足对于热或光的高的稳定性、向列相的高的上限温度、向列相的低的下限温度、小的粘度、适当的光学各向异性、负且大的介电各向异性、大的比电阻、适当的弹性常数等物性的至少一个。所述课题为提供一种关于至少两个物性而具有适当的平衡的液晶组合物。第三课题为提供一种液晶显示元件,其含有所述组合物,并具有可使用元件的广的温度范围、短的响应时间、大的电压保持率、低的阈电压、大的对比度比、小的闪烁率、及长寿命。

[0019] 解决问题的技术手段

[0020] 本发明涉及式(1)所表示的化合物、包含所述化合物的液晶组合物、及包含所述液晶组合物的液晶显示元件。

[0021] [化4]



[0023] 式(1)中,

[0024]  $R^1$ 为氢、或碳数1至15的烷基,所述 $R^1$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0025]  $R^2$ 为氢、氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-C\equiv C-C\equiv N$ 、或碳数1至15的烷基,所述 $R^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0026]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

[0027] 环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为碳数3至5的亚环烷基,所述环 $A^1$ 及环 $A^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 取代;

[0028] 环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或者9H-芴-2,7-二基,所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代;

[0029]  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键或碳数1至6的亚烷基,所述 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0030]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、 $L^4$ 、 $L^5$ 、及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0031] 在 $L^5$ 及 $L^6$ 均为氢时, $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0032] 在 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 均为氢时, $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0033]  $l$ 及 $o$ 独立地为0、或1, $m$ 及 $n$ 独立地为0、1、或2, $l$ 、 $m$ 、 $n$ 、及 $o$ 的和为0至4的整数;

[0034] 在 $l$ 为0时, $R^1$ 不会成为氢,在 $o$ 为0时, $R^2$ 不会成为氢。

[0035] 发明的效果

[0036] 第一优点为提供一种液晶性化合物,其充分满足对于热或光的高的稳定性、高的透点(或向列相的高的上限温度)、液晶相的低的下限温度、小的粘度、适当的光学各向异

性、负且大的介电各向异性、适当的弹性常数、与其他液晶性化合物的良好的相容性等物性的至少一个。与类似的化合物相比较而言,提供一种具有负且大的介电各向异性的化合物。第二优点为提供一种液晶组合物,其含有所述化合物,并充分满足对于热或光的高的稳定性、向列相的高的上限温度、向列相的低的下限温度、小的粘度、适当的光学各向异性、负且大的介电各向异性、大的比电阻、适当的弹性常数等物性的至少一个。所述优点为提供一种关于至少两个物性而具有适当的平衡的液晶组合物。第三优点为提供一种液晶显示元件,其包含所述组合物,并具有可使用元件的广的温度范围、短的响应时间、大的电压保持率、低的阈电压、大的对比度比、小的闪烁率、及长寿命。

### 具体实施方式

[0037] 所述说明书中的用语的使用方法为如下所述。有时将“液晶性化合物”、“液晶组合物”、及“液晶显示元件”的用语分别简称为“化合物”、“组合物”、及“元件”。“液晶性化合物”为具有向列相、近晶相等液晶相的化合物、以及虽不具有液晶相但出于调节上限温度、下限温度、粘度、介电各向异性那样的组合物的物性的目的而添加的化合物的总称。所述化合物具有1,4-亚环己基或1,4-亚苯基那样的六元环,其分子结构为棒状(rod like)。“液晶显示元件”为液晶显示面板及液晶显示模块的总称。“聚合性化合物”为出于使组合物中生成聚合物的目的而添加的化合物。具有烯基的液晶性化合物在其含义方面并非聚合性。

[0038] 液晶组合物是通过将多种液晶性化合物混合来制备。出于进一步调整物性的目的而在所述组合物中添加添加物。视需要添加聚合性化合物、聚合引发剂、聚合抑制剂、光学活性化合物、抗氧化剂、紫外线吸收剂、光稳定剂、热稳定剂、色素、及消泡剂那样的添加物。液晶性化合物或添加物是以此种顺序混合。即便在添加有添加物的情况下,液晶性化合物的比例(含量)也是由基于不含添加物的液晶组合物的重量的重量百分率(重量%)来表示。添加物的比例(添加量)是由基于不含添加物的液晶组合物的重量的重量百分率(重量%)来表示。即,液晶性化合物或添加物的比例是基于液晶性化合物的总重量而算出。有时也使用重量百万分率(ppm)。聚合引发剂及聚合抑制剂的比例是例外地基于聚合性化合物的重量来表示。

[0039] “透明点”是液晶性化合物中的液晶相-各向同性相的转变温度。“液晶相的下限温度”是液晶性化合物中的固体-液晶相(近晶相、向列相等)的转变温度。“向列相的上限温度”是液晶性化合物与母液晶的混合物或液晶组合物中的向列相-各向同性相的转变温度,有时简称为“上限温度”。有时将“向列相的下限温度”简称为“下限温度”。“提高介电各向异性”的表达在介电各向异性为正的组合物时,是指其值正向增加,在介电各向异性为负的组合物时,是指其值负向增加。“电压保持率大”是指元件在初始阶段不仅在室温下具有大的电压保持率,而且在接近上限温度的温度下也具有大的电压保持率,并且在长时间使用后不仅在室温下具有大的电压保持率,而且在接近上限温度的温度下也具有大的电压保持率。组合物或元件中,有时在经时变化试验(包含加速劣化试验)的前后研究特性。

[0040] 有时将式(1)所表示的化合物简称为化合物(1)。有时将选自式(1)所表示的化合物的群组中的至少一种化合物简称为化合物(1)。“化合物(1)”是指式(1)所表示的一种化合物、两种化合物的混合物、或者三种以上的化合物的混合物。这些规则也适用于其他式所表示的化合物。式(1)至式(15)中,由六边形包围的A<sup>1</sup>、B<sup>1</sup>、C<sup>1</sup>等记号分别对应于环A<sup>1</sup>、环B<sup>1</sup>、环

C<sup>1</sup>等环。六边形表示环己烷或苯那样的六元环。六边形有时表示萘那样的缩合环、或金刚烷那样的交联环。

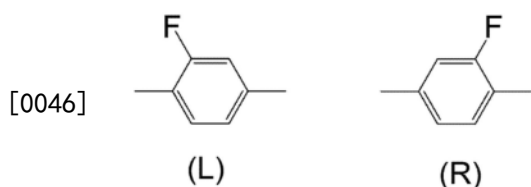
[0041] 在成分化合物的化学式中,将末端基R<sup>11</sup>的记号用于多种化合物。这些化合物中,任意的两个R<sup>11</sup>所表示的两个基可相同,或者也可不同。例如,有化合物(2)的R<sup>11</sup>为乙基,且化合物(3)的R<sup>11</sup>为乙基的情况。也有化合物(2)的R<sup>11</sup>为乙基,且化合物(3)的R<sup>11</sup>为丙基的情况。所述规则也适用于R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、Z<sup>11</sup>等记号。化合物(15)中,在i为2时,存在两个环E<sup>1</sup>。在所述化合物中,两个环E<sup>1</sup>所表示的两个基可相同,或者也可不同。在i大于2时,也适用于任意的两个环E<sup>1</sup>。所述规则也应用于其他记号。

[0042] “至少一个‘A’”的表达是指‘A’的数量为任意。“至少一个‘A’可经‘B’取代”的表达是指:在‘A’的数量为一个时,‘A’的位置为任意,在‘A’的数量为两个以上时,这些的位置也可无限制地选择。所述规则也适用于“至少一个‘A’经‘B’取代”的表达。“至少一个‘A’可经‘B’、‘C’、或‘D’取代”这一表达是指包含:任意的‘A’经‘B’取代的情况,任意的‘A’经‘C’取代的情况,及任意的‘A’经‘D’取代的情况,进而多个‘A’经‘B’、‘C’、和/或‘D’的至少两个取代的情况。例如,“至少一个-CH<sub>2</sub>-可经-0-或-CH=CH-取代的烷基”包含:烷基、烷氧基、烷氧基烷基、烯基、烷氧基烯基、烯基氧基烷基。再者,连续的两个-CH<sub>2</sub>-经-0-取代而变成-0-0-那样的情况不优选。烷基等中,甲基部分(-CH<sub>2</sub>-H)的-CH<sub>2</sub>-经-0-取代而成为-0-H的情况也不优选。

[0043] 有时使用“R<sup>11</sup>及R<sup>12</sup>独立地为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述烷基及烯基中,至少一个-CH<sub>2</sub>-可经-0-取代,这些基中,至少一个氢可经氟取代”的表达。所述表达中,“这些基中”可如文语那样进行解释。所述表达中,“这些基”是指烷基、烯基、烷氧基、烯基氧基等。即,“这些基”表示“这些基中”的用语之前所记载的所有基。所述常识性的解释也适用于“这些一价基中”或“这些二价基中”的用语。例如,“这些一价基”表示“这些一价基中”的用语之前所记载的所有基。

[0044] 卤素是指氟、氯、溴、及碘。优选的卤素为氟及氯。进而优选的卤素为氟。液晶性化合物的烷基为直链状或分支状,且不含环状烷基。直链状烷基一般优于分支状烷基。这些情况对于烷氧基、烯基等末端基也相同。为了提高上限温度,与1,4-亚环己基相关的立体构型是反式优于顺式。2-氟-1,4-亚苯基是指下述的两种二价基。化学式中,氟可朝左(L),也可朝右(R)。所述规则也适用于四氢吡喃-2,5-二基那样的通过自环中去除两个氢而生成的非对称的二价基。

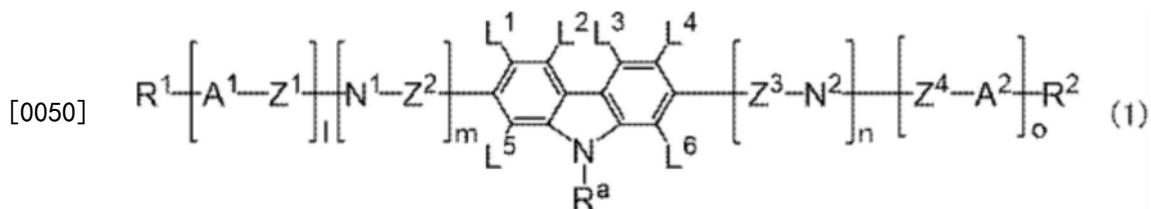
[0045] [化5]



[0047] 本发明为下述项等。

[0048] 项1.一种化合物,其由式(1)表示,

[0049] [化6]



[0051] 式(1)中,

[0052]  $R^1$ 为氢、或碳数1至15的烷基,所述 $R^1$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0053]  $R^2$ 为氢、氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-C\equiv C-C\equiv N$ 、或碳数1至15的烷基,所述 $R^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0054]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

[0055] 环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为碳数3至5的亚环烷基,所述环 $A^1$ 及环 $A^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 取代;

[0056] 环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或9H-芴-2,7-二基,所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代;

[0057]  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键或碳数1至6的亚烷基,所述 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0058]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、 $L^4$ 、 $L^5$ 、及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0059] 在 $L^5$ 及 $L^6$ 均为氢时, $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

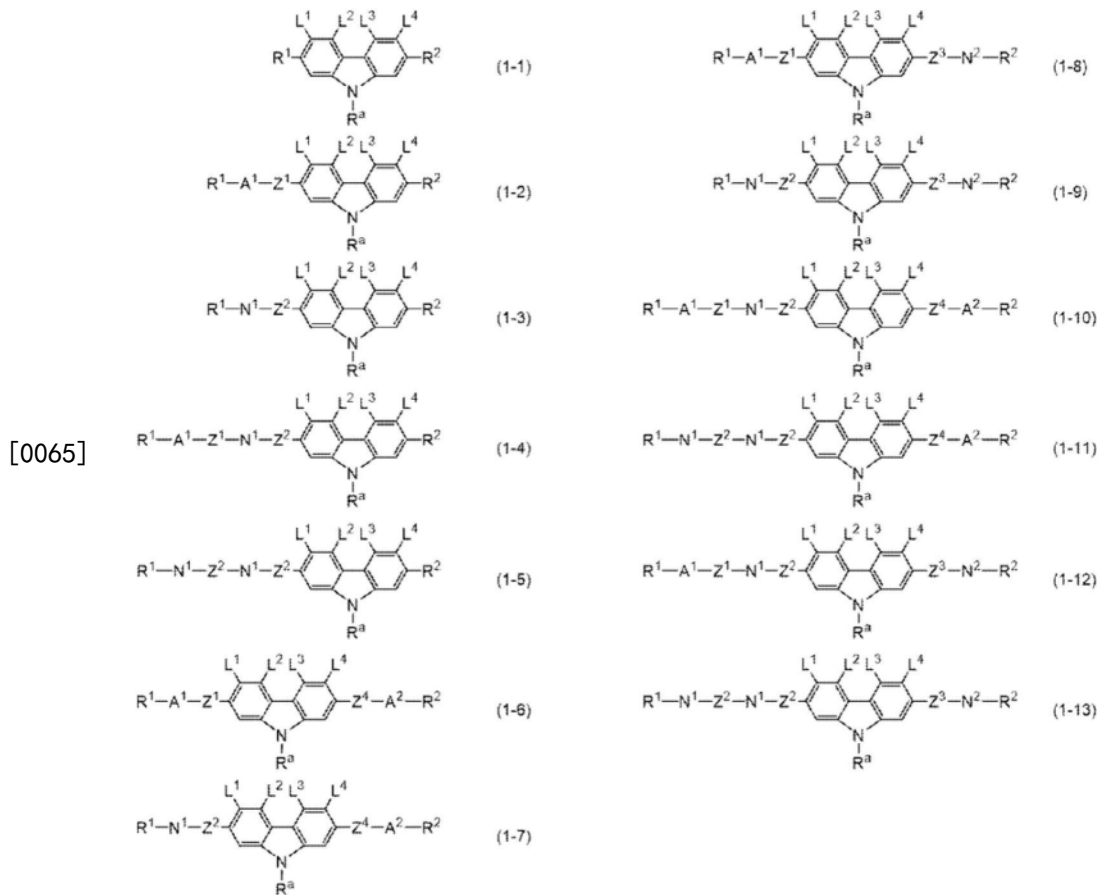
[0060] 在 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 均为氢时, $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0061]  $l$ 及 $o$ 独立地为0、或1, $m$ 及 $n$ 独立地为0、1、或2, $l$ 、 $m$ 、 $n$ 、及 $o$ 的和为0至4的整数;

[0062] 在 $l$ 为0时, $R^1$ 不会成为氢,在 $o$ 为0时, $R^2$ 不会成为氢。

[0063] 项2.根据项1所述的化合物,其由式(1-1)至式(1-13)表示,

[0064] [化7]



[0066] 式(1-1)至式(1-13)中,

[0067]  $R^1$ 为氢、碳数1至15的烷基、碳数1至14的烷氧基、碳数2至14的烷氧基烷基、碳数2至15的烯基、或碳数2至14的烯基氧基;

[0068]  $R^2$ 为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-C\equiv N$ 、碳数1至15的烷基、碳数1至14的烷氧基、碳数2至14的烷氧基烷基、碳数2至15的烯基、或碳数2至14的烯基氧基;

[0069]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

[0070] 环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为碳数3至5的亚环烷基,所述环 $A^1$ 及环 $A^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 取代;

[0071] 环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或9H-芴-2,7-二基,所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代;

[0072]  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键或碳数1至6的亚烷基,所述 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0073]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ , $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0074] 式(1-1)、式(1-3)、式(1-5)、式(1-7)、式(1-9)、式(1-11)、及式(1-13)中, $R^1$ 不会成为氢,式(1-1)至式(1-5)、式(1-8)、式(1-9)、式(1-12)、及式(1-13)中, $R^2$ 不会成为氢。

[0075] 项3.根据项2所述的化合物,其中所述式(1-1)至式(1-13)中,

[0076]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为氢、碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

[0077]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

[0078] 环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为1,2-亚环丙基、1,3-亚环丁基、或1,3-亚环戊基;

[0079] 环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、呋喃-2,4-二基、呋喃-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并呋喃-2,5-二基、苯并呋喃-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、或苯并[b]噻吩-2,6-二基,所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代;

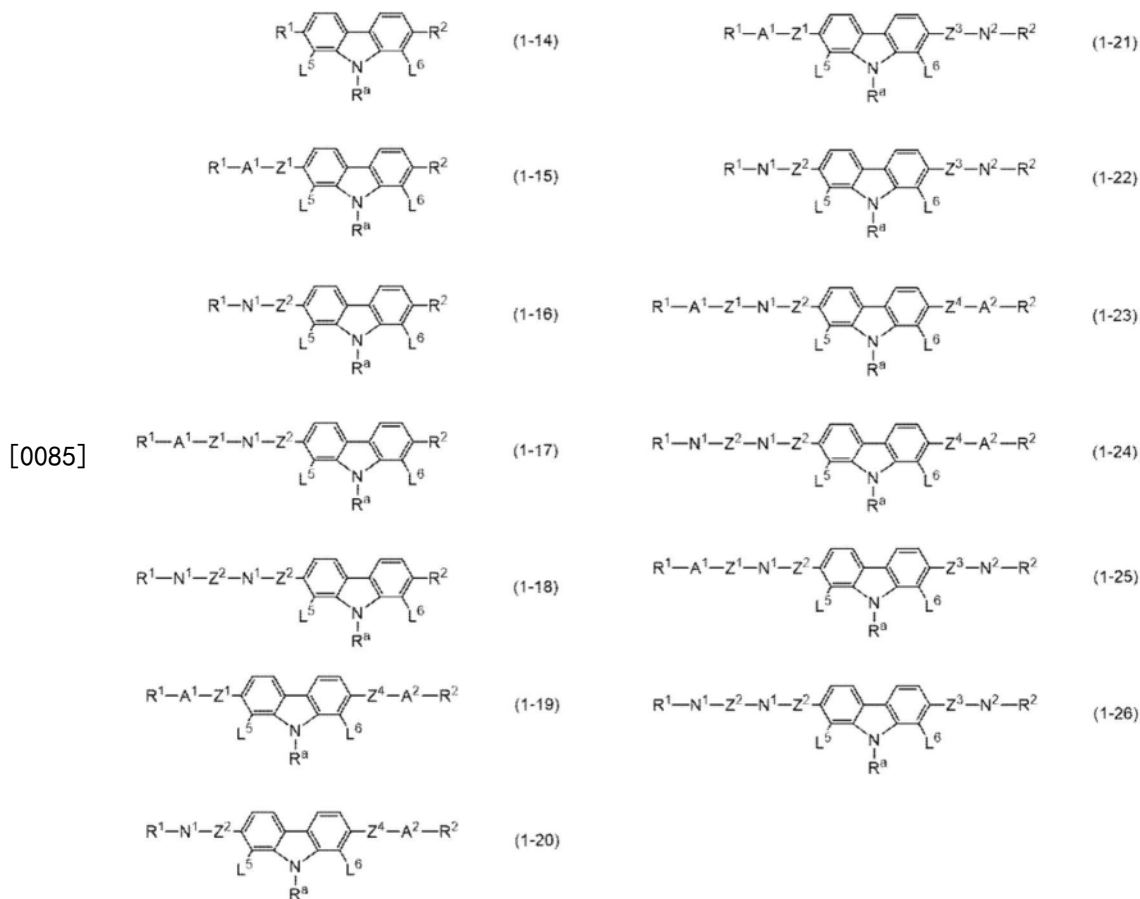
[0080]  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CH-$ 、 $-CH=CF-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_2COO-$ 、 $-(CH_2)_2OCO-$ 、 $-OCO(CH_2)_2-$ 、 $-COO(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ 、 $-(CH_2)_2OCF_2-$ 、 $-OCF_2(CH_2)_2-$ 、 $-CF_2O(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ;

[0081]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ , $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0082] 式(1-1)、式(1-3)、式(1-5)、式(1-7)、式(1-9)、式(1-11)、及式(1-13)中, $R^1$ 不会成为氢,式(1-1)至式(1-5)、式(1-8)、式(1-9)、式(1-12)、及式(1-13)中, $R^2$ 不会成为氢。

[0083] 项4.根据项1所述的化合物,其由式(1-14)至式(1-26)表示,

[0084] [化8]



[0086] 式(1-14)至式(1-26)中,

[0087]  $R^1$ 为氢、碳数1至15的烷基、碳数1至14的烷氧基、碳数2至14的烷氧基烷基、碳数2至15的烯基、或碳数2至14的烯基氧基;

[0088]  $R^2$ 为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-C\equiv N$ 、碳数1至15的烷基、碳数1至14的烷氧基、碳数2至14的烷氧基烷基、碳数2至15的烯基、或碳数2至14的烯基氧基;

[0089]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

[0090] 环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为碳数3至5的亚环烷基,所述环 $A^1$ 及环 $A^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 取代;

[0091] 环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或9H-芴-2,7-二基,所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代;

[0092]  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键或碳数1至6的亚烷基,所述 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 、 $-S-$ 、或 $-CO-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 或 $-C\equiv C-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代;

[0093]  $L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ , $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0094] 式(1-14)、式(1-16)、式(1-18)、式(1-20)、式(1-22)、式(1-24)、及式(1-26)中, $R^1$ 不会成为氢,式(1-14)至式(1-18)、式(1-21)、式(1-22)、式(1-25)、及式(1-26)中, $R^2$ 不会成为氢。

[0095] 项5.根据项4所述的化合物,其中所述式(1-14)至式(1-26)中,

[0096]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为氢、碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

[0097]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

[0098] 环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为1,2-亚环丙基、1,3-亚环丁基、或1,3-亚环戊基;

[0099] 环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、咪唑-2,4-二基、咪唑-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪唑-2,5-二基、苯并咪唑-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、或苯并[b]噻吩-2,6-二基,所述环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代;

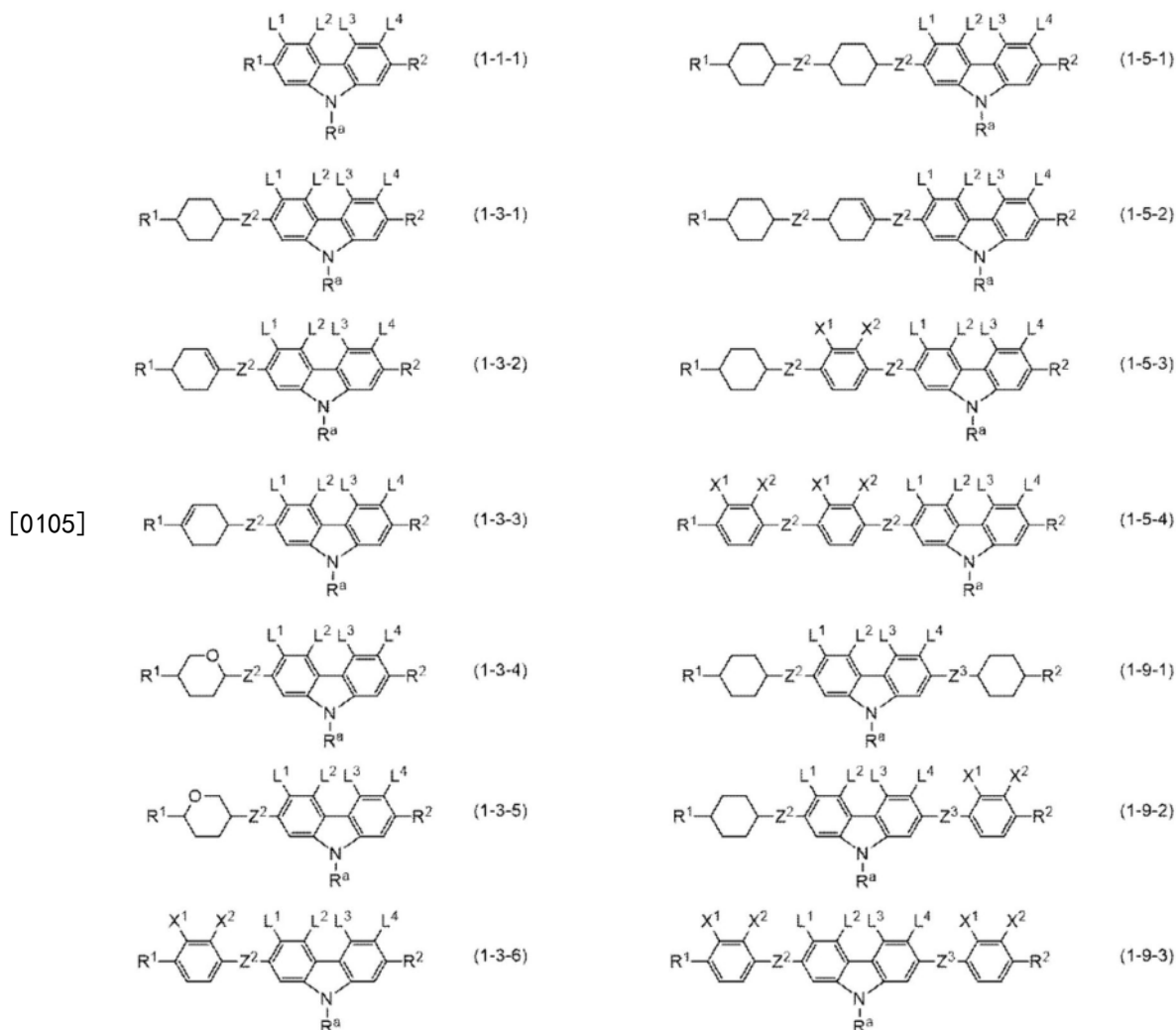
[0100]  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CH-$ 、 $-CH=CF-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_2COO-$ 、 $-(CH_2)_2OCO-$ 、 $-OCO(CH_2)_2-$ 、 $-COO(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ 、 $-(CH_2)_2OCF_2-$ 、 $-OCF_2(CH_2)_2-$ 、 $-CF_2O(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ;

[0101]  $L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ , $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、或 $-C\equiv N$ ;

[0102] 式(1-14)、式(1-16)、式(1-18)、式(1-20)、式(1-22)、式(1-24)、及式(1-26)中, $R^1$ 不会成为氢,式(1-14)至式(1-18)、式(1-21)、式(1-22)、式(1-25)、及式(1-26)中, $R^2$ 不会成为氢。

[0103] 项6.根据项1至项3中任一项所述的化合物,其由式(1-1-1)、式(1-3-1)至式(1-3-6)、式(1-5-1)至式(1-5-4)、或式(1-9-1)至式(1-9-3)表示,

[0104] [化9]



[0106] 式(1-1-1)、式(1-3-1)至式(1-3-6)、式(1-5-1)至式(1-5-4)、及式(1-9-1)至式(1-9-3)中,

[0107]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

[0108]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

[0109]  $Z^2$ 及 $Z^3$ 独立地为单键、-O-、-COO-、-OCO-、-CH<sub>2</sub>O-、-OCH<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-C≡C-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>COO-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCO-、-OCO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-COO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>O-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCF<sub>2</sub>-、-OCF<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>O-、-O(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-、-CH=CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CH=CH-、-CH=CH-CH<sub>2</sub>O-、或-OCH<sub>2</sub>-CH=CH-;

[0110]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、-CF<sub>3</sub>、-CHF<sub>2</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-OCHF<sub>2</sub>、或-OCH<sub>2</sub>F,  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、-CF<sub>3</sub>、-CHF<sub>2</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-OCHF<sub>2</sub>、或-OCH<sub>2</sub>F;

[0111]  $X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

[0112] 项7. 根据项6所述的化合物, 其中所述式(1-1-1)、式(1-3-1)至式(1-3-6)、式(1-5-1)至式(1-5-4)、式(1-9-1)至式(1-9-3)中,

[0113]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至10的烯基氧基;

[0114]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基;

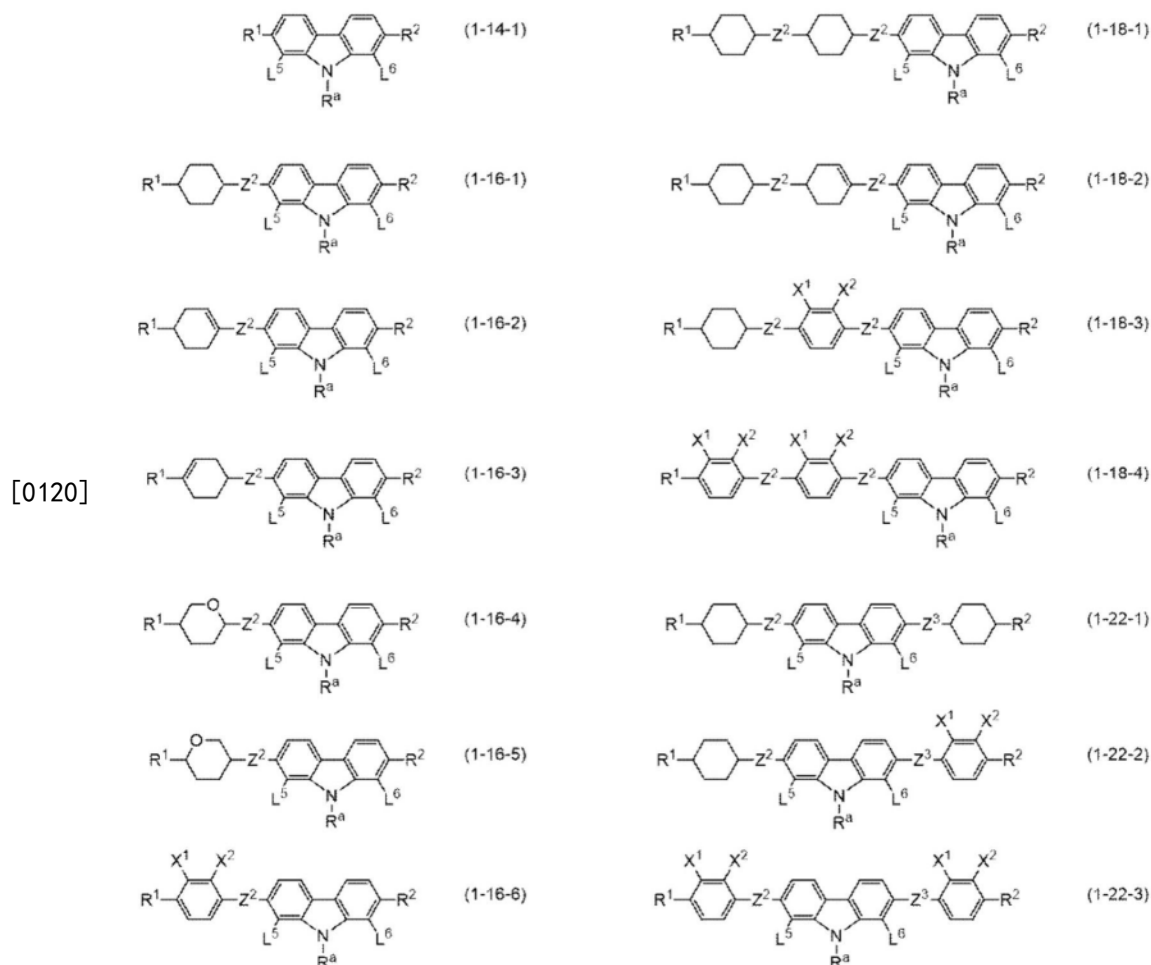
[0115]  $Z^2$ 及 $Z^3$ 独立地为单键、-COO-、-OCO-、-CH<sub>2</sub>O-、-OCH<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>O-、-O(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-、-CH=CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CH=CH-、-CH=CH-CH<sub>2</sub>O-、或-OCH<sub>2</sub>-CH=CH-；

[0116]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、-CF<sub>3</sub>或-OCF<sub>3</sub>， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、-CF<sub>3</sub>或-OCF<sub>3</sub>， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少两个为氢；

[0117]  $X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

[0118] 项8. 根据项1、项4、及项5中任一项所述的化合物，其由式(1-14-1)、式(1-16-1)至式(1-16-6)、式(1-18-1)至式(1-18-4)、或式(1-22-1)至式(1-22-3)表示，

[0119] [化10]



[0121] 式(1-14-1)、式(1-16-1)至式(1-16-6)、式(1-18-1)至式(1-18-4)、及式(1-22-1)至式(1-22-3)中，

[0122]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

[0123]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基；

[0124]  $Z^2$ 及 $Z^3$ 独立地为单键、-O-、-COO-、-OCO-、-CH<sub>2</sub>O-、-OCH<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-C≡C-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>COO-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCO-、-OCO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-COO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>O-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCF<sub>2</sub>-、-OCF<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>O-、-O(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-、-CH=CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CH=CH-、-CH=CH-CH<sub>2</sub>O-、或-OCH<sub>2</sub>-CH=CH-；

[0125]  $L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ， $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ；

[0126]  $X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

[0127] 项9. 根据项8所述的化合物，其中所述式(1-14-1)、式(1-16-1)至式(1-16-6)、式(1-18-1)至式(1-18-4)、及式(1-22-1)至式(1-22-3)中，

[0128]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

[0129]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基；

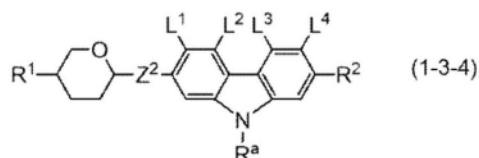
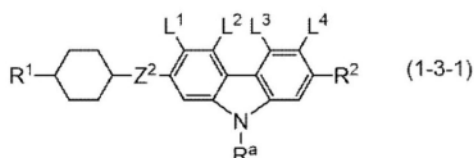
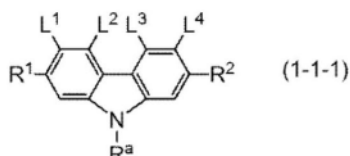
[0130]  $Z^2$ 及 $Z^3$ 独立地为单键、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ；

[0131]  $L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ， $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ ；

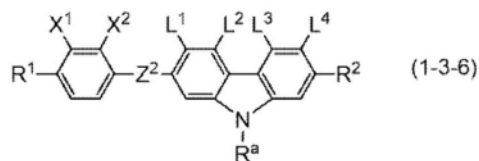
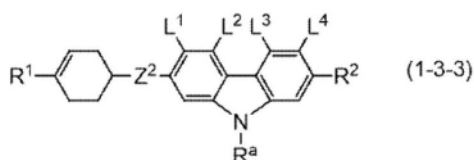
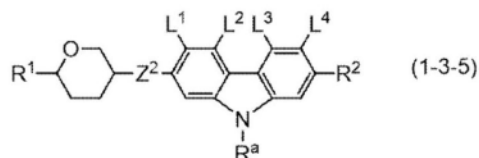
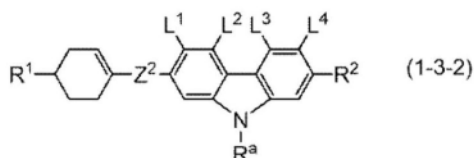
[0132]  $X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

[0133] 项10. 根据项1至项3、项6、及项7中任一项所述的化合物，其由式(1-1-1)、或式(1-3-1)至式(1-3-6)表示，

[0134] [化11]



[0135]



[0136] 式(1-1-1)、及式(1-3-1)至式(1-3-6)中，

[0137]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

[0138]  $R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基；

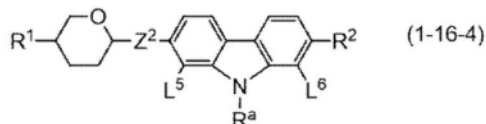
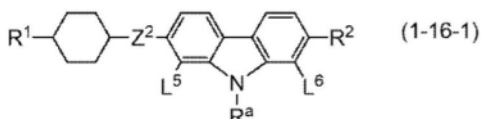
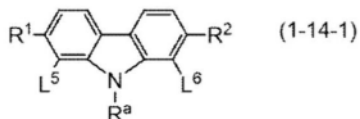
[0139]  $Z^2$ 为单键、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ；

[0140]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ， $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少两个为氢；

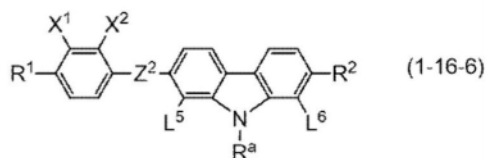
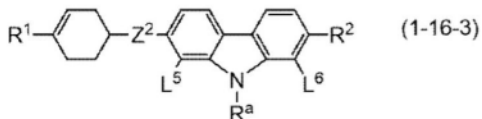
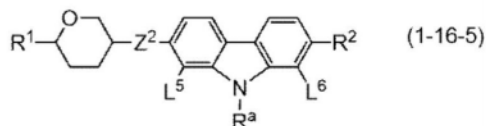
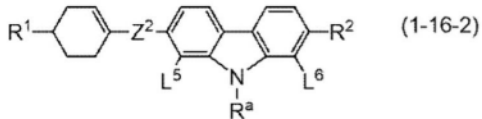
[0141]  $X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

[0142] 项11. 根据项1、项4、项5、项8、及项9中任一项所述的化合物，其由式(1-14-1)、或式(1-16-1)至式(1-16-6)表示，

[0143] [化12]



[0144]



[0145] 式(1-14-1)、及式(1-16-1)至式(1-16-6)中，

[0146]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基；

[0147]  $R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基；

[0148]  $Z^2$ 为单键、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-CH_2O-$ 、或 $-OCH_2-CH=CH-$ ；

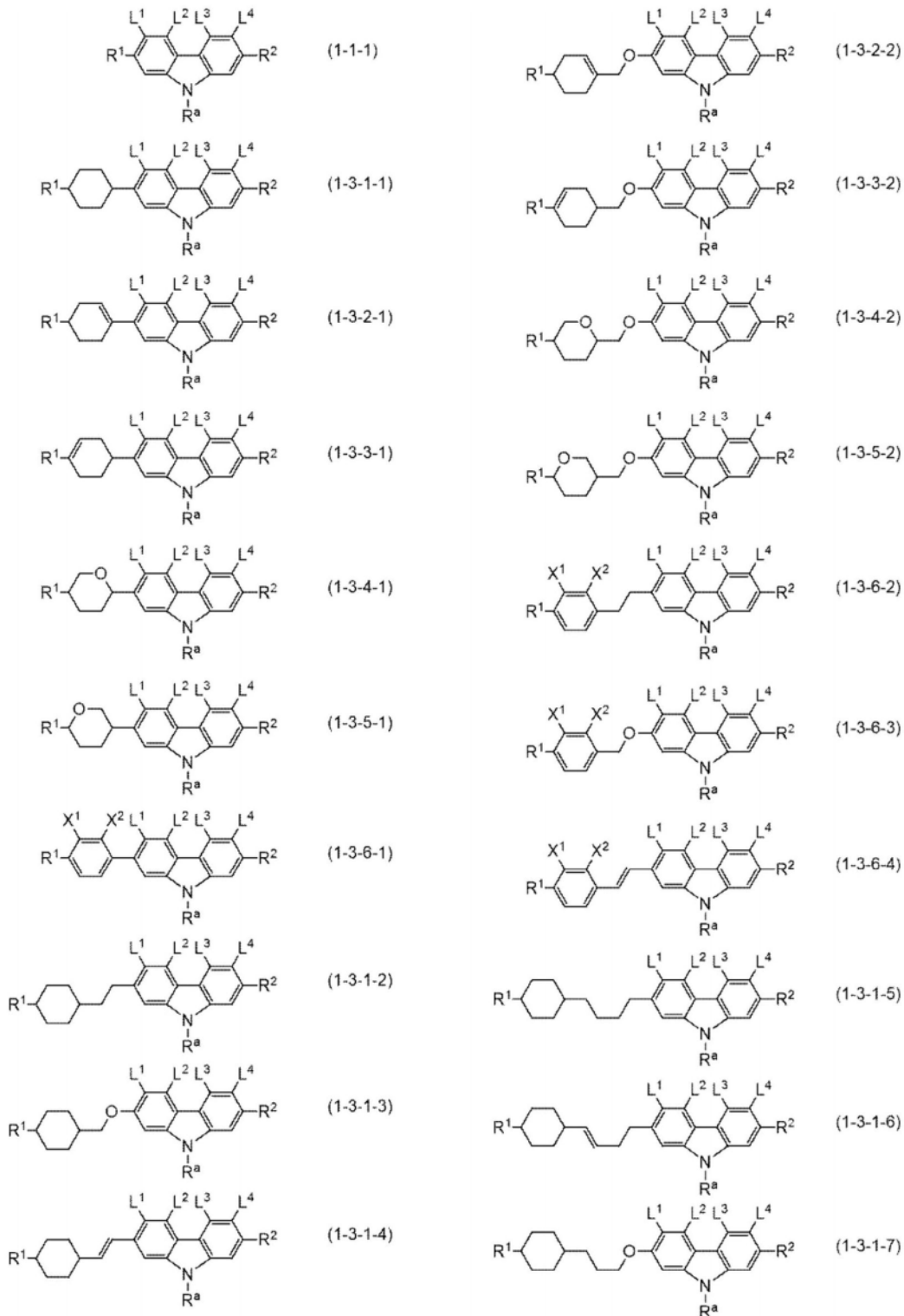
[0149]  $L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ， $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ；

[0150]  $X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢、氟、或氯。

[0151] 项12. 根据项1至项3、项6、项7、及项10中任一项所述的化合物，其由式(1-1-1)、式(1-3-1-1)至式(1-3-1-7)、式(1-3-2-1)、式(1-3-2-2)、式(1-3-3-1)、式(1-3-3-2)、式(1-3-4-1)、式(1-3-4-2)、式(1-3-5-1)、式(1-3-5-2)、或式(1-3-6-1)至式(1-3-6-4)表示，

[0152] [化13]

[0153]



[0154] 式(1-1-1)、式(1-3-1-1)至式(1-3-1-7)、式(1-3-2-1)、式(1-3-2-2)、式(1-3-3-1)、式(1-3-3-2)、式(1-3-4-1)、式(1-3-4-2)、式(1-3-5-1)、式(1-3-5-2)、及式(1-3-6-1)至式(1-3-6-4)中,

[0155]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

[0156]  $R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基;

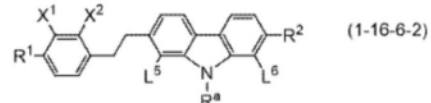
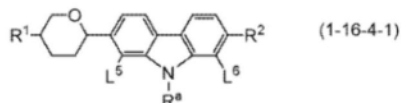
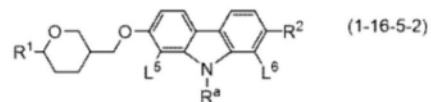
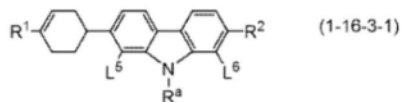
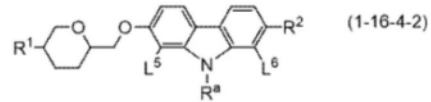
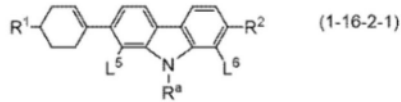
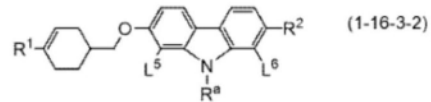
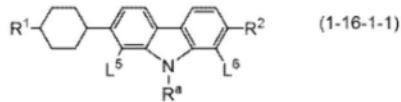
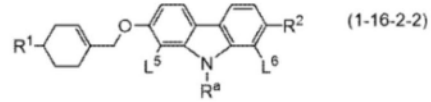
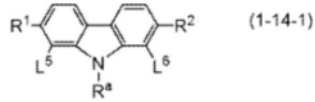
[0157]  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 独立地为氢、氟、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ,  $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少两个为氟、 $-CF_3$ 、

或-OCF<sub>3</sub>, L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>的至少一个为氢;

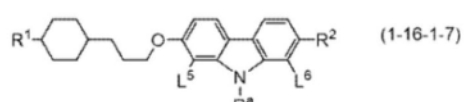
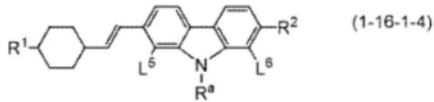
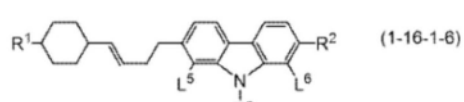
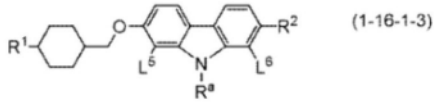
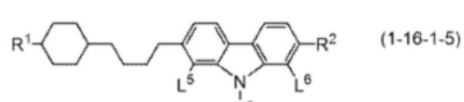
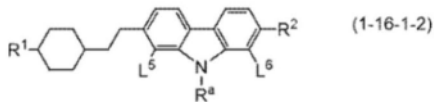
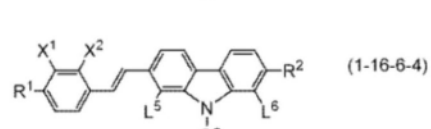
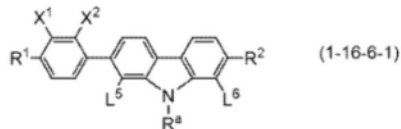
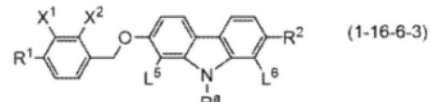
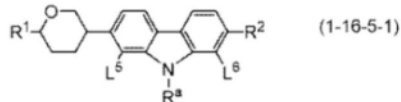
[0158] X<sup>1</sup>及X<sup>2</sup>独立地为氢或氟。

[0159] 项13. 根据项1、项4、项5、项8、项9、及项11中任一项所述的化合物, 其由式(1-14-1)、式(1-16-1-1)至式(1-16-1-7)、式(1-16-2-1)、式(1-16-2-2)、式(1-16-3-1)、式(1-16-3-2)、式(1-16-4-1)、式(1-16-4-2)、式(1-16-5-1)、式(1-16-5-2)、或式(1-16-6-1)至式(1-16-6-4)表示,

[0160] [化14]



[0161]



[0162] 式(1-14-1-1)、式(1-16-1-1)至式(1-16-1-7)、式(1-16-2-1)、式(1-16-2-2)、式(1-16-3-1)、式(1-16-3-2)、式(1-16-4-1)、式(1-16-4-2)、式(1-16-5-1)、式(1-16-5-2)、

及式(1-16-6-1)至式(1-16-6-4)中,

[0163]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至10的烷基、碳数1至9的烷氧基、碳数2至9的烷氧基烷基、碳数2至10的烯基、或碳数2至9的烯基氧基;

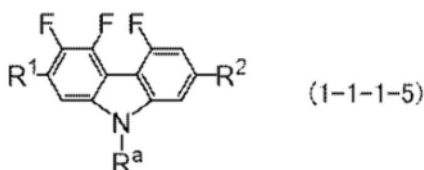
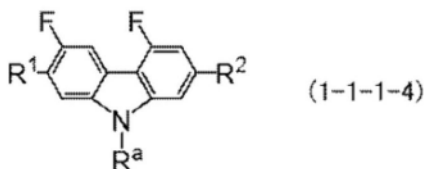
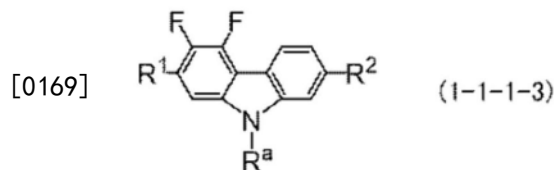
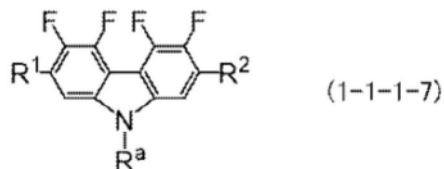
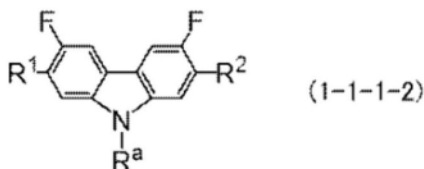
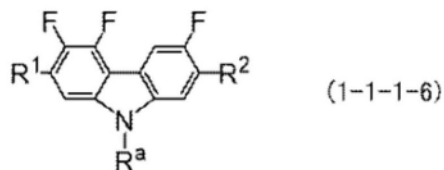
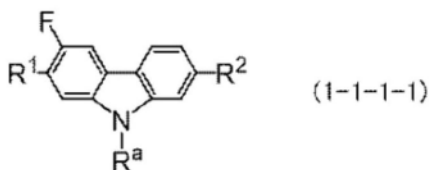
[0164]  $R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基;

[0165]  $L^5$ 及 $L^6$ 独立地为氢、氟、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ,  $L^5$ 及 $L^6$ 的至少一个为氟、 $-CF_3$ 、或 $-OCF_3$ ;

[0166]  $X^1$ 及 $X^2$ 独立地为氢或氟。

[0167] 项14. 根据项1至项3、项6、项7、项10、及项12中任一项所述的化合物, 其由式(1-1-1)至式(1-1-1-7)表示,

[0168] [化15]



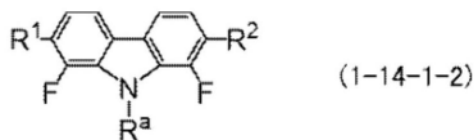
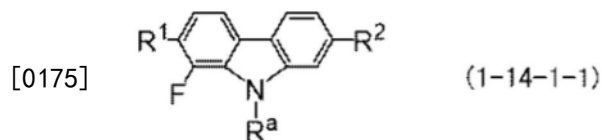
[0170] 式(1-1-1-1)至式(1-1-1-7)中,

[0171]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至7的烷基、碳数1至6的烷氧基、碳数2至6的烷氧基烷基、碳数2至7的烯基、或碳数2至7的烯基氧基。

[0172]  $R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基。

[0173] 项15. 根据项1、项4、项5、项8、项9、项11、及项13中任一项所述的化合物, 其由式(1-14-1-1)、或式(1-14-1-2)表示,

[0174] [化16]



[0176] 式(1-14-1-1)、或式(1-14-1-2)中,

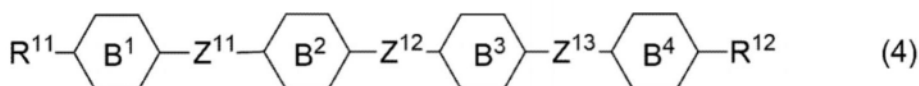
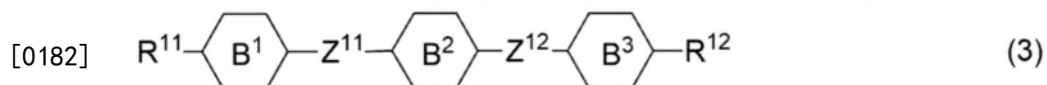
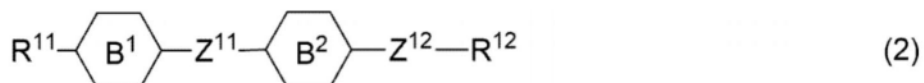
[0177]  $R^1$ 及 $R^2$ 独立地为碳数1至7的烷基、碳数1至6的烷氧基、碳数2至6的烷氧基烷基、碳数2至7的烯基、或碳数2至7的烯基氧基。

[0178]  $R^a$ 为氢、碳数1至4的直链烷基、或碳数3或4的分支链烷基。

[0179] 项16.一种液晶组合物,含有根据项1至项15中任一项所述的化合物的至少一种。

[0180] 项17.根据项16所述的液晶组合物,含有选自式(2)至式(4)所表示的化合物的群组中的至少一种化合物,

[0181] [化17]



[0183] 式(2)至式(4)中,

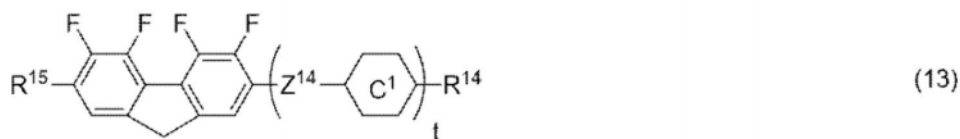
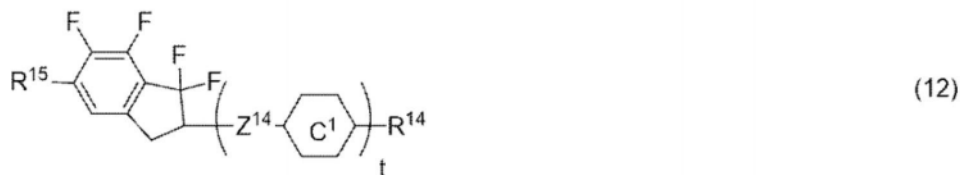
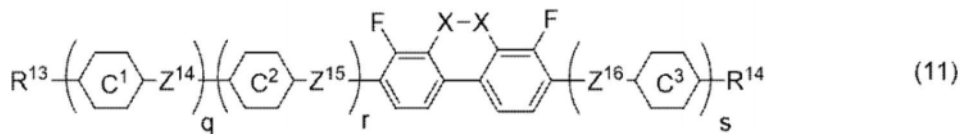
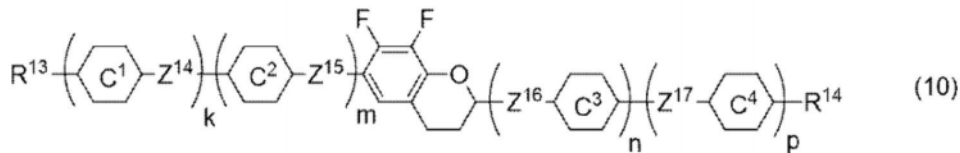
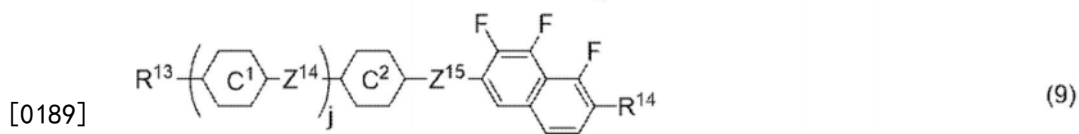
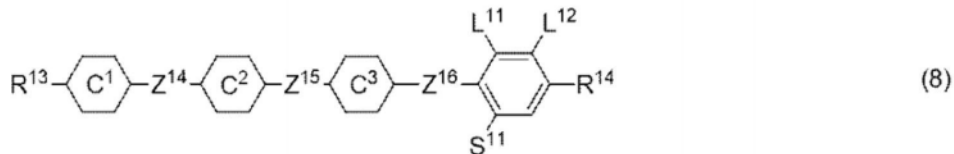
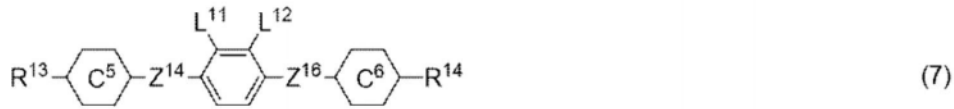
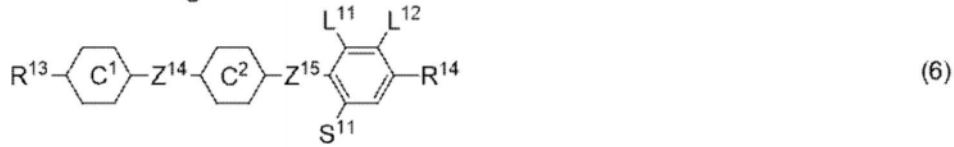
[0184]  $R^{11}$ 及 $R^{12}$ 独立地为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{11}$ 及 $R^{12}$ 中,至少一个 $-\text{CH}_2-$ 可经 $-\text{O}-$ 取代,至少一个氢可经氟取代;

[0185] 环 $\text{B}^1$ 、环 $\text{B}^2$ 、环 $\text{B}^3$ 、及环 $\text{B}^4$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚苯基、2-氟-1,4-亚苯基、2,5-二氟-1,4-亚苯基、或嘧啶-2,5-二基;

[0186]  $Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 、及 $Z^{13}$ 独立地为单键、 $-\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、或 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 。

[0187] 项18.根据项16或项17所述的液晶组合物,进而含有选自式(5)至式(13)所表示的化合物的群组中的至少一种化合物,

[0188] [化18]



[0190] 式(5)至式(13)中,

[0191]  $\text{R}^{13}$ 及 $\text{R}^{14}$ 独立地为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $\text{R}^{13}$ 及 $\text{R}^{14}$ 中,至少一个 $-\text{CH}_2-$ 可经 $-0-$ 取代,至少一个氢可经氟取代;

[0192]  $\text{R}^{15}$ 为氢、氟、碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $\text{R}^{15}$ 中,至少一个 $-\text{CH}_2-$ 可经 $-0-$ 取代,至少一个氢可经氟取代;

[0193] 环 $\text{C}^1$ 、环 $\text{C}^2$ 、环 $\text{C}^3$ 、及环 $\text{C}^4$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、至少一个氢可经氟取代的1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二基、或十氢萘-2,6-二基;

[0194] 环 $\text{C}^5$ 及环 $\text{C}^6$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二基、或十氢萘-2,6-二基;

[0195]  $\text{Z}^{14}$ 、 $\text{Z}^{15}$ 、 $\text{Z}^{16}$ 、及 $\text{Z}^{17}$ 独立地为单键、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、或 $-\text{OCF}_2-$

$(\text{CH}_2)_2^-$ ;

[0196]  $L^{11}$ 及 $L^{12}$ 独立地为氟或氯;

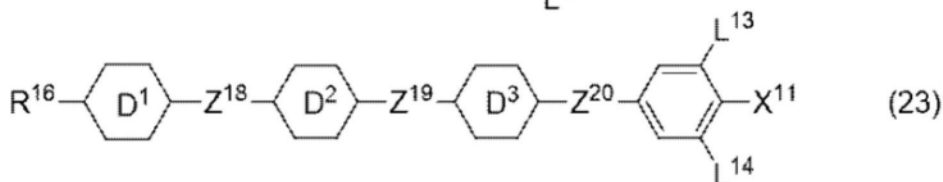
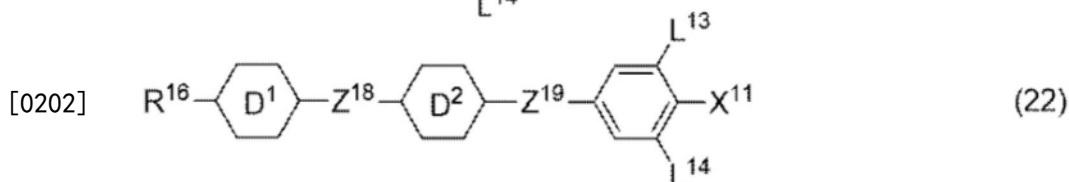
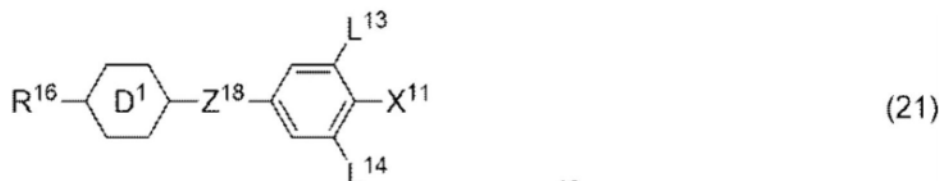
[0197]  $S^{11}$ 为氢或甲基;

[0198]  $X$ 为 $-\text{CHF}-$ 或 $-\text{CF}_2^-$ ;

[0199]  $j$ 、 $k$ 、 $m$ 、 $n$ 、 $p$ 、 $q$ 、 $r$ 、及 $s$ 独立地为0或1,  $k$ 、 $m$ 、 $n$ 、及 $p$ 的和为1或2,  $q$ 、 $r$ 、及 $s$ 的和为0、1、2、或3,  $t$ 为1、2、或3。

[0200] 项19. 根据项16至项18中任一项所述的液晶组合物, 进而含有选自式(21)至式(23)所表示的化合物的群组中的至少一种化合物,

[0201] [化19]



[0203] 式(21)至式(23)中,

[0204]  $R^{16}$ 为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基, 所述 $R^{16}$ 中, 至少一个 $-\text{CH}_2-$ 可经 $-\text{O}-$ 取代, 至少一个氢可经氟取代;

[0205]  $X^{11}$ 为氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、或 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2\text{CF}_3$ ;

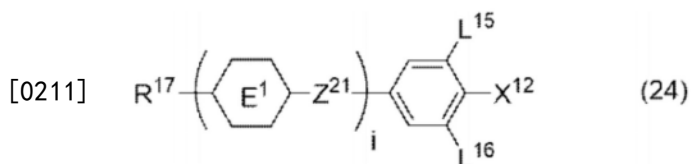
[0206] 环 $D^1$ 、环 $D^2$ 、及环 $D^3$ 独立地为1,4-亚环己基、至少一个氢可经氟取代的1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、或嘧啶-2,5-二基;

[0207]  $Z^{18}$ 、 $Z^{19}$ 、及 $Z^{20}$ 独立地为单键、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、或 $-(\text{CH}_2)_4-$ ;

[0208]  $L^{13}$ 及 $L^{14}$ 独立地为氢或氟。

[0209] 项20. 根据项16至项19中任一项所述的液晶组合物, 进而含有选自式(24)所表示的化合物的群组中的至少一种化合物,

[0210] [化20]



[0212] 式(24)中,

[0213]  $R^{17}$ 为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基, 所述 $R^{17}$ 中, 至少一个 $-\text{CH}_2-$ 可经 $-\text{O}-$ 取代, 至少一个氢可经氟取代;

[0214]  $X^{12}$ 为 $-C\equiv N$ 或 $-C\equiv C-C\equiv N$ ;

[0215] 环 $E^1$ 为1,4-亚环己基、至少一个氢可经氟取代的1,4-亚苯基、四氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、或嘧啶-2,5-二基;

[0216]  $Z^{21}$ 为单键、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、或 $-C\equiv C-$ ;

[0217]  $L^{15}$ 及 $L^{16}$ 独立地为氢或氟;

[0218]  $i$ 为1、2、3、或4。

[0219] 项21. 一种液晶显示元件,包含根据项16至项20中任一项所述的液晶组合物。

[0220] 本发明也包括以下项。(a) 所述组合物,进而含有至少一种光学活性化合物和/或聚合性化合物。(b) 所述组合物,进而含有至少一种抗氧化剂和/或紫外线吸收剂。

[0221] 本发明也包括以下项。(c) 所述组合物,进而含有选自聚合性化合物、聚合引发剂、聚合抑制剂、光学活性化合物、抗氧化剂、紫外线吸收剂、光稳定剂、热稳定剂、色素、及消泡剂的群组中的一种、两种、或至少三种添加物。(d) 所述组合物,其向列相的上限温度为 $70^\circ\text{C}$ 以上,波长589nm中的光学各向异性(在 $25^\circ\text{C}$ 下测定)为0.08以上,而且频率1kHz中的介电各向异性(在 $25^\circ\text{C}$ 下测定)为-2以下。

[0222] 本发明也包括以下项。(e) 一种元件,含有所述组合物,而且具有PC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、VA、FFS、FPA、或聚合物稳定取向(Polymer Sustained Alignment, PSA)的模式。

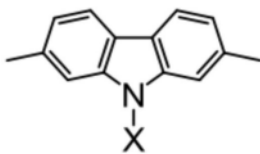
(f) 一种AM元件,包含所述组合物。(g) 一种透过型的元件,包含所述组合物。(h) 将所述组合物作为具有向列相的组合物的用途。(i) 通过在所述组合物中添加光学活性化合物而作为光学活性组合物的用途。

[0223] 依次对化合物(1)的形态、化合物(1)的合成、液晶组合物、及液晶显示元件进行说明。

[0224] 1. 化合物(1)的形态

[0225] 化合物(1)的特征在于具有下述式所表示的二价基。再者,下述式中, $X$ 为氢、或取代基。

[0226] [化21]

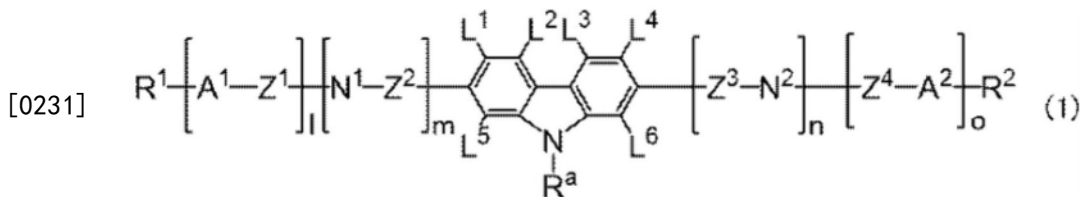


[0227]

[0228] 所述化合物在通常使用元件的条件下,物理性及化学性方面极其稳定,而且与其他液晶性化合物的相容性良好。含有所述化合物的组合物在通常使用元件的条件下稳定。所述组合物具有负且大的介电各向异性。所述化合物具有组合物的成分所需的一般的物性、适当的光学各向异性、以及适当的介电各向异性。

[0229] 化合物(1)中的末端基 $R^1$ 及末端基 $R^2$ 、侧位基 $R^a$ 、环 $A^1$ 及环 $A^2$ 、环 $N^1$ 及环 $N^2$ 、键结基 $Z^1$ 、键结基 $Z^2$ 、键结基 $Z^3$ 及键结基 $Z^4$ 、侧位基 $L^1$ 、侧位基 $L^2$ 、侧位基 $L^3$ 、侧位基 $L^4$ 、侧位基 $L^5$ 及侧位基 $L^6$ 的优选例为如下所述。所述例也适用于化合物(1)的下位式。在化合物(1)中,可通过适当地组合这些基来任意地调整物性。由于化合物的物性不存在大的差异,因此化合物(1)可包含比天然丰度(natural abundance)的量更多的 $^2\text{H}$ (氘)、 $^{13}\text{C}$ 等同位素。再者,化合物(1)的记号的定义如项1中记载那样。

[0230] [化22]



[0232] 式(1)中,  $R^1$  为氢、或碳数1至15的烷基, 所述  $R^1$  中, 至少一个  $-CH_2-$  可经  $-O-$ 、 $-S-$ 、或  $-CO-$  取代, 至少一个  $-(CH_2)_2-$  可经  $-CH=CH-$  或  $-C\equiv C-$  取代, 至少一个氢可经氟或氯取代。

[0233]  $R^2$  为氢、氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-C\equiv C-C\equiv N$ 、或碳数1至15的烷基, 所述  $R^2$  中, 至少一个  $-CH_2-$  可经  $-O-$ 、 $-S-$ 、或  $-CO-$  取代, 至少一个  $-(CH_2)_2-$  可经  $-CH=CH-$  或  $-C\equiv C-$  取代, 至少一个氢可经氟或氯取代。

[0234] 其中, 式(1)中, 在  $l$  为0时,  $R^1$  不会成为氢, 在  $o$  为0时,  $R^2$  不会成为氢。

[0235] 优选的  $R^1$  或  $R^2$  为烷基、烷氧基、烷氧基烷基、烷氧基烷氧基、烷硫基、烷硫基烷氧基、酰基、酰基烷基、酰基氧基、酰基氧基烷基、烷氧基羰基、烷氧基羰基烷基、烯基、烯基氧基、烯基氧基烷基、烷氧基烯基、炔基、及炔基氧基。所述  $R^1$  或  $R^2$  中, 至少一个氢可经氟或氯取代。所述例中, 包含至少两个氢经氟及氯的两者取代而成的基。进而优选为至少一个氢仅经氟取代而成的基。所述  $R^1$  或  $R^2$  中, 直链优于分支链。即便  $R^1$  或  $R^2$  为分支链, 在为光学活性时也优选。进而优选的  $R^1$  或  $R^2$  为烷基、烷氧基、烷氧基烷基、烯基、单氟烷基、聚氟烷基、单氟烷氧基、及聚氟烷氧基。 $R^2$  除了为所述基以外, 也可为氟、氯、 $-C\equiv N$ 、或  $-C\equiv C-C\equiv N$ 。

[0236] 烯基中的  $-CH=CH-$  的优选的立体构型依存于双键的位置。在1-丙烯基、1-丁烯基、1-戊烯基、1-己烯基、3-戊烯基、3-己烯基那样的烯基中, 优选为反式构型。在2-丁烯基、2-戊烯基、2-己烯基那样的烯基中, 优选为顺式构型。

[0237] 具体的  $R^1$  或  $R^2$  为甲基、乙基、丙基、丁基、戊基、己基、庚基、辛基、壬基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基、戊基氧基、己基氧基、庚基氧基、辛基氧基、甲氧基甲基、甲氧基乙基、甲氧基丙基、乙氧基甲基、乙氧基乙基、乙氧基丙基、丙氧基甲基、丙氧基乙基、丁氧基甲基、丁氧基乙基、戊氧基甲基、戊氧基乙基、乙烯基、1-丙烯基、2-丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、4-戊烯基、1-己烯基、2-己烯基、3-己烯基、4-己烯基、5-己烯基、1-庚烯基、2-庚烯基、3-庚烯基、4-庚烯基、5-庚烯基、6-庚烯基、2-丙烯基氧基、2-丁烯基氧基、2-戊烯基氧基、2-己烯基氧基、及1-丙炔基。

[0238] 具体的  $R^1$  或  $R^2$  为2-氟乙基、3-氟丙基、2,2,2-三氟乙基、2-氟乙烯基、2,2-二氟乙烯基、2-氟-2-乙炔基、3-氟-1-丙烯基、3,3,3-三氟-1-丙烯基、4-氟-1-丙烯基、及4,4-二氟-3-丁烯基。

[0239] 具体的  $R^2$  除了可为所述基以外, 也可为氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CHF_2$ 、 $-CF_2CH_2F$ 、 $-CF_2CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CHF_2CF_3$ 、 $-CHF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、 $-OCF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 $-OCF_2CH_2F$ 、 $-OCF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 、及  $-OCHF_2CF_2CF_3$ 。

[0240] 进而优选的  $R^1$  或  $R^2$  为乙基、丙基、丁基、戊基、己基、庚基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基、戊基氧基、己基氧基、甲氧基甲基、乙氧基甲基、乙氧基乙基、丙氧基甲基、丙氧基乙基、丁氧基甲基、戊氧基甲基、乙烯基、1-丙烯基、2-丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、4-戊烯基、1-己烯基、2-己烯基、3-己烯基、4-己烯基、5-己

烯基、2-丙烯基氧基、2-丁烯基氧基、及2-戊烯基氧基。此外,进而优选的 $R^2$ 为 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、 $-OCF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 $-OCF_2CH_2F$ 、 $-OCF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 、 $-OCHF_2CF_2CF_3$ 、氟、氯、及 $-C\equiv N$ 。最优的 $R^1$ 或 $R^2$ 为乙基、丙基、丁基、戊基、己基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基、戊基氧基、甲氧基甲基、乙氧基甲基、丙氧基甲基、丁氧基甲基、乙烯基、1-丙烯基、3-丁烯基、及3-戊烯基。此外,最优的 $R^2$ 为 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 、氟、及 $-C\equiv N$ 。

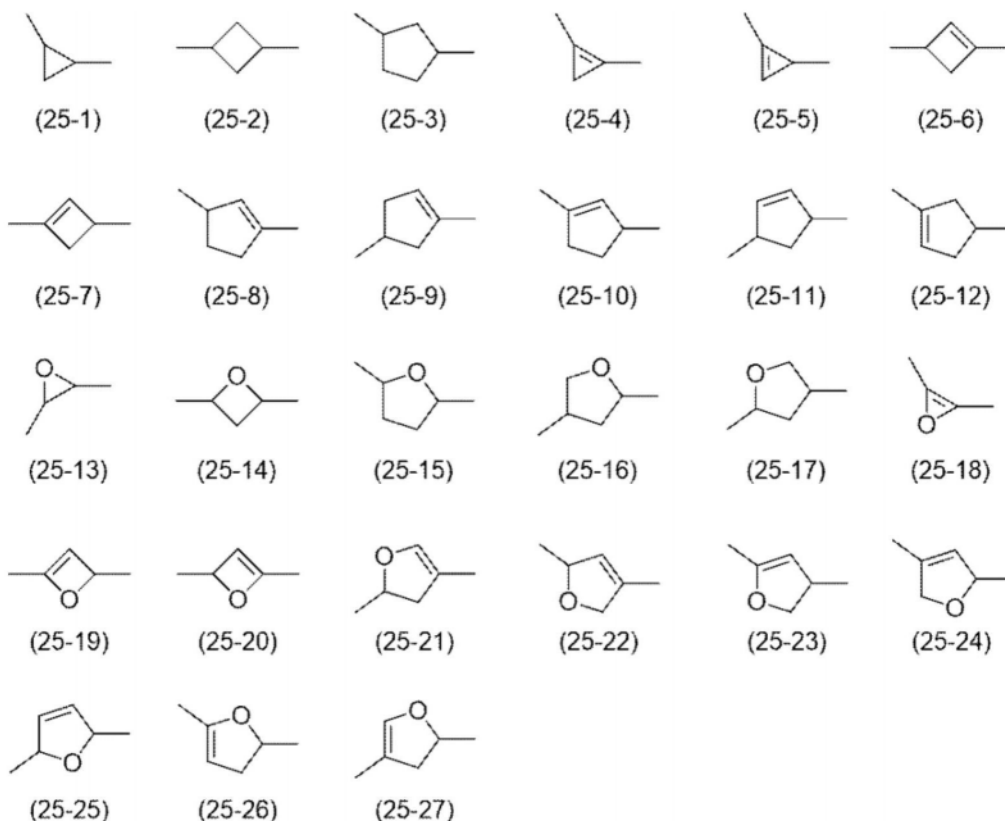
[0241]  $R^a$ 为氢、碳数1至6的直链烷基、或碳数3至6的分支链烷基。

[0242] 优选的 $R^a$ 为甲基、乙基、丙基、丁基、戊基、己基、异丙基,仲丁基、戊烷-2-基、己烷-2-基、戊烷-3-基、己烷-3-基、叔丁基、叔戊基、3-甲基戊烷-3-基、及3-乙基戊烷-3-基。进而优选的 $R^a$ 为甲基、乙基、丙基、丁基、异丙基、仲丁基、及叔丁基。特别优选的 $R^a$ 为甲基、乙基、丙基、及异丙基。最优的 $R^a$ 为甲基、及乙基。

[0243] 式(1)中,环 $A^1$ 及环 $A^2$ 独立地为碳数3至5的亚环烷基,所述环 $A^1$ 及环 $A^2$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个 $-(CH_2)_2-$ 可经 $-CH=CH-$ 取代。

[0244] 优选的环 $A^1$ 或环 $A^2$ 的例子为下述式(25-1)至式(25-27)所表示的二价基。进而优选的例子为式(25-1)至式(25-17)所表示的二价基。特别优选的例子为式(25-1)至式(25-3)、及式(25-13)至式(25-17)所表示的二价基。最优的例子为式(25-1)至式(25-3)所表示的二价基。

[0245] [化23]

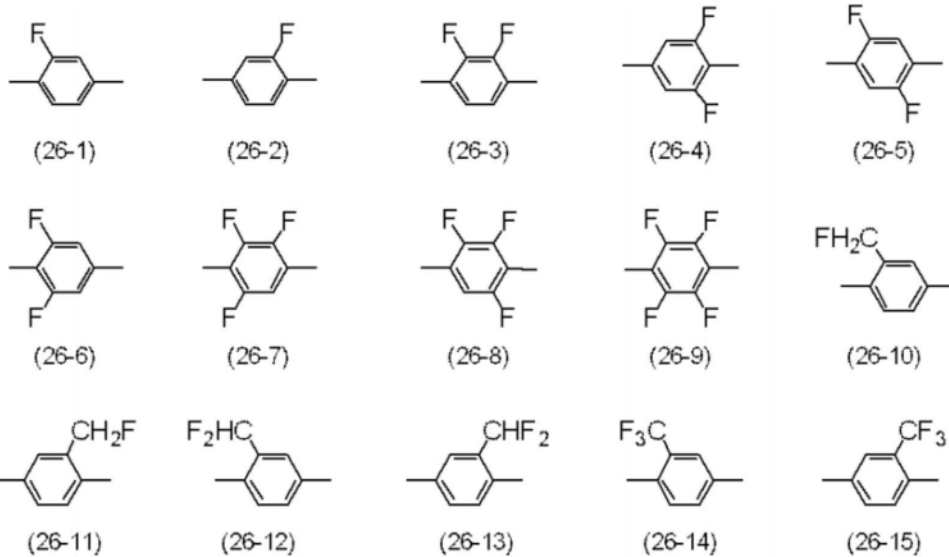


[0247] 式(1)中,环 $N^1$ 及环 $N^2$ 独立地为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、2,6,7-三氧杂双环[2.2.2]辛烷-1,4-二基、1,4-亚苯基、萘-2,6-二基、四氢吡喃-2,5-二基、二氢吡喃-2,5-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、吡啶-2,5-二基、

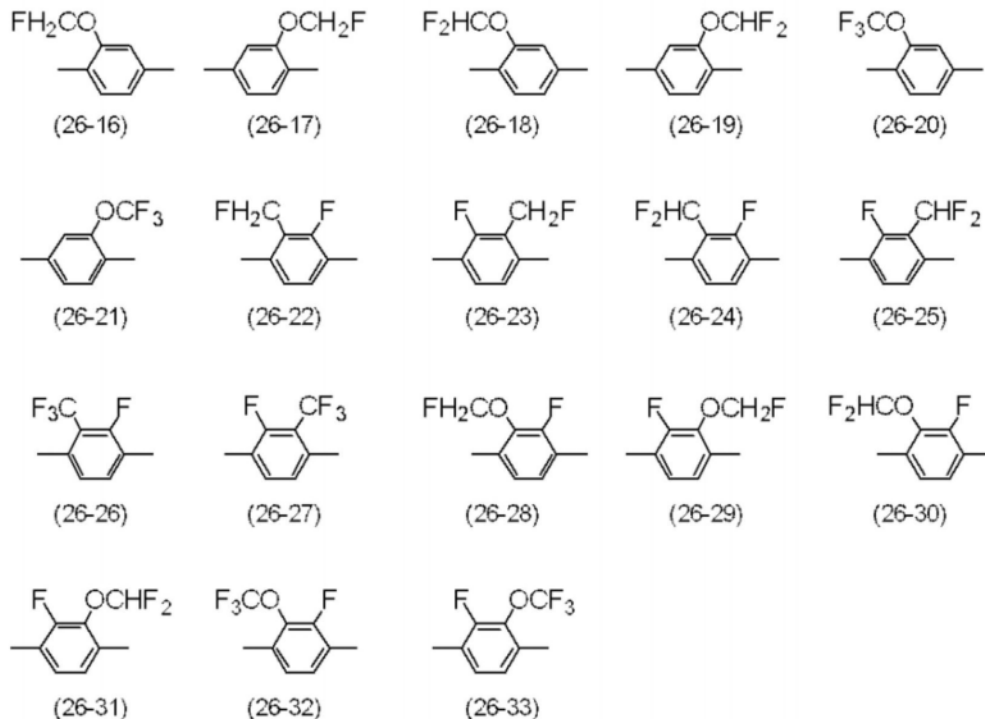
嘧啶-2,5-二基、咪喃-2,4-二基、咪喃-2,5-二基、噻吩-2,4-二基、噻吩-2,5-二基、苯并咪喃-2,5-二基、苯并咪喃-2,6-二基、苯并[b]噻吩-2,5-二基、苯并[b]噻吩-2,6-二基、9,10-二氢菲-2,7-二基、9H-氧杂蒽-2,6-二基、或9H-芴-2,7-二基、环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代。

[0248] “环 $N^1$ 及环 $N^2$ 中,至少一个氢可经氟、氯、 $-C\equiv N$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、或 $-OCH_2F$ 取代”的优选例为下述式(26-1)至式(26-71)所表示的二价基。进而优选的例子为式(26-1)至式(26-4)、式(26-6)、式(26-10)至式(26-15)、及式(26-54)至式(26-59)所表示的二价基。

[0249] [化24]

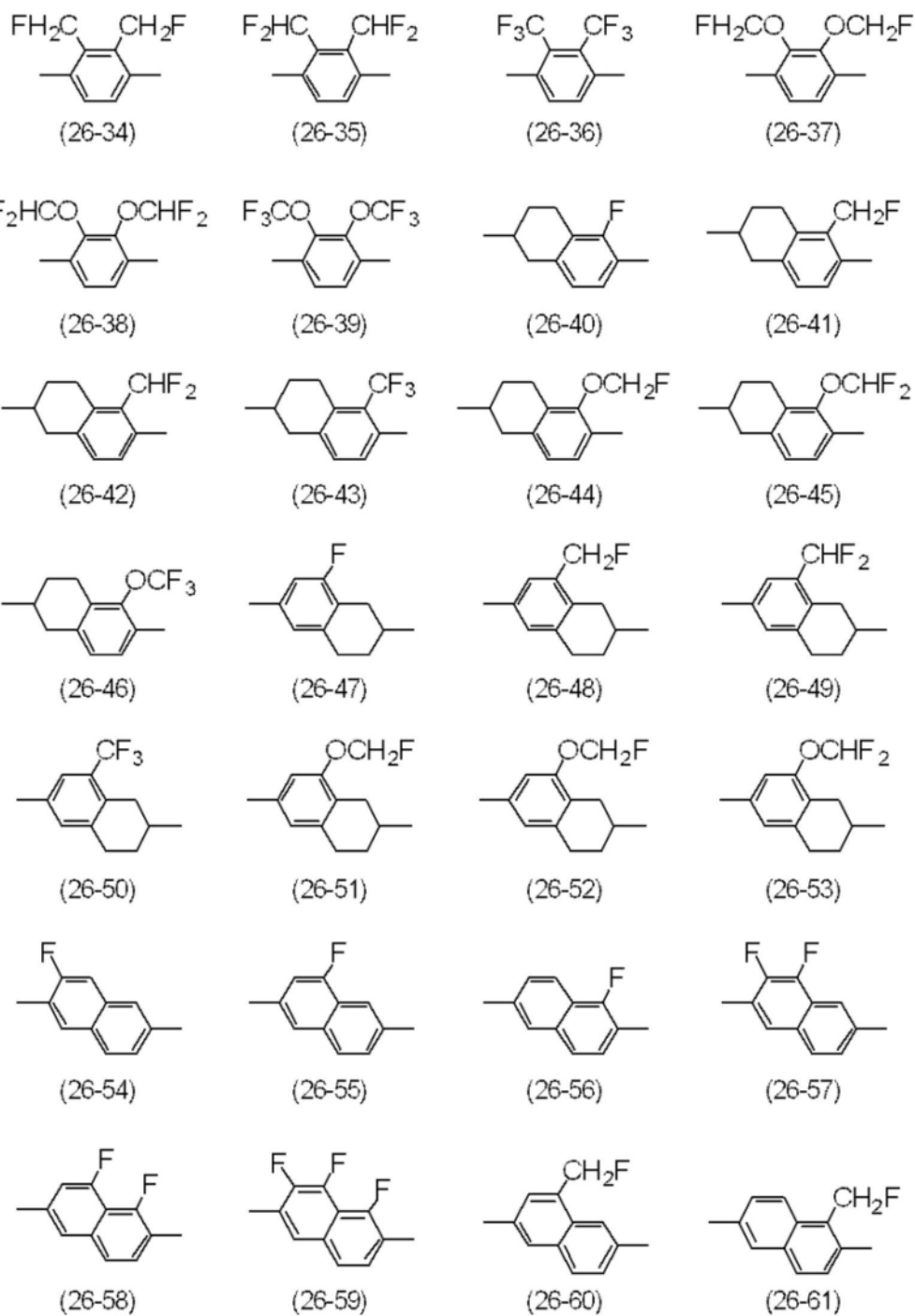


[0250]

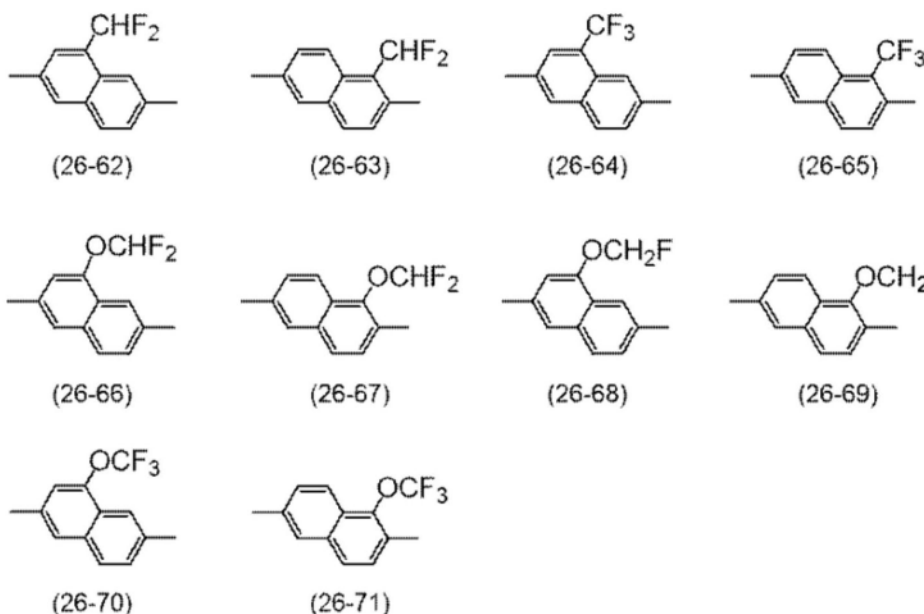


[0251] [化25]

[0252]



[0253] [化26]



[0255] 进而优选的环 $N^1$ 或环 $N^2$ 为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、1,4-亚苯基、2-氟-1,4-亚苯基、2,3-二氟-1,4-亚苯基、2,5-二氟-1,4-亚苯基、2,6-二氟-1,4-亚苯基、2,3,5-三氟-1,4-亚苯基、吡啶-2,5-二基、3-氟吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、哒嗪-2,5-二基、十氢萘-2,6-二基、1,2,3,4-四氢萘-2,6-二基、及萘-2,6-二基。1,4-亚环己基及1,3-二噁烷-2,5-二基的立体构型是反式优于顺式。

[0256] 特别优选的环 $N^1$ 或环 $N^2$ 为1,4-亚环己基、1,3-二噁烷-2,5-二基、1,4-亚苯基、2-氟-1,4-亚苯基、2,3-二氟-1,4-亚苯基、2,5-二氟-1,4-亚苯基、2,6-二氟-1,4-亚苯基、吡啶-2,5-二基、及嘧啶-2,5-二基。最优选的环 $N^1$ 或环 $N^2$ 为1,4-亚环己基及1,4-亚苯基、2-氟-1,4-亚苯基、2,3-二氟-1,4-亚苯基。

[0257] 式(1)中, $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 独立地为单键或碳数1至6的亚烷基,所述 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、及 $Z^4$ 中,至少一个 $-\text{CH}_2-$ 可经 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、或 $-\text{SiH}_2-$ 取代,至少一个 $-(\text{CH}_2)_2-$ 可经 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 或 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 取代,至少一个氢可经氟或氯取代。

[0258]  $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、或 $Z^4$ 的具体例为单键、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OCO}-$ 、 $-\text{OCO}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2\text{O}-$ 、及 $-\text{OCH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 。与 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 那样的键结基的双键相关的立体构型是反式优于顺式。

[0259] 优选的 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、或 $Z^4$ 为单键、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2\text{O}-$ 、及 $-\text{OCH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 。进而优选的 $Z^1$ 、 $Z^2$ 或 $Z^3$ 为单键、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_2-$ 、及 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 。最优选的 $Z^1$ 、 $Z^2$ 、 $Z^3$ 、或 $Z^4$ 为单键、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 或 $-\text{OCH}_2-$ 。

[0260] 式(1)中, $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、 $L^4$ 、 $L^5$ 、及 $L^6$ 独立地为氢、氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{F}$ 、或 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 。

[0261] 式(1)中,在 $L^5$ 及 $L^6$ 均为氢时, $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 的至少一个为氟、氯、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、

CH<sub>2</sub>F、-OCF<sub>3</sub>、-OCHF<sub>2</sub>、-OCH<sub>2</sub>F、或-C≡N, L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>的至少一个可为氢。进而优选的L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>为氟或-CF<sub>3</sub>。特别优选的L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>为氟。

[0262] 式(1)中,在L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、及L<sup>4</sup>均为氢时, L<sup>5</sup>及L<sup>6</sup>的至少一个为氟、氯、-CF<sub>3</sub>、-CHF<sub>2</sub>、-CH<sub>2</sub>F、-OCF<sub>3</sub>、-OCHF<sub>2</sub>、-OCH<sub>2</sub>F、或-C≡N, L<sup>5</sup>及L<sup>6</sup>的至少一个可为氢。进而优选的L<sup>5</sup>及L<sup>6</sup>为氟或-CF<sub>3</sub>。特别优选的L<sup>5</sup>及L<sup>6</sup>为氟。

[0263] 式(1)中, l及o独立地为0、或1, m及n独立地为0、1、或2, l、m、n、及o的和为0至4的整数。化合物(1)具有一环至五环。这些环除了包含通常的六元环以外也包含缩合环或经交联的六元环。在化合物(1)具有一环、二环时, 与其他液晶性化合物的相容性良好, 粘度小。在化合物(1)具有三环或四环时, 上限温度高。在化合物(1)具有四环时, 液晶相的温度范围广。

[0264] 通过适当地选择化合物(1)的末端基、环及键结基, 可任意地调整光学各向异性、介电各向异性等物性。以下说明末端基R<sup>1</sup>及末端基R<sup>2</sup>、环A<sup>1</sup>及环A<sup>2</sup>、键结基Z<sup>1</sup>、键结基Z<sup>2</sup>、键结基Z<sup>3</sup>、及键结基Z<sup>4</sup>的种类对化合物(1)的物性带来的效果。

[0265] 化合物(1)中, 在R<sup>1</sup>或R<sup>2</sup>为直链时液晶相的温度范围广、而且粘度小。在R<sup>1</sup>或R<sup>2</sup>为分支链时, 与其他液晶性化合物的相容性良好。R<sup>1</sup>或R<sup>2</sup>为光学活性基的化合物作为手性掺杂剂有用。通过将所述化合物添加至组合物中, 可防止元件中所产生的反向扭转区域(Reverse twisted domain)。R<sup>1</sup>或R<sup>2</sup>不为光学活性基的化合物作为组合物的成分有用。在R<sup>1</sup>或R<sup>2</sup>为烯基时, 优选的立体构型依存于双键的位置。具有优选的立体构型的烯基化合物具有高的上限温度或液晶相的温度范围。在分子晶体与液晶(Mol. Cryst. Liq. Cryst.), 1985, 131, 109及分子晶体与液晶(Mol. Cryst. Liq. Cryst.), 1985, 131, 327中有详细的说明。

[0266] 在环A<sup>1</sup>或环A<sup>2</sup>为至少一个氢可经氟或氯取代的1,4-亚苯基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、或哒嗪-3,6-二基时, 光学各向异性大。在环为1,4-亚环己基、1,4-亚环己烯基或1,3-二噁烷-2,5-二基时, 光学各向异性小。

[0267] 在至少两个环为1,4-亚环己基时, 上限温度高、光学各向异性小、而且粘度小。在至少一个环为1,4-亚苯基时, 光学各向异性比较大、而且取向秩序参数(orientational order parameter)大。在至少两个环为1,4-亚苯基时, 光学各向异性大、液晶相的温度范围广、而且上限温度高。

[0268] 在键结基Z<sup>1</sup>、键结基Z<sup>2</sup>、键结基Z<sup>3</sup>、或键结基Z<sup>4</sup>为单键、-CH<sub>2</sub>O-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、-CH=CH-、-CF=CF-、或-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-时, 粘度小。在键结基为单键、-OCF<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>O-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-、或-CH=CH-时, 粘度更小。在键结基为-CH=CH-时, 液晶相的温度范围广、而且弹性常数比K<sub>33</sub>/K<sub>11</sub>(K<sub>33</sub>: 弯曲弹性常数, K<sub>11</sub>: 展曲弹性常数)大。在键结基为-C≡C-时, 光学各向异性大。

[0269] 在化合物(1)具有一环或二环时, 粘度小。在化合物(1)具有四环或五环时, 上限温度高。如上所述, 通过适当地选择末端基、环、及键结基的种类、环的数量, 可获得具有所需的物性的化合物。因此, 化合物(1)作为具有PC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、VA等模式的元件中所使用的组合物的成分有用。

[0270] 式(1)中, 在L<sup>5</sup>及L<sup>6</sup>均为氢时、且L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、或L<sup>4</sup>为氟、氯、-CF<sub>3</sub>、或-CHF<sub>2</sub>时, 所述化合物优选。在L<sup>5</sup>及L<sup>6</sup>均为氢时、且L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、或L<sup>4</sup>为氟或氯时, 所述化合物进而优选。在L<sup>5</sup>及L<sup>6</sup>均为氢时、且L<sup>1</sup>、L<sup>2</sup>、L<sup>3</sup>、或L<sup>4</sup>为氟时, 所述化合物最优选。

[0271] 式(1)中,在 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 均为氢时、且 $L^5$ 或 $L^6$ 为氟、氯、 $-CF_3$ 、或 $-CHF_2$ 时,所述化合物优选。在 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 均为氢时、且 $L^5$ 或 $L^6$ 为氟或氯时,所述化合物进而优选。在 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、及 $L^4$ 均为氢时、且 $L^5$ 或 $L^6$ 为氟时,所述化合物最优选。

[0272] 化合物(1)的优选例为项2及项4中记载的化合物(1-1)至化合物(1-26)。进而优选的例子为项6及项8等中由下位式表示的化合物。化合物(1)适于具有VA、IPS、PSA等模式的元件。

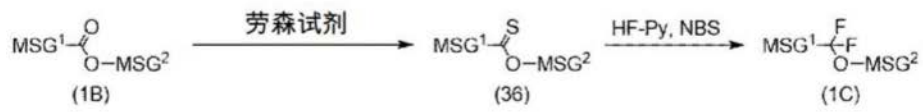
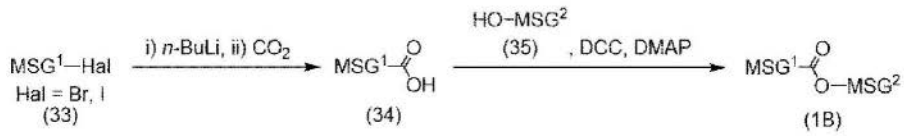
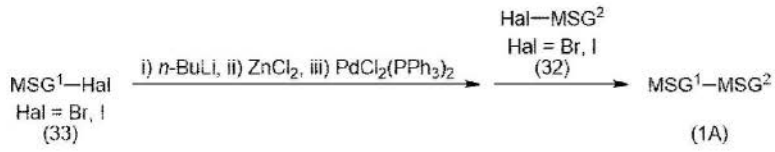
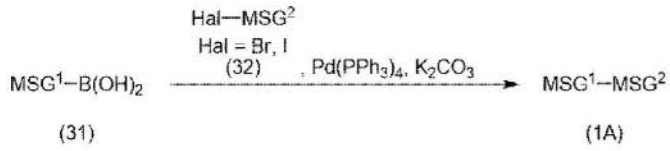
[0273] 2. 化合物(1)的合成

[0274] 对化合物(1)的合成法进行说明。化合物(1)可通过将有机合成化学的方法适当地组合来合成。在起始物中导入所需的末端基、环及键结基的方法在《有机合成》(Organic Syntheses, 约翰·威立父子出版公司(John Wiley&Sons, Inc.))、《有机反应》(Organic Reactions, 约翰·威立父子出版公司(John Wiley&Sons, Inc.))、《有机合成大全》(Comprehensive Organic Synthesis, 培格曼出版公司(Pergamon Press))、《新实验化学讲座》(丸善)等书籍中有记载。

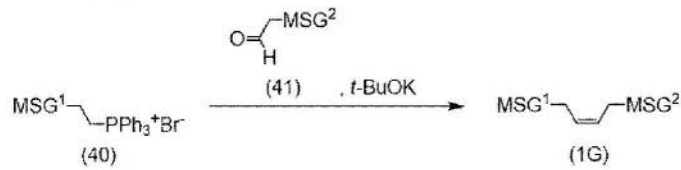
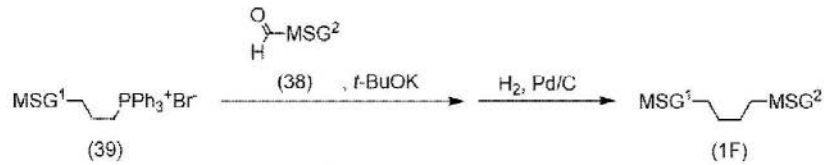
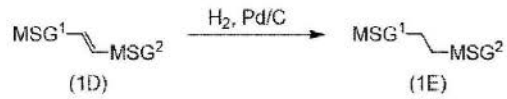
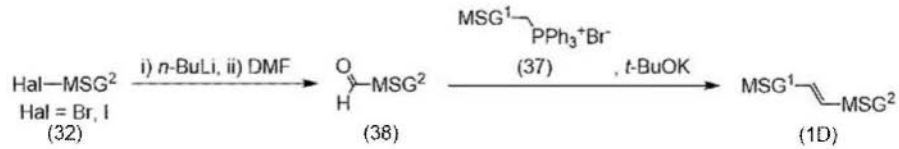
[0275] 2-1. 键结基Z的生成

[0276] 关于生成键结基 $Z^1$ 至键结基 $Z^4$ 的方法,示出最初的流程。接着,在方法(1)至方法(11)中说明流程中记载的反应。所述流程中,MSG<sup>1</sup>(或MSG<sup>2</sup>)为具有至少一个环的一价有机基。流程中使用的多个MSG<sup>1</sup>(或者MSG<sup>2</sup>)所表示的一价有机基可相同,或者也可不同。化合物(1A)至化合物(1J)相当于化合物(1)。

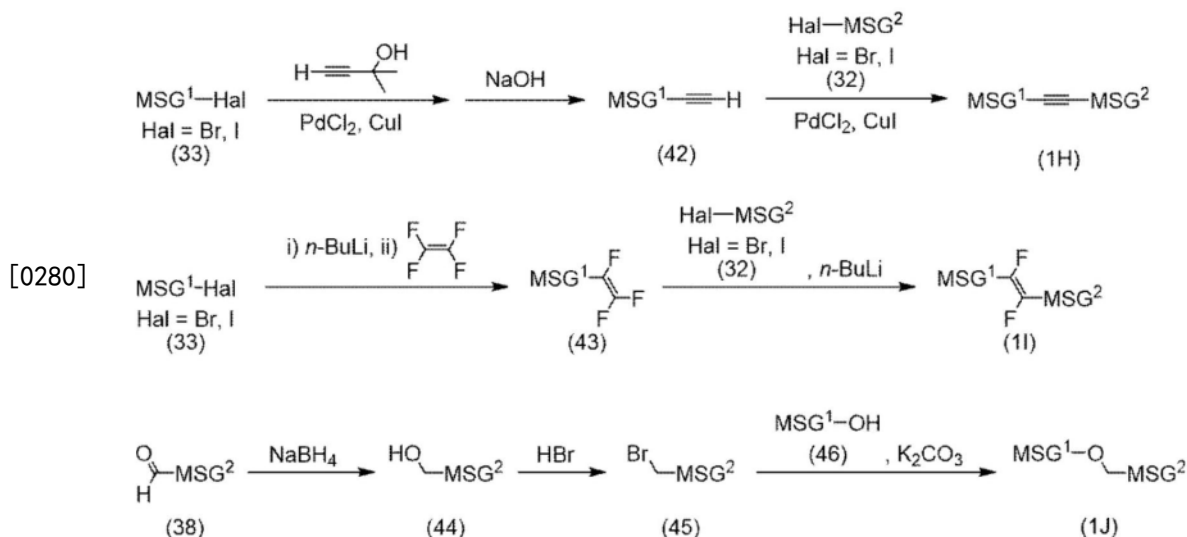
[0277] [化27]



[0278]



[0279] [化28]



[0281] (1) 单键的生成

[0282] 在碳酸盐及四(三苯基膦)钯那样的催化剂的存在下,使通过现有的方法而合成的芳基硼酸(31)与卤化物(32)进行反应来合成化合物(1A)。所述化合物(1A)也可通过如下方式来合成:使正丁基锂与通过现有的方法而合成的卤化物(33)进行反应,继而使氯化钯进行反应,在二氯双(三苯基膦)钯那样的催化剂的存在下,使卤化物(32)进行反应。

[0283] (2) -COO-的生成

[0284] 使正丁基锂与卤化物(33)进行反应,继而使二氧化碳进行反应而获得羧酸(34)。在1,3-二环己基碳二酰亚胺(1,3-dicyclohexyl carbodiimide, DDC)与4-二甲氨基吡啶(4-dimethyl amino pyridine, DMAP)的存在下,使通过现有的方法而合成的化合物(35)与羧酸(34)脱水来合成化合物(1B)。

[0285] (3) -CF<sub>2</sub>O-的生成

[0286] 利用劳森试剂(Lawesson's reagent)那样的硫化剂对化合物(1B)进行处理而获得硫代酯(thionoester)(36)。利用氟化氢吡啶络合物与N-溴琥珀酰亚胺(N-bromosuccinimide, NBS)对硫代酯(36)进行氟化,合成化合物(1C)。参照M.黑星(M.Kuroboshi)等人的《化学快报(Chem.Lett.)》(1992,827.)。也可利用(二乙基氨基)三氟化硫((diethyl amino) sulfur trifluoride, DAST)对硫代酯(36)进行氟化来合成化合物(1C)。参照W.H.邦奈拉(W.H.Bunnelle)等人的《有机化学期刊(J.Org.Chem.)》(1990,55,768.)。也可通过皮尔基尔希(Peer.Kirsch)等人的《德国应用化学(Angew.Chem.Int.Ed.)》(2001,40,1480.)中记载的方法来生成所述键结基。

[0287] (4) -CH=CH-的生成

[0288] 利用正丁基锂对卤化物(32)进行处理后,与N,N-二甲基甲酰胺(N,N-dimethyl formamide, DMF)反应而获得醛(38)。利用叔丁醇钾那样的碱对通过现有的方法而合成的磷盐(37)进行处理而产生磷叶立德(phosphorus ylide)。使所述磷叶立德与醛(38)反应来合成化合物(1D)。通过反应条件而生成顺式体,因此视需要利用现有的方法将顺式体异构化成反式体。

[0289] (5) -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-的生成

[0290] 在钯碳那样的催化剂的存在下使化合物(1D)氢化,由此合成化合物(1E)。

[0291] (6) - (CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-的生成

[0292] 使用磷盐 (39) 来代替磷盐 (37), 并依照方法 (4) 的方法获得具有 - (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CH=CH- 的化合物。对其进行催化氢化 (catalytic hydrogenation) 来合成化合物 (1F)。

[0293] (7) -CH<sub>2</sub>CH=CHCH<sub>2</sub>-的生成

[0294] 使用磷盐 (40) 来代替磷盐 (37), 且使用醛 (41) 来代替醛 (38), 并依照方法 (4) 的方法合成化合物 (1G)。通过反应条件而生成反式体, 因此视需要利用现有的方法将反式体异构化成顺式体。

[0295] (8) -C≡C-的生成

[0296] 在二氯钯与卤化铜的催化剂存在下, 使卤化物 (33) 与 2-甲基-3-丁炔-2-醇进行反应后, 在碱性条件下进行脱保护而获得化合物 (32)。在二氯钯与卤化铜的催化剂存在下, 使化合物 (42) 与卤化物 (32) 反应来合成化合物 (1H)。

[0297] (9) -CF=CF-的生成

[0298] 利用正丁基锂对卤化物 (33) 进行处理后, 使四氟乙烯进行反应而获得化合物 (43)。利用正丁基锂对卤化物 (32) 进行处理后, 与化合物 (43) 反应而合成化合物 (1I)。

[0299] (10) -OCH<sub>2</sub>-的生成

[0300] 利用硼氢化钠等还原剂将醛 (38) 还原而获得化合物 (44)。利用氢溴酸等将化合物 (44) 溴化而获得溴化物 (45)。在碳酸钾等碱存在下, 使溴化物 (45) 与化合物 (46) 反应来合成化合物 (1J)。

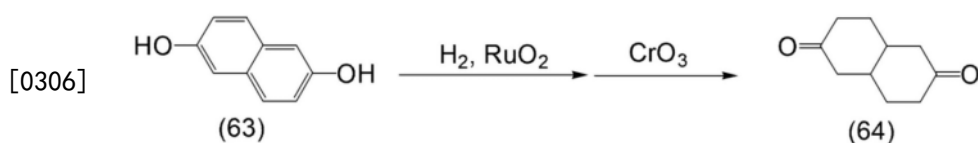
[0301] (11) - (CF<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-的生成

[0302] 依照《美国化学学会期刊 (J. Am. Chem. Soc.)》(2001, 123, 5414.) 中所记载的方法, 在氟化氢催化剂的存在下, 利用四氟化硫将二酮 (-COCO-) 氟化而获得具有 - (CF<sub>2</sub>)<sub>2</sub>- 的化合物。

[0303] 2-2. 环A<sup>1</sup>至环A<sup>3</sup>及环N<sup>1</sup>的生成

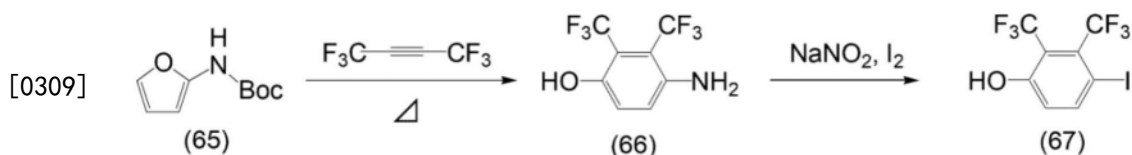
[0304] 接着, 对与环A<sup>1</sup>至环A<sup>3</sup>及环N<sup>1</sup>相关的生成法进行说明。关于 1, 4-亚环己基、1, 3-二噁烷-2, 5-二基、1, 4-亚苯基、2-氟-1, 4-亚苯基、2, 3-二氟-1, 4-亚苯基、吡啶-2, 5-二基、嘧啶-2, 5-二基等环, 起始物已有市售, 或已熟知生成法。因此, 对以下所示的化合物 (64)、化合物 (67) 及化合物 (71) 进行说明。

[0305] [化29]



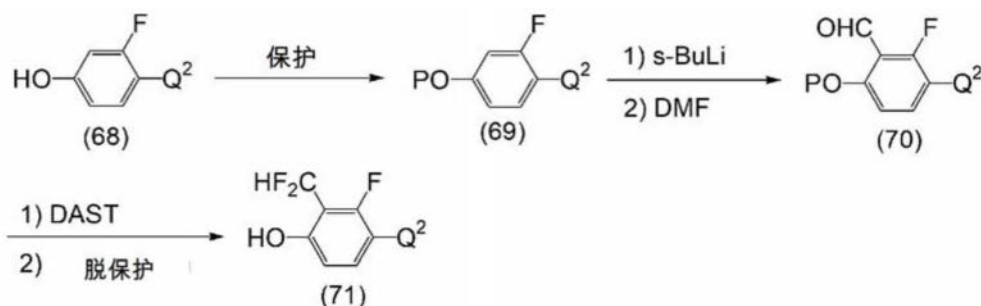
[0307] 十氢萘-2, 6-二酮 (64) 是具有十氢萘-2, 6-二基的化合物的起始物。所述化合物 (64) 可通过如下方式来获得: 依照日本专利特开 2000-239564 号公报中所记载的方法, 在氧化钌存在下对二醇 (63) 进行催化氢还原, 进而利用氧化铬加以氧化。所述化合物是通过通常的方法而转换为化合物 (1)。

[0308] [化30]



[0310] 2,3-(双三氟甲基)亚苯基的结构单元是通过《有机快报 (Org. Lett.)》(2000, 2 (21), 3345)中所记载的方法来合成。通过使呋喃(65)与1,1,1,4,4,4-六氟-2-丁炔在高温下进行狄尔斯-阿尔德 (Diels-Alder) 型反应来合成苯胺(66)。依照《有机合成集 (Org. Synth. Coll.)》(Vol. 2, 1943, 355)中所记载的方法,对所述化合物进行山德迈耳 (Sandmeyer) 型反应而获得碘化物(67)。所述化合物是通过通常的方法而转换为化合物(1)。

[0311] [化31]

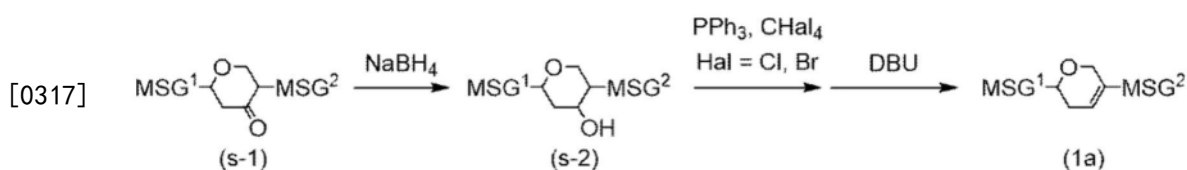


[0313] 2-二氟甲基-3-氟亚苯基的结构单元是通过如下那样的方法来合成。利用适当的保护基来保护化合物(68)的羟基而获得化合物(69)。P是指保护基。使叔丁基锂作用于化合物(69),继而使N,N-二甲基甲酰胺(DMF)进行反应而获得醛(70)。也可利用二乙基氨基三氟化硫(DAST)将所述化合物氟化,继而进行脱保护而获得苯酚(71)。所述化合物是通过通常的方法而转换为化合物(1)。

[0314] 2-3,3,6-二氢-2H-吡喃环的生成

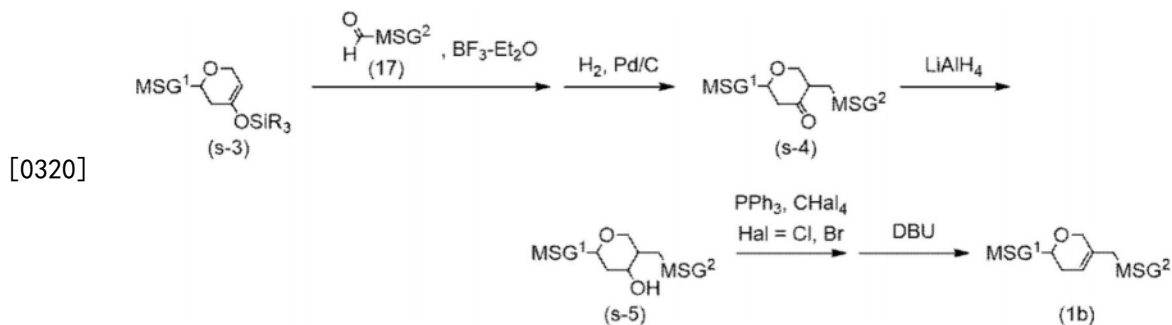
[0315] 使用具有式(pr-1)所表示的二价基的化合物(1a)及化合物(1b)对生成所述环的方法进行说明。具有式(pr-2)所表示的二价基的化合物也可通过所述方法来合成。化合物(1a)的合成流程为如下所述。

[0316] [化32]



[0318] 化合物(s-1)是依照日本专利特开2011-136924号公报中记载的方法来合成。利用硼氢化钠等还原剂将化合物(s-1)还原而获得化合物(s-2)。通过三苯基膦与四卤化碳将所述化合物卤化,利用二氮杂双环十一烯(diazabicyclo undecene, DBU)等脱卤化剂进行处理,由此获得目标化合物(1a)。

[0319] [化33]

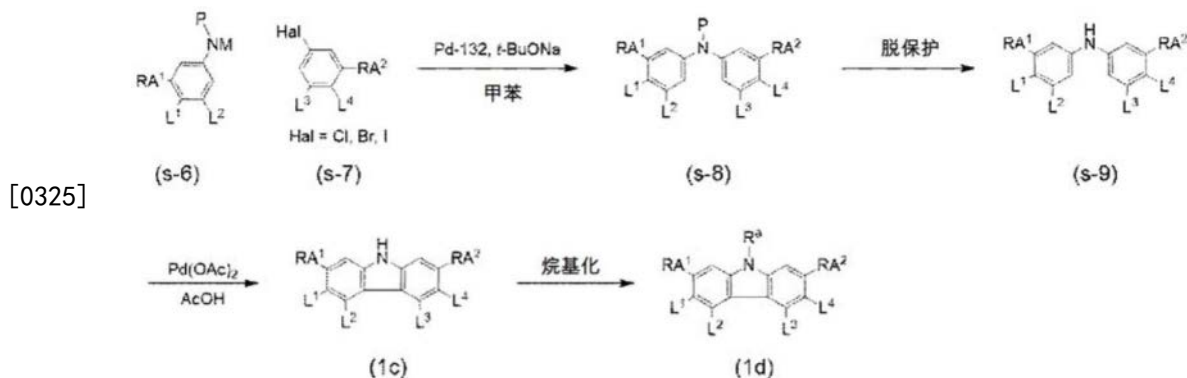


[0321] 化合物(1b)的合成流程为如上所述。在三氟化硼二乙基醚络合物等路易斯酸存在下,使化合物(s-3)与醛(17)反应后,进行氢化,由此获得化合物(s-4)。利用氢化铝锂等还原剂将所述化合物还原而获得化合物(s-5)。通过三苯基膦与四卤化碳将所述化合物卤化,利用二氮杂双环十一烯(DBU)等脱卤化剂进行处理,由此获得化合物(1b)。

[0322] 2-4. 咪唑环的生成

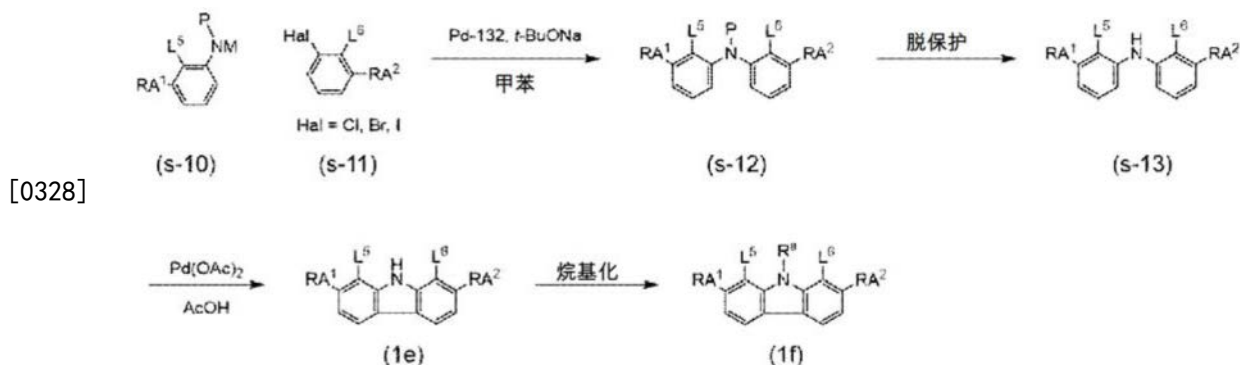
[0323] 化合物(1c)~化合物(1f)的合成流程为如下所述。

[0324] [化34]



[0326] 使化合物(s-6)、化合物(s-7)、 $\text{Pd}(\text{amphos})\text{Cl}_2$ 、与叔丁氧基钠反应而获得化合物(s-8)。P是指保护基。进行所述化合物的脱保护而获得化合物(s-9)。使所述化合物与乙酸钯在乙酸中反应而获得(1c)。进行所述化合物的烷基化,获得化合物(1d)。这些化合物中, $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 及 $L^4$ 的定义与项1中记载的记号的定义相同。 $\text{RA}^1$ 或 $\text{RA}^2$ 的定义与 $\text{MSG}^1$ 和项1中记载的 $\text{R}^1$ 或 $\text{R}^2$ 的定义相同。

[0327] [化35]



[0329] 使化合物(s-10)、化合物(s-11)、 $\text{Pd}(\text{amphos})\text{Cl}_2$ 、与叔丁氧基钠进行反应而获得化合物(s-12)。P是指保护基。进行所述化合物的脱保护而获得化合物(s-13)。使所述化合

物与乙酸铷在乙酸中反应而获得(1e)。进行所述化合物的烷基化,获得化合物(1f)。这些化合物中, $L^5$ 及 $L^6$ 的定义与项1中记载的记号的定义相同。 $RA^1$ 或 $RA^2$ 的定义与 $MSG^1$ 和项1中记载的 $R^1$ 或 $R^2$ 的定义相同。

[0330] 3.液晶组合物

[0331] 3-1.成分化合物

[0332] 对本发明的液晶组合物进行说明。所述组合物含有至少一种化合物(1)作为成分(a)。所述组合物也可含有两种或三种以上的化合物(1)。组合物的成分可仅为化合物(1)。为了显现良好的物性,优选为组合物在1重量%至99重量%的范围内含有化合物(1)的至少一种。在介电各向异性为负的组合物中,化合物(1)的优选的含量为5重量%至60重量%的范围。在介电各向异性为正的组合物中,化合物(1)的优选的含量为30重量%以下。

[0333] [表1]

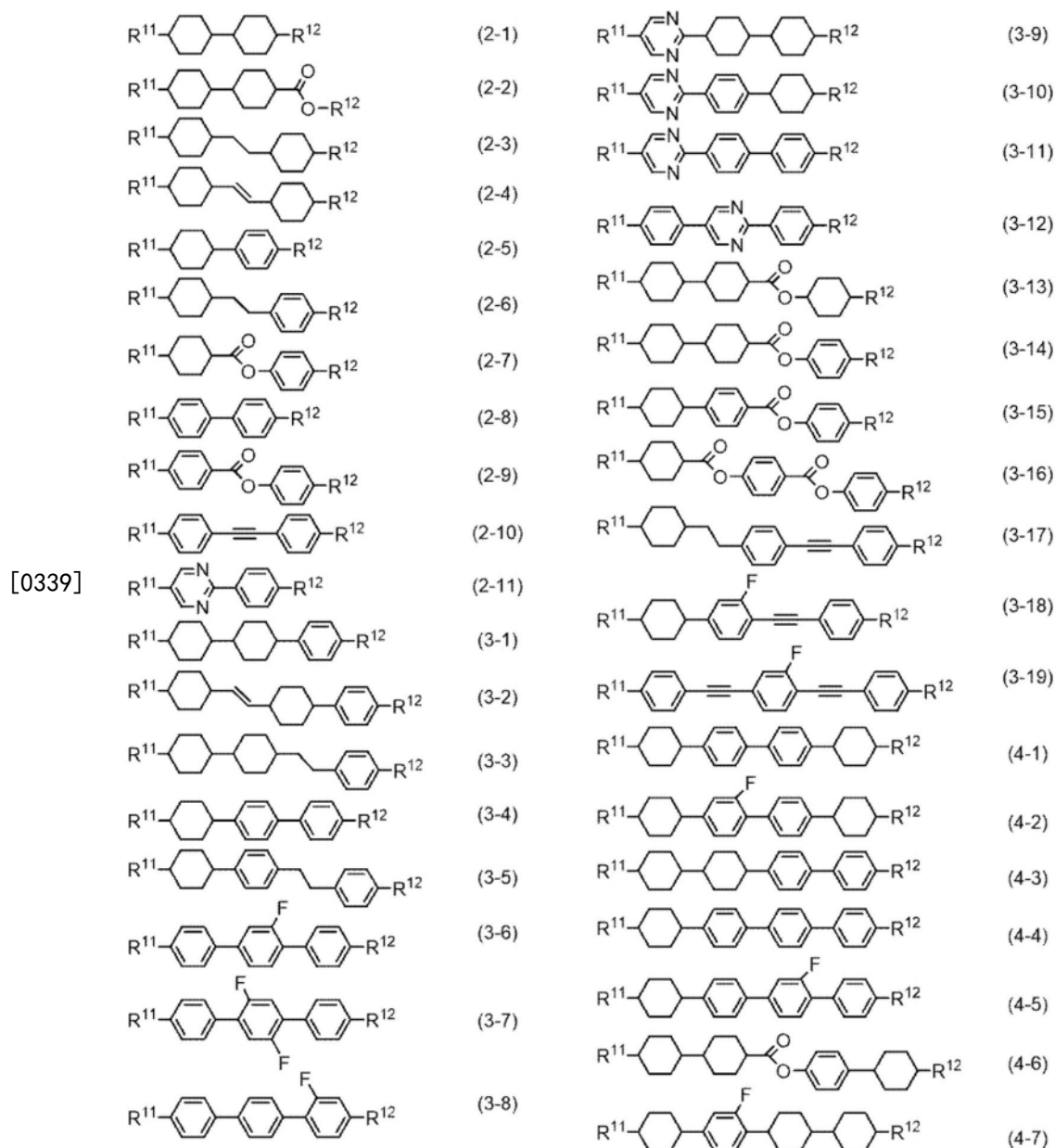
[0334] 表1、组合物的成分化合物

成分	成分化合物	介电各向异性
成分(a)	化合物(1)	负且大
成分(b)	化合物(2)至化合物(4)	小
成分(c)	化合物(5)至化合物(13)	负且大
成分(d)	化合物(21)至化合物(23)	正且大
成分(e)	化合物(24)	正且大

[0336] 所述组合物含有化合物(1)作为成分(a)。所述组合物优选为进而含有选自表1中所示的成分(b)至成分(e)中的液晶性化合物。在制备所述组合物时,优选为考虑到介电各向异性的正负与大小来选择成分(b)至成分(e)。所述组合物可含有与化合物(1)至化合物(13)及化合物(21)至化合物(24)不同的液晶性化合物。所述组合物也可不含此种液晶性化合物。

[0337] 成分(b)是两个末端基为烷基等的化合物。作为成分(b)的优选例,可列举:化合物(2-1)至化合物(2-11)、化合物(3-1)至化合物(3-19)、及化合物(4-1)至化合物(4-7)。这些化合物中, $R^{11}$ 及 $R^{12}$ 独立地为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{11}$ 及 $R^{12}$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个氢可经氟取代。

[0338] [化36]



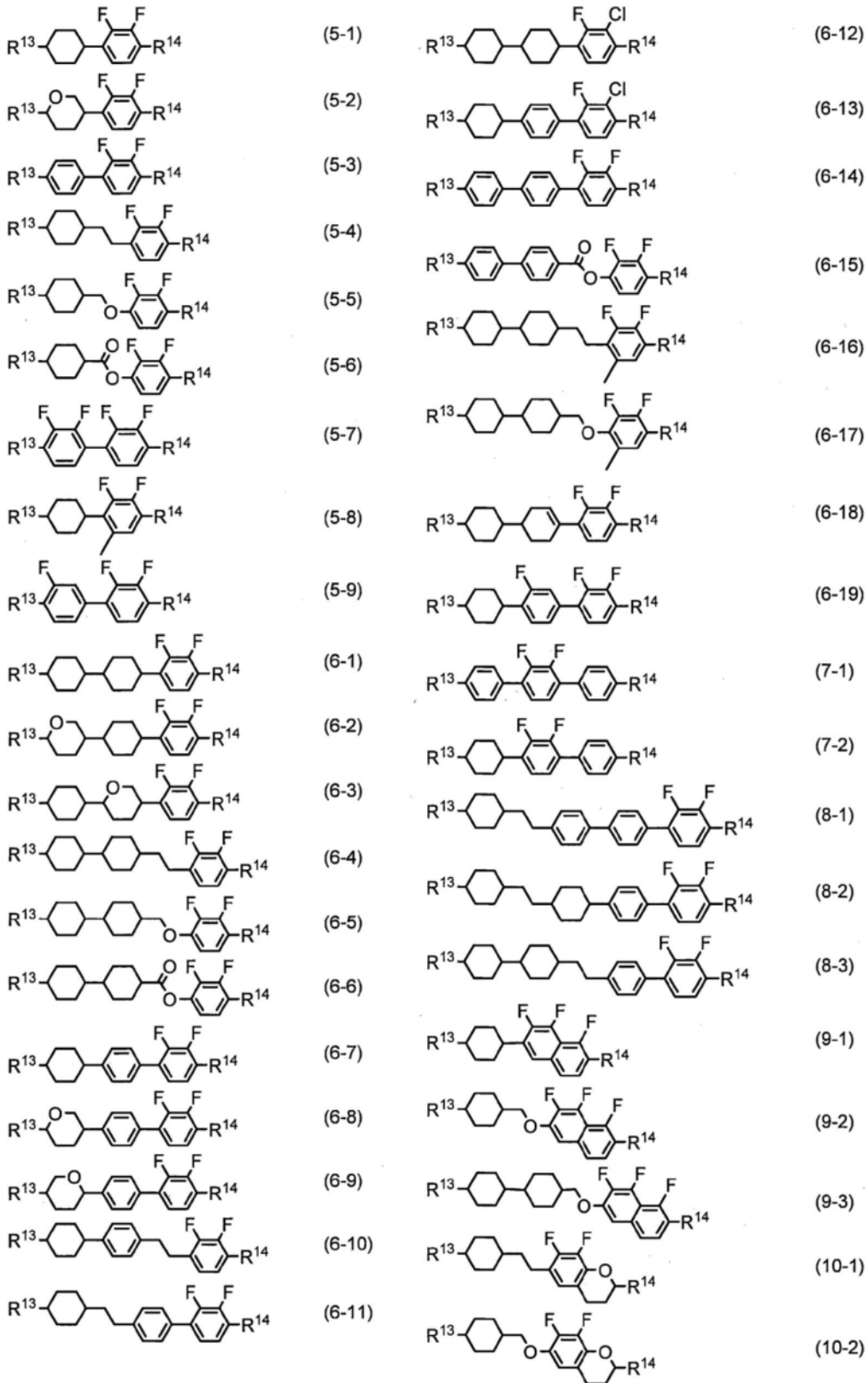
[0340] 成分(b)具有小的介电各向异性。成分(b)接近中性。化合物(2)具有降低粘度或调整光学各向异性的效果。化合物(3)及化合物(4)具有通过提高上限温度来扩大向列相的温度范围、或者调整光学各向异性的效果。

[0341] 随着成分(b)的含量增加,虽然组合物的粘度变小,但介电各向异性变小。因此,只要满足元件的阈电压的要求值,则优选为含量多。在制备IPS、VA等模式用的组合物的情况下,基于液晶组合物的重量,成分(b)的含量优选为30重量%以上,进而优选为40重量%以上。

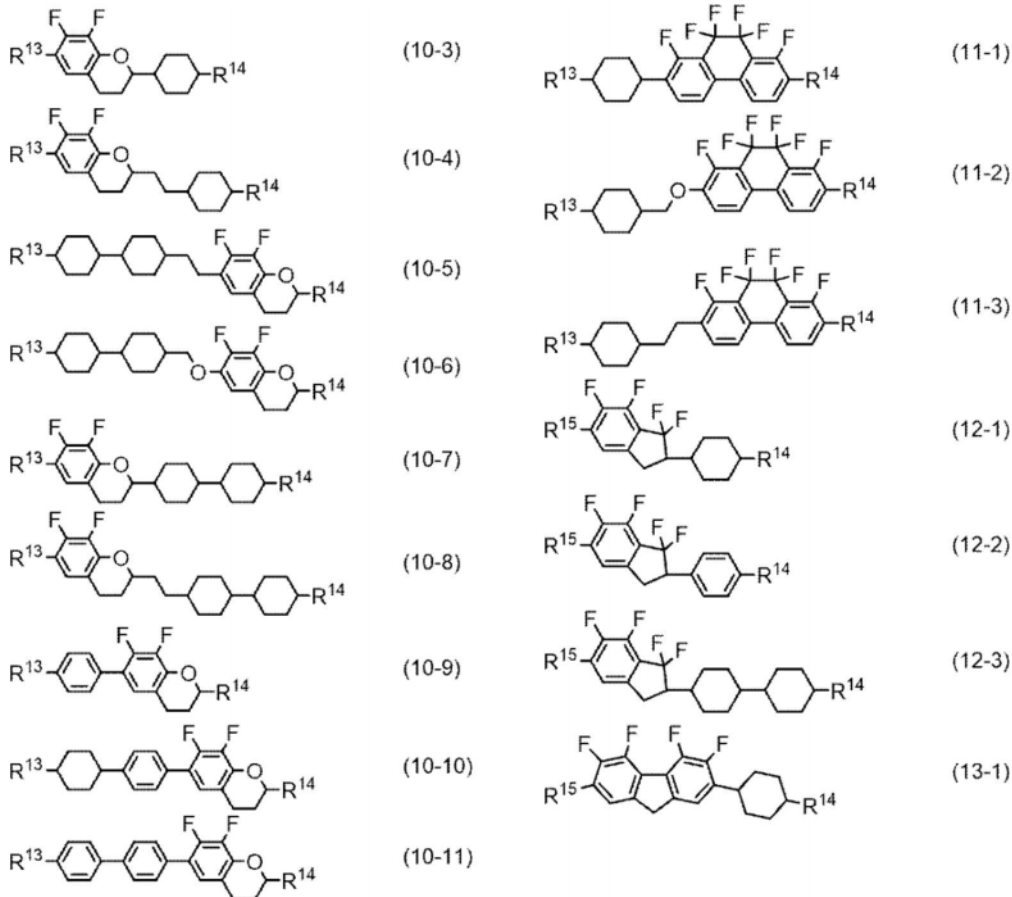
[0342] 成分(c)为化合物(5)至化合物(13)。这些化合物如2,3-二氟-1,4-亚苯基那样,具有侧位经两个卤素取代而成的亚苯基。作为成分(c)的优选例,可列举:化合物(5-1)至化合物(5-9)、化合物(6-1)至化合物(6-19)、化合物(7-1)及化合物(7-2)、化合物(8-1)至化合物(8-3)、化合物(9-1)至化合物(9-3)、化合物(10-1)至化合物(10-11)、化合物(11-1)至化合物(11-3)、化合物(12-1)至化合物(12-3)、及化合物(13-1)。这些化合物中, $R^{13}$ 及 $R^{14}$ 独立

地为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述R<sup>13</sup>及R<sup>14</sup>中,至少一个-CH<sub>2</sub>-可经-O-取代,至少一个氢可经氟取代,R<sup>15</sup>为氢、氟、碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述R<sup>15</sup>中,至少一个-CH<sub>2</sub>-可经-O-取代,所述R<sup>15</sup>中,至少一个氢可经氟取代。

[0343] [化37]



## [0345] [化38]



## [0346]

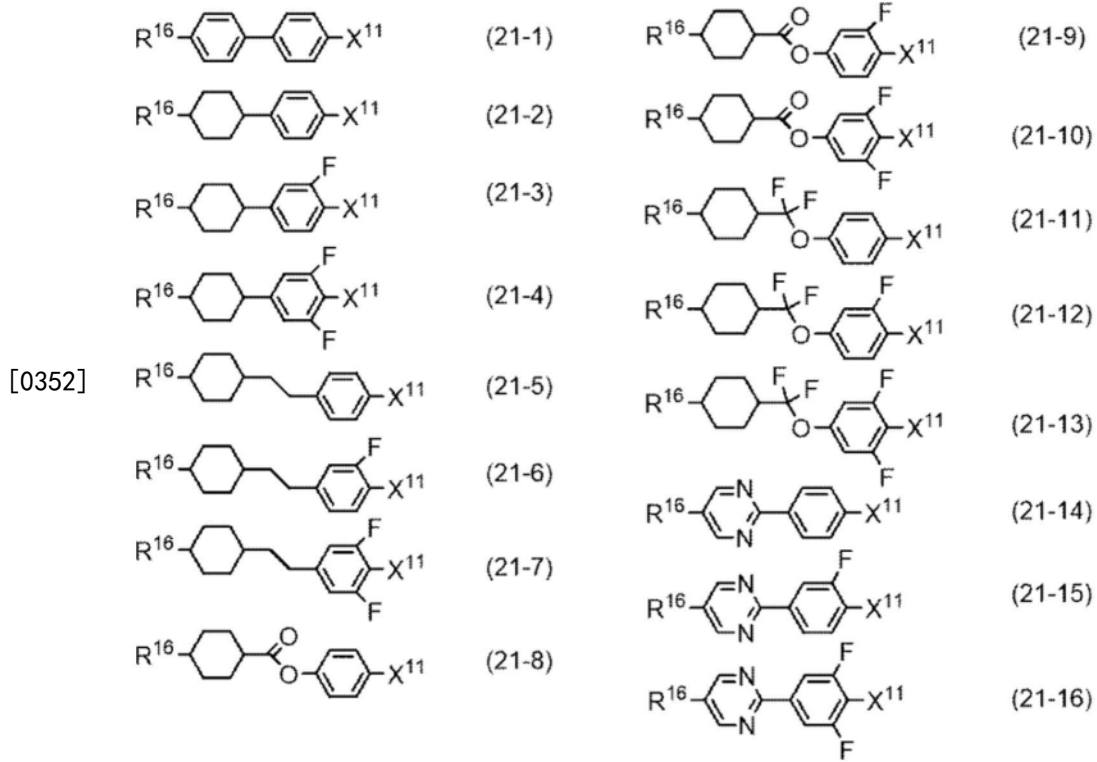
[0347] 成分(c)的介电各向异性为负且大。成分(c)可用于制备IPS、VA、PSA等模式用的组合物的情况。随着成分(c)的含量增加,虽然组合物的介电各向异性负向变大,但粘度变大。因此,只要满足元件的阈电压的要求值,则优选为含量少。若考虑到介电各向异性为-5左右,则为了进行充分的电压驱动,优选为含量为40重量%以上。

[0348] 成分(c)中的化合物(5)为二环化合物,因此具有降低粘度、调整光学各向异性、或者提高介电各向异性的效果。化合物(6)及化合物(7)为三环化合物,化合物(8)为四环化合物,因此具有提高上限温度、提高光学各向异性、或者提高介电各向异性这一效果。化合物(9)至化合物(13)具有提高介电各向异性这一效果。

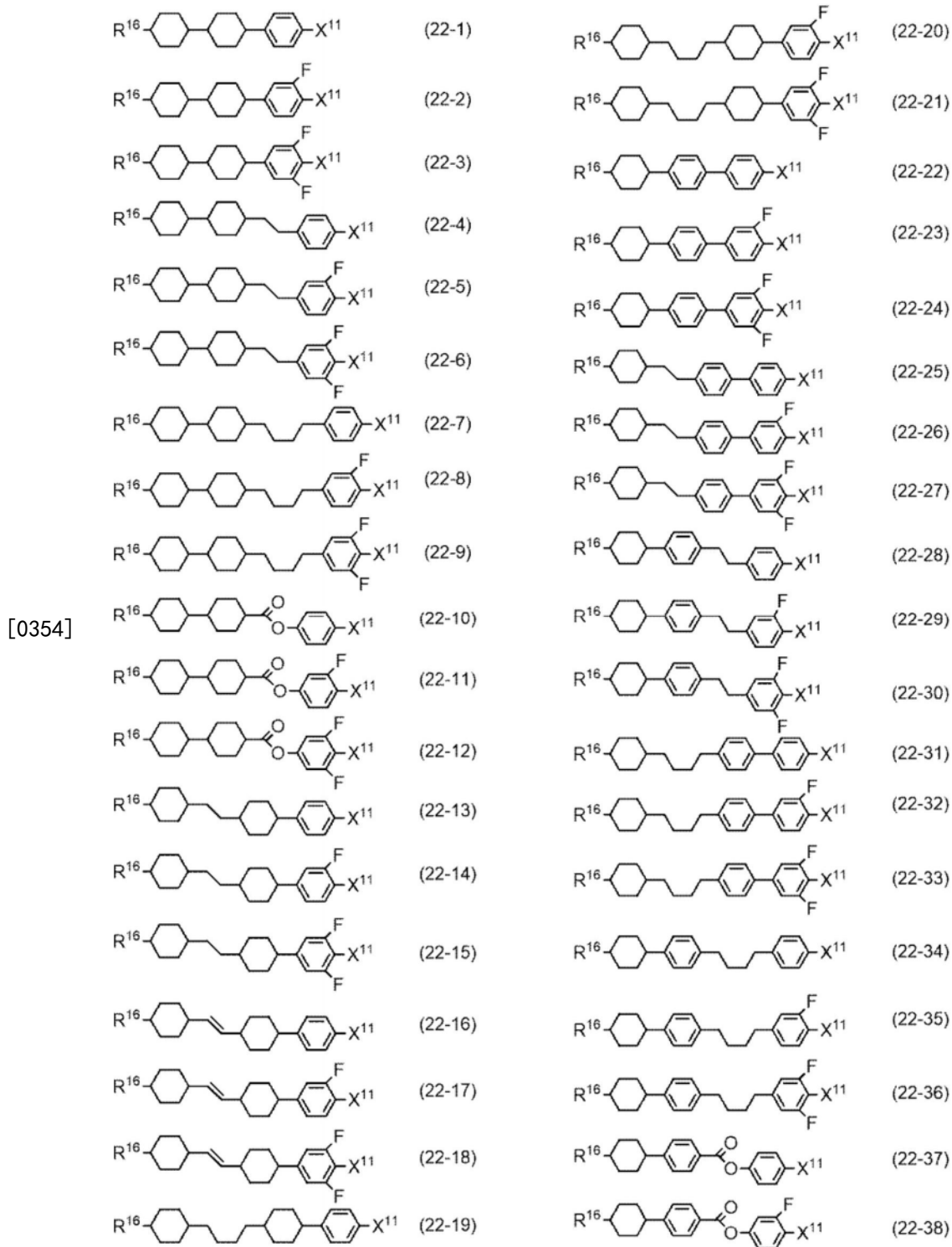
[0349] 在制备IPS、VA、PSA等模式用的组合物的情况下,基于液晶组合物的重量,成分(c)的含量优选为40重量%以上,进而优选为50重量%至95重量%的范围。在将成分(c)添加至介电各向异性为正的组合物中的情况下,成分(c)的含量优选为30重量%以下。通过添加成分(c),可调整组合物的弹性常数,并调整元件的电压-透过率曲线。

[0350] 成分(d)为在右末端具有卤素或含氟基的化合物。作为成分(d)的优选例,可列举:化合物(21-1)至化合物(21-16)、化合物(22-1)至化合物(22-116)、化合物(23-1)至化合物(23-59)。这些化合物中, $R^{16}$ 为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{16}$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个氢可经氟取代。 $X^{11}$ 为氟、氯、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、或 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 。

## [0351] [化39]

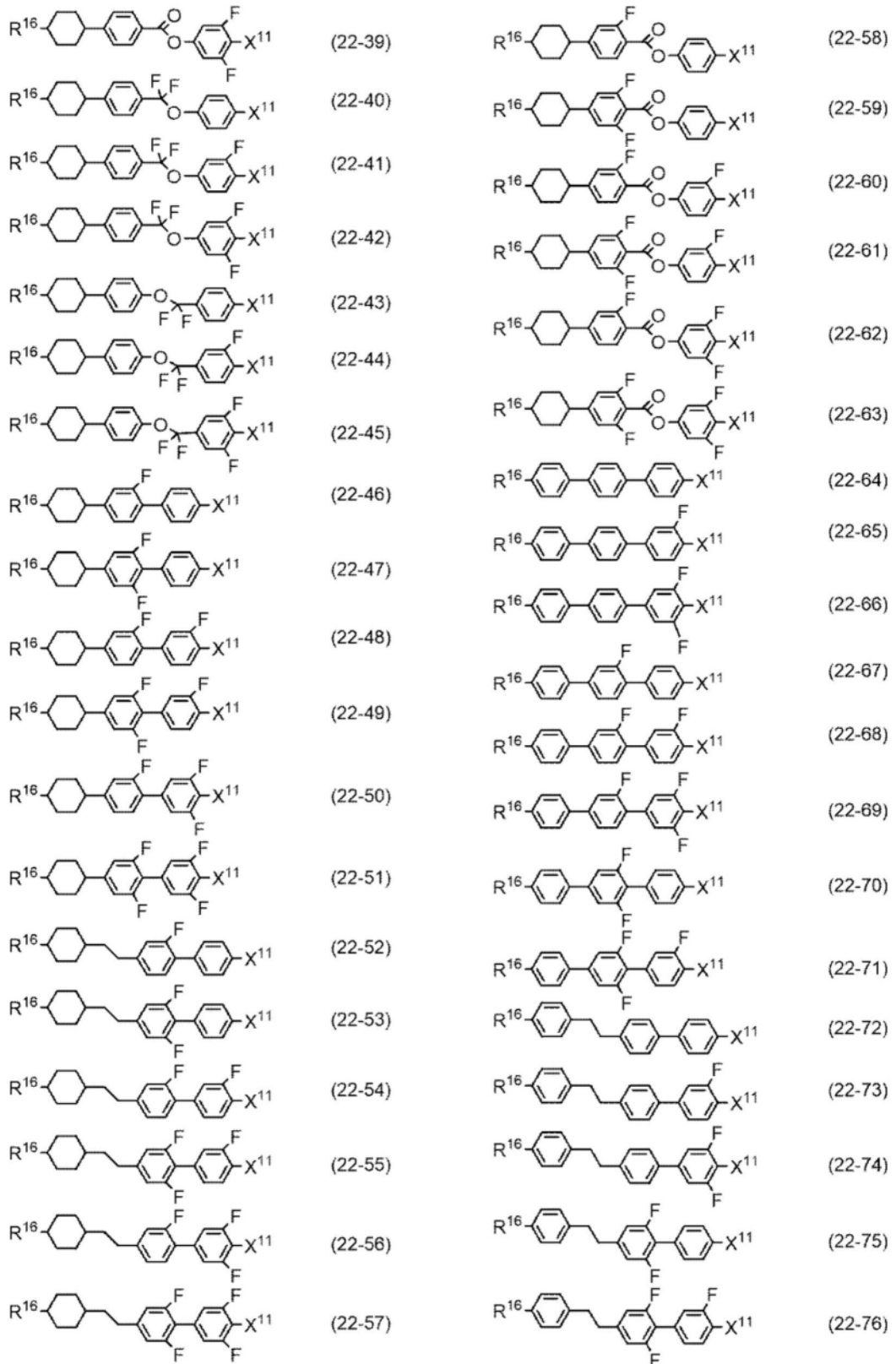


[0353] [化40]



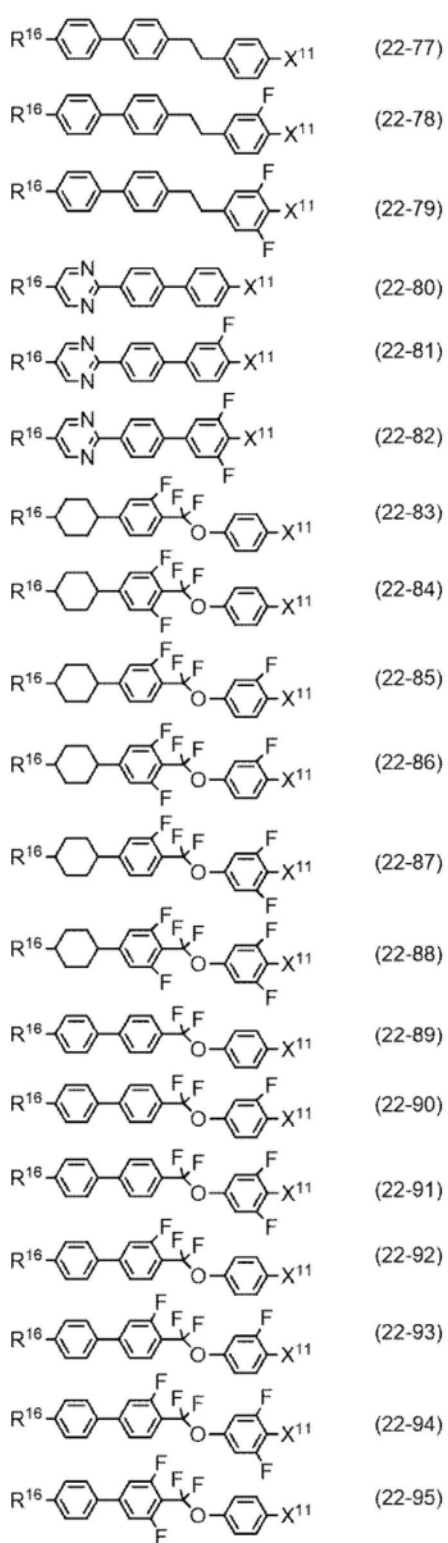
[0355] [化41]

[0356]

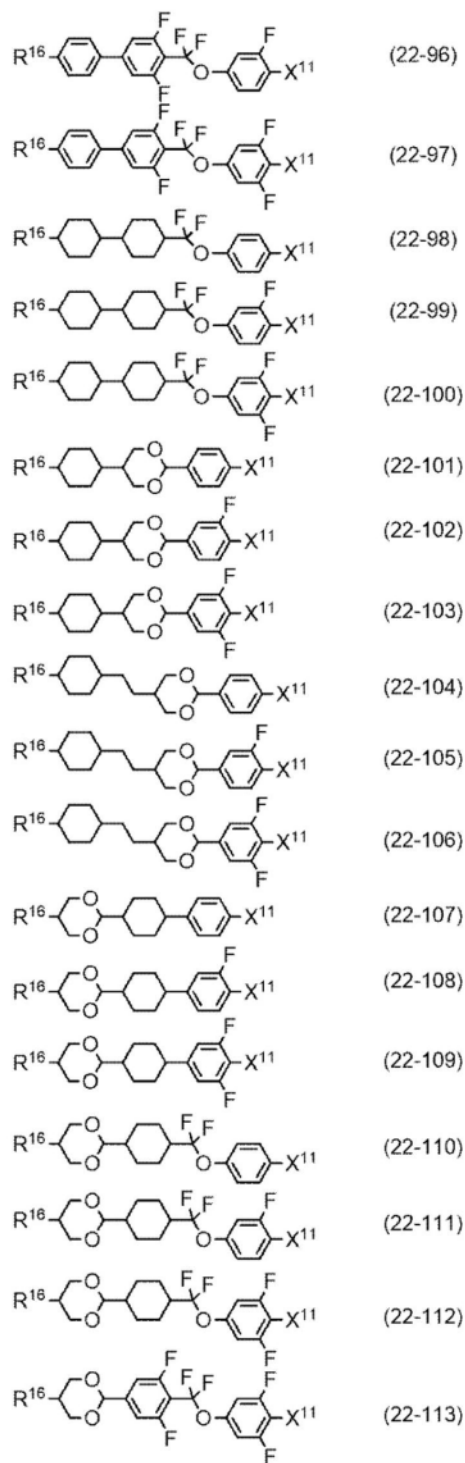


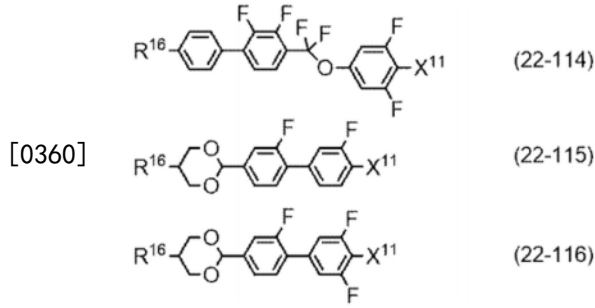
[0357] [化42]

[0358]

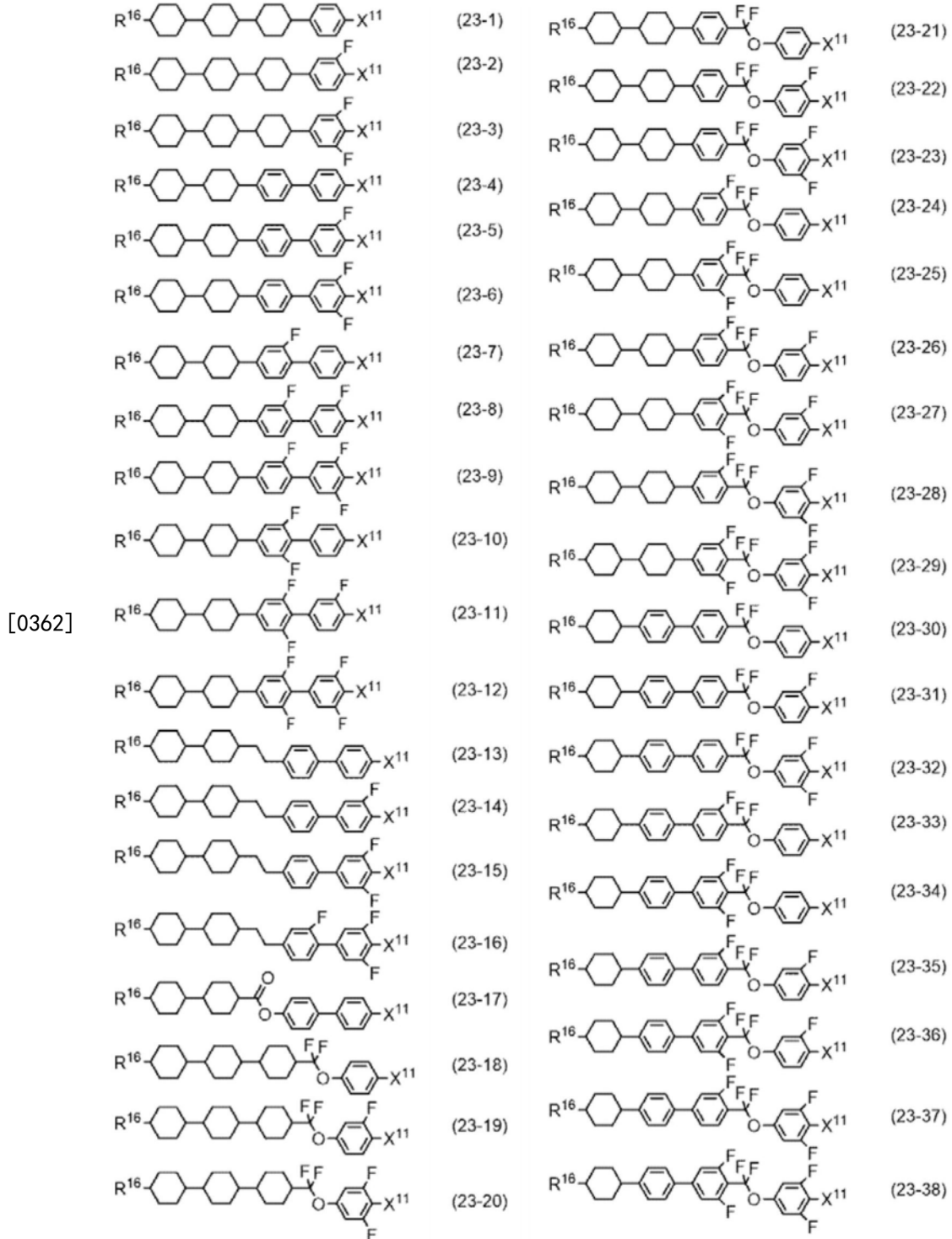


[0359] [化43]

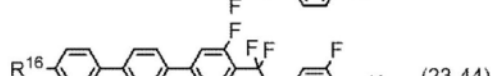
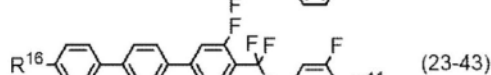
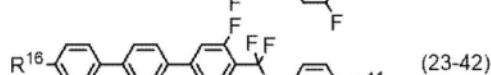
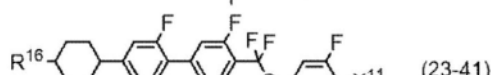
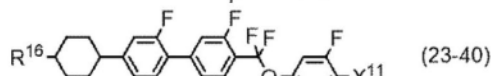
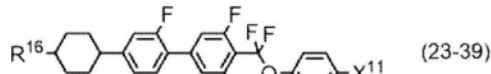




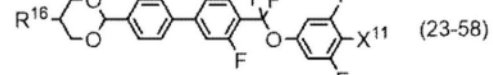
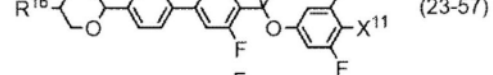
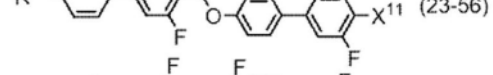
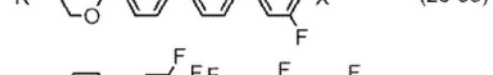
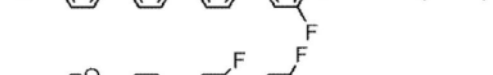
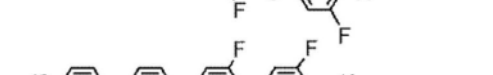
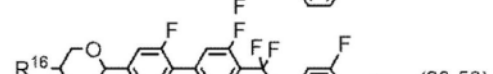
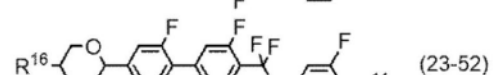
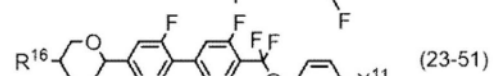
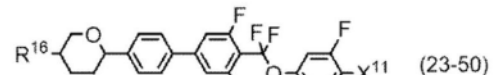
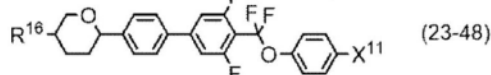
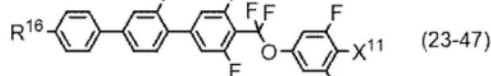
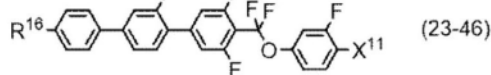
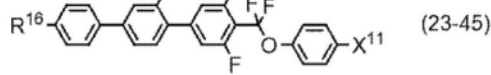
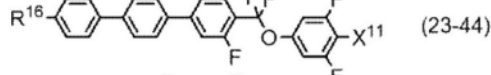
[0361] [化44]



## [0363] [化45]



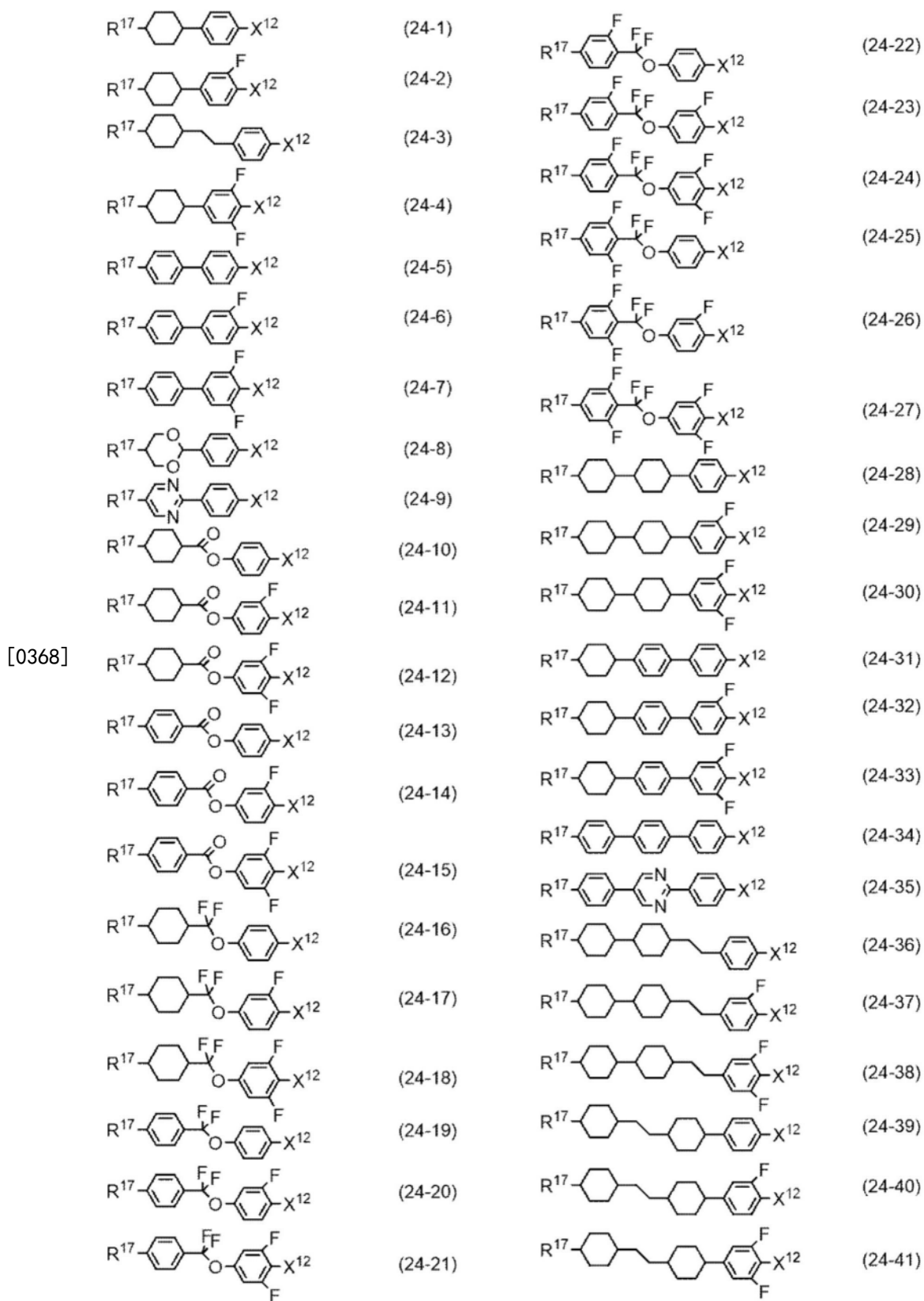
## [0364]



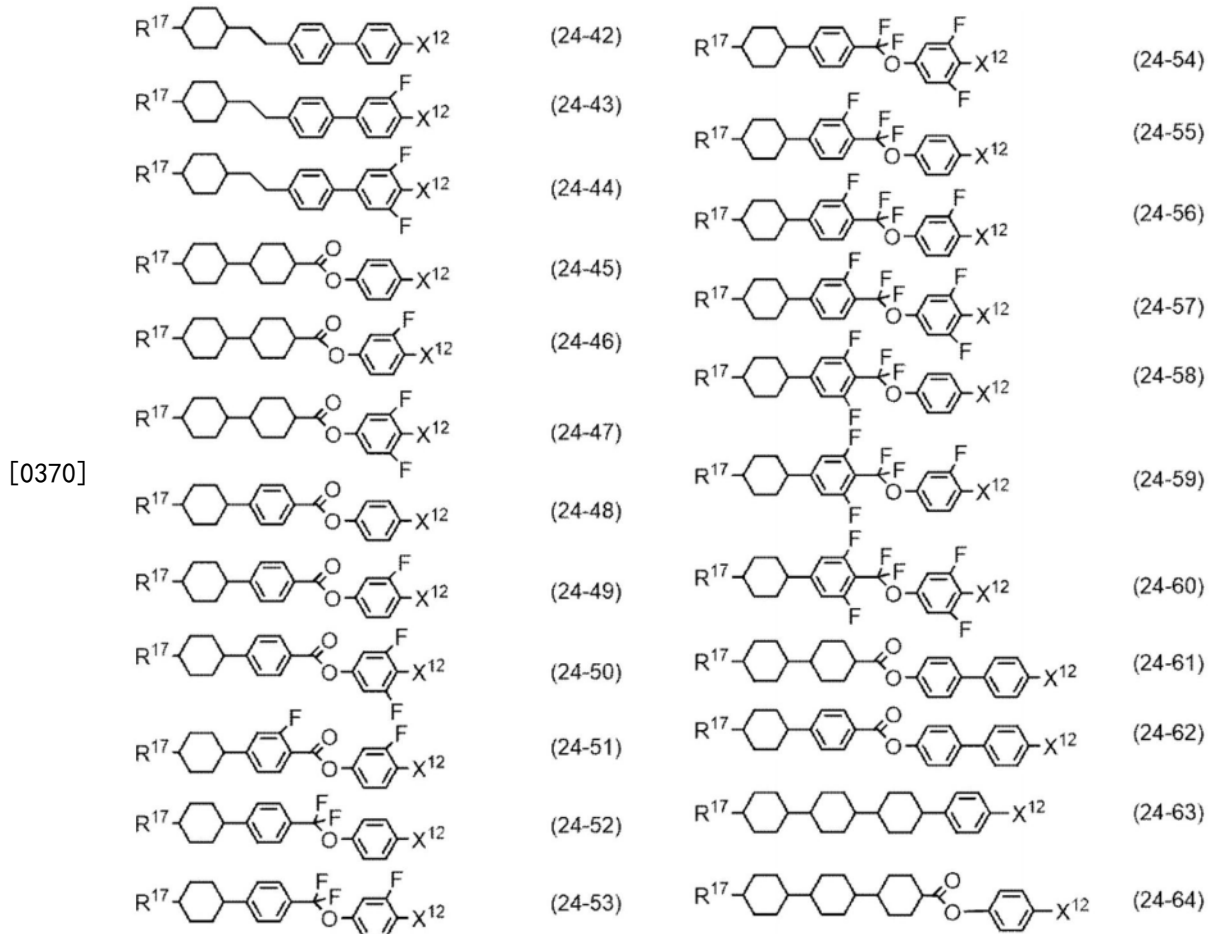
[0365] 成分(d)由于介电各向异性为正,且对于热或光的稳定性非常良好,因此可用于制备IPS、FFS、OCB等模式用的组合物的情况。基于液晶组合物的重量,成分(d)的含量适宜的是1重量%至99重量%的范围,优选为10重量%至97重量%的范围,进而优选为40重量%至95重量%的范围。在将成分(d)添加至介电各向异性为负的组合物中的情况下,成分(d)的含量优选为30重量%以下。通过添加成分(d),可调整组合物的弹性常数,并调整元件的电压-透过率曲线。

[0366] 成分(e)是右末端基为 $-C\equiv N$ 或 $-C\equiv C-C\equiv N$ 的化合物(24)。作为成分(e)的优选例,可列举:化合物(24-1)至化合物(24-64)。这些化合物中, $R^{17}$ 为碳数1至10的烷基或碳数2至10的烯基,所述 $R^{17}$ 中,至少一个 $-CH_2-$ 可经 $-O-$ 取代,至少一个氢可经氟取代。 $X^{12}$ 为 $-C\equiv N$ 或 $-C\equiv C-C\equiv N$ 。

## [0367] [化46]



[0369] [化47]



[0371] 成分(e)由于介电各向异性为正,且其值大,因此可用于制备TN等模式用的组合物的情况。通过添加所述成分(e),可提高组合物的介电各向异性。成分(e)具有扩大液晶相的温度范围、调整粘度、或者调整光学各向异性这一效果。成分(e)对于调整元件的电压-透过率曲线也有用。

[0372] 在制备TN等模式用的组合物的情况下,基于液晶组合物的重量,成分(e)的含量适宜的是1重量%至99重量%的范围,优选为10重量%至97重量%的范围,进而优选为40重量%至95重量%的范围。在将成分(e)添加至介电各向异性为负的组合物中的情况下,成分(e)的含量优选为30重量%以下。通过添加成分(e),可调整组合物的弹性常数,并调整元件的电压-透过率曲线。

[0373] 通过将自所述成分(b)至成分(e)中适当地选择的化合物与化合物(1)加以组合,可制备充分满足对于热或光的高的稳定性、高的上限温度、低的下限温度、小的粘度、适当的光学各向异性(即,大的光学各向异性或小的光学各向异性)、正或负且大的介电各向异性、大的比电阻、适当的弹性常数(即,大的弹性常数或小的弹性常数)等物性的至少一个的液晶组合物。包含此种组合物的元件具有可使用元件的广的温度范围、短的响应时间、大的电压保持率、低的阈电压、大的对比度比、小的闪烁率、及长寿命。

[0374] 若长时间使用元件,则有时在显示画面中产生闪烁(flicker)。闪烁率(%)可由(|施加正的电压时的亮度-施加负的电压时的亮度|/平均亮度)×100表示。即便长时间使用元件,闪烁率为0%至1%的范围的元件也难以在显示画面中产生闪烁(flicker)。推断所述闪烁与图像的残像相关联,在以交流来驱动时通过正帧与负帧之间的电位差而产生。含有

化合物(1)的组合物对于减少闪烁的产生也有用。

[0375] 3-2. 添加物

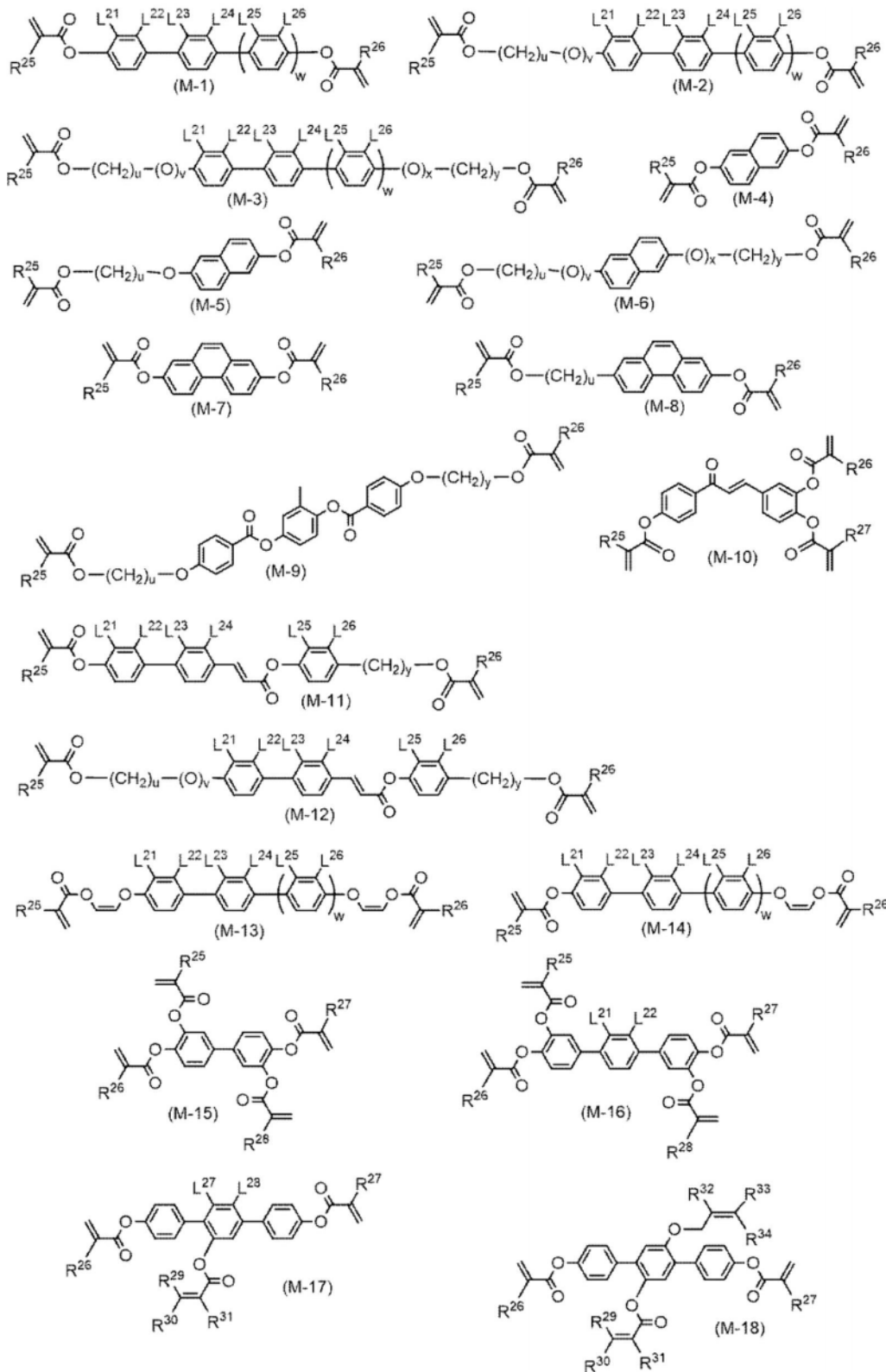
[0376] 液晶组合物是通过现有的方法来制备。例如,将成分化合物混合,而且通过加热使其彼此溶解。也可根据用途而在所述组合物中添加添加物。添加物的例子为聚合性化合物、聚合引发剂、聚合抑制剂、光学活性化合物、抗氧化剂、紫外线吸收剂、光稳定剂、热稳定剂、色素、消泡剂等。此种添加物已为本领域技术人员所熟知,且记载于文献中。

[0377] 在具有PSA(polymer sustained alignment;聚合物稳定取向)模式的液晶显示元件中,组合物含有聚合物。聚合性化合物是出于使组合物中生成聚合物的目的而添加。在对电极间施加电压的状态下照射紫外线,使聚合性化合物聚合,由此在组合物中生成聚合物。可通过所述方法来实现适当的预倾,因此可制作响应时间缩短且图像的残像改善的元件。

[0378] 聚合性化合物的优选例为丙烯酸酯、甲基丙烯酸酯、乙烯基化合物、乙烯基氧基化合物、丙烯基醚、环氧化合物(氧杂环丙烷、氧杂环丁烷)、及乙烯基酮。进而优选的例子为具有至少一个丙烯酰基氧基的化合物及具有至少一个甲基丙烯酰基氧基的化合物。进而优选的例子也包含具有丙烯酰基氧基与甲基丙烯酰基氧基两者的化合物。

[0379] 进而优选的例子为化合物(M-1)至化合物(M-18)。这些化合物中, $R^{25}$ 至 $R^{31}$ 独立地为氢或甲基; $R^{32}$ 、 $R^{33}$ 、及 $R^{34}$ 独立地为氢或碳数1至5的烷基, $R^{32}$ 、 $R^{33}$ 、及 $R^{34}$ 的至少一个为碳数1至5的烷基; $v$ 、 $w$ 、及 $x$ 独立地为0或1; $u$ 及 $y$ 独立地为1至10的整数。 $L^{21}$ 至 $L^{26}$ 独立地为氢或氟; $L^{27}$ 及 $L^{28}$ 独立地为氢、氟、或甲基。

[0380] [化48]



[0381]

[0382] 聚合性化合物可通过添加聚合引发剂而迅速地聚合。通过使反应条件最优化，可减少残存的聚合性化合物的量。光自由基聚合引发剂的例子为巴斯夫 (BASF) 公司的达罗卡 (Darocur) 系列中的 TP0、1173、及 4265，艳佳固 (Irgacure) 系列中的 184、369、500、651、784、819、907、1300、1700、1800、1850、及 2959。

[0383] 光自由基聚合引发剂的追加例为：4-甲氧基苯基-2,4-双(三氯甲基)三嗪、2-(4-

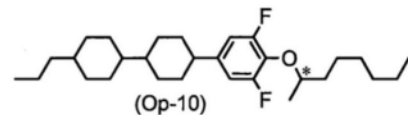
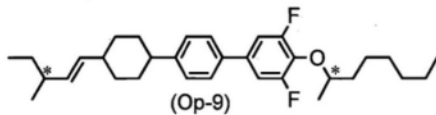
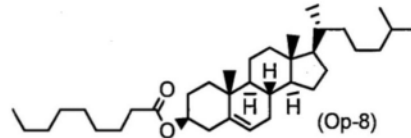
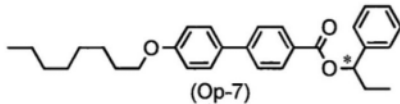
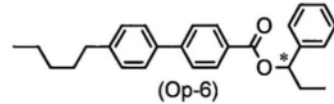
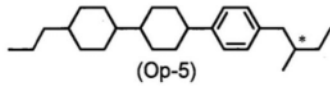
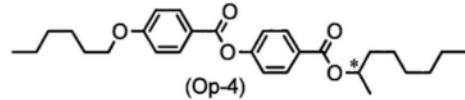
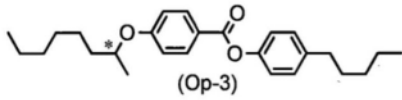
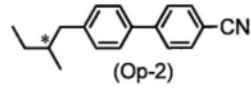
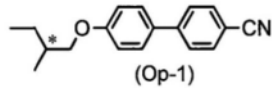
丁氧基苯乙烯基)-5-三氯甲基-1,3,4-噁二唑、9-苯基吡啶、9,10-苯并吩嗪、二苯甲酮/米氏酮(benzophenone/michler's ketone)混合物、六芳基联咪唑/巯基苯并咪唑混合物、1-(4-异丙基苯基)-2-羟基-2-甲基丙烷-1-酮、苯偶酰二甲基缩酮、2-甲基-1-[4-(甲硫基)苯基]-2-吗啉基丙烷-1-酮、2,4-二乙基氧杂蒽酮/对二甲基氨基苯甲酸甲酯混合物、二苯甲酮/甲基三乙醇胺混合物。

[0384] 在液晶组合物中添加光自由基聚合引发剂后,在施加电场的状态下照射紫外线,由此可进行聚合。然而,未反应的聚合引发剂或聚合引发剂的分解产物可能对元件引起图像的残像等显示不良。为了防止所述情况,也可在不添加聚合引发剂的状态下进行光聚合。所照射的光的优选的波长为150nm至500nm的范围。进而优选的波长为250nm至450nm的范围,最优选的波长为300nm至400nm的范围。

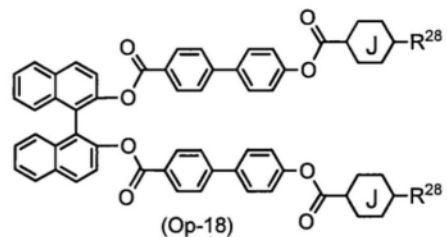
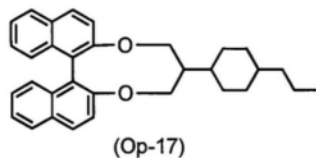
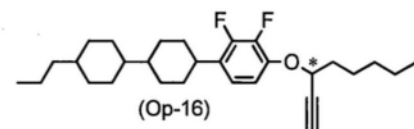
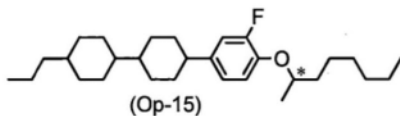
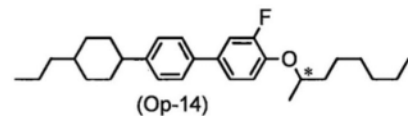
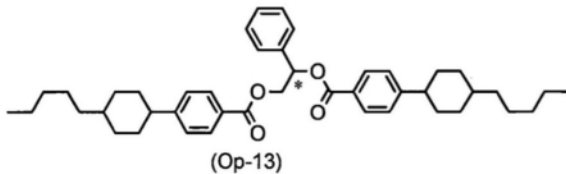
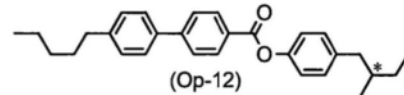
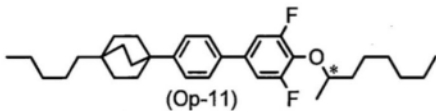
[0385] 在保管聚合性化合物时,为了防止聚合,也可添加聚合抑制剂。聚合性化合物通常是以未去除聚合抑制剂的状态添加至组合物中。聚合抑制剂的例子为对苯二酚、甲基对苯二酚那样的对苯二酚衍生物、4-叔丁基邻苯二酚、4-甲氧基苯酚、吩噻嗪等。

[0386] 光学活性化合物具有如下效果:通过对液晶分子诱发螺旋结构来赋予所需的扭曲角而防止逆扭曲。通过添加光学活性化合物而可调整螺旋节距。出于调整螺旋节距的温度依存性的目的,也可添加两种以上的光学活性化合物。作为光学活性化合物的优选例,可列举下述的化合物(0p-1)至化合物(0p-18)。化合物(0p-18)中,环J为1,4-亚环己基或1,4-亚苯基, $R^{28}$ 为碳数1至10的烷基。\*符号表示不对称碳。

[0387] [化49]



[0388]

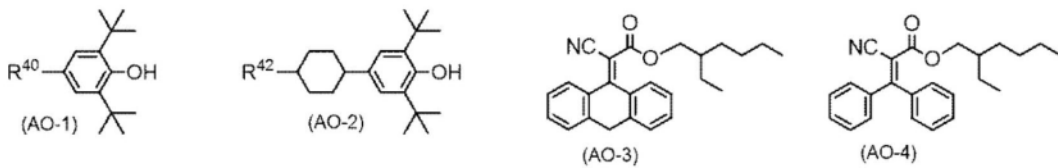


[0389] 抗氧化剂对于维持大的电压保持率而言有效。作为抗氧化剂的优选例,可列举:下述化合物(A0-1)及化合物(A0-2);艳佳诺(Irganox)415、艳佳诺(Irganox)565、艳佳诺(Irganox)1010、艳佳诺(Irganox)1035、艳佳诺(Irganox)3114、及艳佳诺(Irganox)1098(商品名;巴斯夫(BASF)公司)。紫外线吸收剂对于防止上限温度的降低而言有效。紫外线吸收剂的优选例为二苯甲酮衍生物、苯甲酸酯衍生物、三唑衍生物等,作为具体例,可列举:下述化合物(A0-3)及化合物(A0-4);帝奴彬(Tinuvin)329、帝奴彬(Tinuvin)P、帝奴彬(Tinuvin)326、帝奴彬(Tinuvin)234、帝奴彬(Tinuvin)213、帝奴彬(Tinuvin)400、帝奴彬

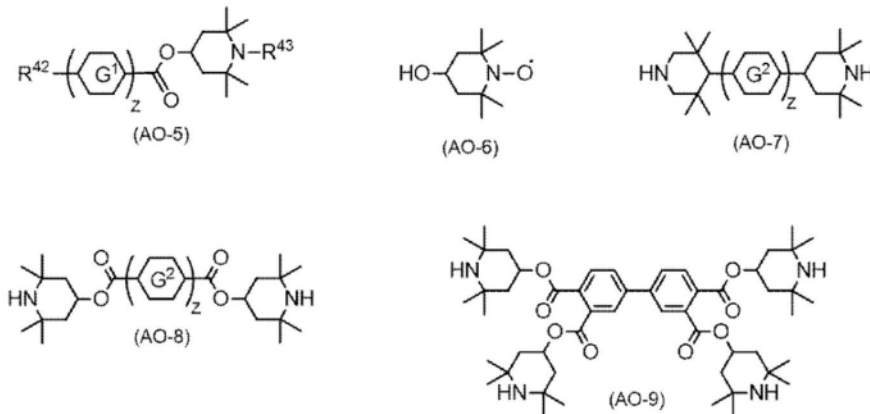
(Tinuvin) 328、及帝奴彬 (Tinuvin) 99-2 (商品名; 巴斯夫 (BASF) 公司); 及1,4-二氮杂双环[2.2.2]辛烷 (1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane, DABCO)。

[0390] 具有位阻的胺那样的光稳定剂对于维持大的电压保持率而言优选。作为光稳定剂的优选例, 可列举: 下述化合物 (AO-5)、化合物 (AO-6)、化合物 (AO-7)、化合物 (AO-8)、及化合物 (AO-9); 帝奴彬 (Tinuvin) 144、帝奴彬 (Tinuvin) 765、帝奴彬 (Tinuvin) 770DF、帝奴彬 (Tinuvin) 780 (商品名; 巴斯夫 (BASF) 公司); LA-52、LA-57、LA-77Y、及LA-77G (商品名; 艾迪科 (ADEKA) 公司)。热稳定剂对于维持大的电压保持率而言也有效, 作为优选例, 可列举易璐佛斯 (Irgafos) 168 (商品名; 巴斯夫 (BASF) 公司)。为了适合于宾主 (guest host, GH) 模式的元件, 而将偶氮系色素、蒽醌系色素等那样的二色性色素 (dichroic dye) 添加于组合物中。消泡剂对于防止起泡而言有效。消泡剂的优选例为二甲基硅油、甲基苯基硅油等。

[0391] [化50]



[0392]



[0393] 化合物 (AO-1) 中,  $R^{40}$  为碳数1至20的烷基、碳数1至20的烷氧基、 $-\text{COOR}^{41}$ 、或 $-(\text{CH}_2)_2-\text{COOR}^{41}$ , 此处,  $R^{41}$  为碳数1至20的烷基。化合物 (AO-2) 及化合物 (AO-5) 中,  $R^{42}$  为碳数1至20的烷基。化合物 (AO-5) 中,  $R^{43}$  为氢、甲基或 $\text{O}^\cdot$  (氧自由基); 环 $G^1$  为1,4-亚环己基或1,4-亚苯基; 化合物 (AO-7) 及化合物 (AO-8) 中, 环 $G^2$  为1,4-亚环己基、1,4-亚苯基、或至少一个氢经氟取代的1,4-亚苯基; 化合物 (AO-5)、化合物 (AO-7)、及化合物 (AO-8) 中,  $z$  为1、2、或3。

[0394] 4. 液晶显示元件

[0395] 液晶组合物可用于具有PC、TN、STN、OCB、PSA等运行模式、并以有源矩阵方式进行驱动的液晶显示元件。所述组合物也可用于具有PC、TN、STN、OCB、VA、IPS等运行模式、并以无源矩阵方式进行驱动的液晶显示元件。这些元件可应用于反射型、透过型、半透过型的任一类型。

[0396] 所述组合物也适合于向列型曲线排列相 (nematic curvilinear aligned phase, NCAP) 元件, 此处, 组合物经微胶囊化。所述组合物也可用于聚合物分散型液晶显示元件 (Polymer Dispersed Liquid Crystal Display, PDLCD)、或者聚合物网络液晶显示元件 (Polymer Network Liquid Crystal Display, PNLCD) 中。在这些组合物中, 大量地添加聚合性化合物。另一方面, 在基于液晶组合物的重量, 聚合性化合物的比例为10重量%以下

时,制作PSA模式的液晶显示元件。优选的比例为0.1重量%至2重量%的范围。进而优选的比例为0.2重量%至1.0重量%的范围。PSA模式的元件可通过有源矩阵方式、无源矩阵方式那样的驱动方式来进行驱动。此种元件也可适用于反射型、透过型、半透过型的任一类型。

[0397] [实施例]

[0398] 1. 化合物(1)的实施例

[0399] 通过实施例来更详细地说明本发明。实施例为典型例,因此本发明不受实施例的限制。化合物(1)是通过下述的顺序来合成。所合成的化合物是通过核磁共振(Nuclear Magnetic Resonance, NMR)分析等方法来鉴定。化合物或组合物的物性、以及元件的特性是通过下述的方法来测定。

[0400] NMR分析:测定时使用布鲁克拜厄斯宾(Bruker BioSpin)公司制造的DRX-500。在<sup>1</sup>H-NMR的测定中,使试样溶解于CDCl<sub>3</sub>等氘化溶媒中,以室温、500MHz、累计次数16次的条件进行测定。使用四甲基硅烷作为内部标准。在<sup>19</sup>F-NMR的测定中,使用CFCl<sub>3</sub>作为内部标准,以累计次数24次来进行。在核磁共振光谱的说明中,s是指单峰(singlet),d是指双重峰(doublet),t是指三重峰(triplet),q是指四重峰(quartet),quin是指五重峰(quintet),sext是指六重峰(sextet),m是指多重峰(multiplet),br是指宽峰(broad)。

[0401] 气相色谱分析:测定时使用岛津制作所制造的GC-2010型气相色谱仪。管柱使用安捷伦科技有限公司(Agilent Technologies Inc.)制造的毛细管柱DB-1(长度60m、内径0.25mm、膜厚0.25μm)。使用氦气(1mL/分钟)作为载气。将试样气化室的温度设定为300℃,将检测器(火焰离子化检测器(Flame Ionization Detector, FID))的温度设定为300℃。使试样溶解于丙酮中,以成为1重量%的溶液的方式进行制备,并将所获得的溶液1μL注入至试样气化室中。记录计使用岛津制作所制造的气相色谱溶液系统(GC Solution system)等。

[0402] 气相色谱质量分析:测定时使用岛津制作所制造的QP-2010Ultra型气相色谱质量分析计。管柱使用安捷伦科技有限公司(Agilent Technologies Inc.)制造的毛细管柱DB-1(长度60m、内径0.25mm、膜厚0.25μm)。使用氦气(1mL/分钟)作为载气。将试样气化室的温度设定为300℃,将离子源的温度设定为200℃,将离子化电压设定为70eV,将发光电流设定为150μA。使试样溶解于丙酮中,以成为1重量%的溶液的方式进行制备,并将所获得的溶液1μL注入至试样气化室中。记录计使用岛津制作所制造的气相色谱质谱溶液系统(GCMS Solution system)等。

[0403] 高效液相色谱(High Performance Liquid Chromatography, HPLC)分析:测定时使用岛津制作所制造的普罗米能斯(Prominence)(LC-20AD; SPD-20A)。管柱使用YMC制造的YMC-Pack ODS-A(长度150mm、内径4.6mm、粒子径5μm)。溶出液是将乙腈与水适宜混合来使用。作为检测器,适宜使用紫外线(Ultraviolet, UV)检测器、折射率(Reflective Index, RI)检测器、电晕(CORONA)检测器等。在使用UV检测器的情况下,检测波长是设为254nm。使试样溶解于乙腈中,以成为0.1重量%的溶液的方式进行制备,并将所述溶液1μL导入至试样室中。作为记录计,使用岛津制作所制造的C-R7Aplus。

[0404] 紫外可见分光分析:测定时使用岛津制作所制造的法码思拜(PharmaSpec)UV-1700。检测波长是设为190nm至700nm。使试样溶解于乙腈中,以成为0.01mmol/L的溶液的方式进行制备,放入至石英槽(光程长度1cm)中进行测定。

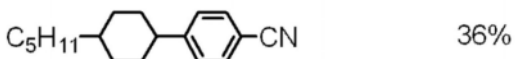
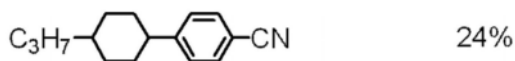
[0405] 测定试样：在测定相结构及转变温度(透明点、熔点、聚合引发温度等)时,使用化合物其自身作为试样。在测定向列相的上限温度、粘度、光学各向异性、介电各向异性等物性时,使用化合物与母液晶的混合物作为试样。

[0406] 在使用将化合物与母液晶混合而成的试样的情况下,如以下那样进行测定。将化合物15重量%与母液晶85重量%混合来制备试样。根据所述试样的测定值,依照以下的等式算出外推值,并记载所述值。 $\langle \text{外推值} \rangle = (100 \times \langle \text{试样的测定值} \rangle - \langle \text{母液晶的重量} \% \rangle \times \langle \text{母液晶的测定值} \rangle) / \langle \text{化合物的重量} \% \rangle$

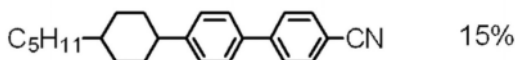
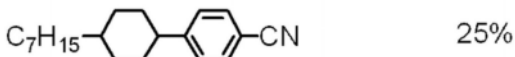
[0407] 于在所述比例下结晶(或近晶相)在25℃下析出的情况下,将化合物与母液晶的比例以10重量%:90重量%、5重量%:95重量%、1重量%:99重量%的顺序变更,并以结晶(或近晶相)在25℃下不再析出的比例测定试样的物性。再者,只要并无特别说明,则化合物与母液晶的比例为15重量%:85重量%。

[0408] 在化合物的介电各向异性为零或正时,使用下述的母液晶(A)。以重量%来表示各成分的比例。

[0409] [化51]

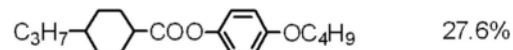
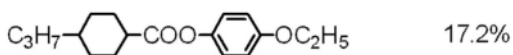


[0410]

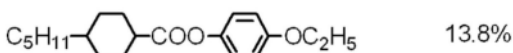
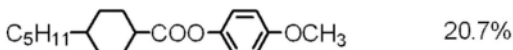
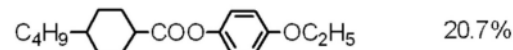


[0411] 在化合物的介电各向异性为零或负时,使用下述的母液晶(B)。以重量%来表示各成分的比例。

[0412] [化52]

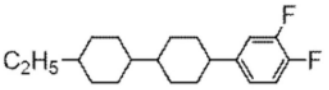
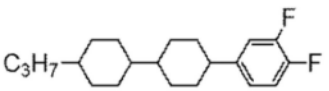
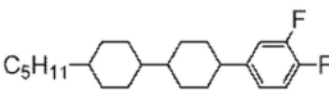
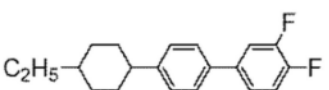
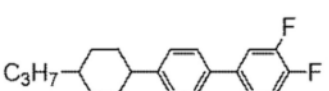
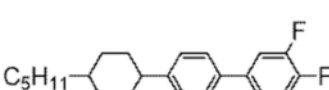
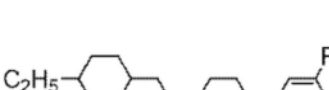
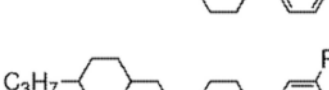



[0413]



[0414] 母液晶(C):也使用将下述的氟系化合物设为成分的母液晶(C)。以重量%来表示母液晶(C)的成分的比例。

[0415] [化53]

		16.67%
		16.67%
		16.67%
		6.25%
[0416]		6.25%
		12.49%
		12.50%
		6.25%
		6.25%

[0417] 化合物与母液晶 (C) 的比例是设为20重量%:80重量%。于在所述比例下结晶(或近晶相)在25℃下析出的情况下,将化合物与母液晶 (C) 的比例以15重量%:85重量%、10重量%:90重量%、5重量%:95重量%、1重量%:99重量%的顺序变更,并以结晶(或近晶相)在25℃下不再析出的比例测定试样的物性。再者,只要并无特别说明,则化合物与母液晶 (C) 的比例为20重量%:80重量%。

[0418] 测定方法:物性的测定是通过下述方法来进行。这些方法大多记载于由社团法人电子信息技术产业协会 (JEITA; Japan Electronics and Information Technology Industries Association) 审议制定的JEITA规格 (JEITA • ED-2521B) 中。也使用对其加以修饰而成的方法。在用于测定的TN元件中未安装薄膜晶体管 (TFT)。

[0419] (1) 相结构:将试样置于包括偏光显微镜的熔点测定装置的热板 (梅特勒 (Mettler) 公司的FP-52型加热台) 上。对所述试样,一边以3℃/分钟的速度进行加热,一边利用偏光显微镜观察相状态与其变化,确定相的种类。

[0420] (2) 转变温度 (℃):测定时使用珀金埃尔默 (Perkin Elmer) 公司制造的扫描热量计戴梦得 (Diamond) DSC系统或者SII纳米科技 (SII NanoTechnology) 公司制造的高感度示差扫描热量计X-DSC7000。对试样以3℃/分钟的速度进行升降温,通过外推而求出伴随试样的相变化的吸热峰值或发热峰值的引发点,决定转变温度。化合物的熔点、聚合引发温度也

是使用所述装置来测定。有时将化合物自固体转变为近晶相、向列相等液晶相的温度简称为“液晶相的下限温度”。有时将化合物自液晶相转变为液体的温度简称为“透明点”。

[0421] 将结晶表示为C。在可将结晶区分成两种的情况下,分别表示为 $C_1$ 或 $C_2$ 。将近晶相表示为S,将向列相表示为N。在进行近晶A相、近晶B相、近晶C相、及近晶F相那样的相的区分的情况下,分别表示为 $S_A$ 、 $S_B$ 、 $S_C$ 、及 $S_F$ 。将液体(等向性)表示为I。转变温度例如是以“C 50.0N 100.0I”的方式表述。其表示由结晶转变为向列相的温度为 $50.0^{\circ}\text{C}$ ,由向列相转变为液体的温度为 $100.0^{\circ}\text{C}$ 。

[0422] (3) 化合物的相容性:制备以化合物的比例成为20重量%、15重量%、10重量%、5重量%、3重量%、或1重量%的方式将母液晶与化合物混合而成的试样。将试样放入至玻璃瓶中,并在 $-10^{\circ}\text{C}$ 或 $-20^{\circ}\text{C}$ 的冷冻库中保管一定期间。观察试样的向列相是否得到维持、或者结晶(或近晶相)是否析出。使用向列相得到维持的条件作为相容性的尺度。有时也视需要变更化合物的比例或冷冻库的温度。

[0423] (4) 向列相的上限温度( $T_{NI}$ 或NI; $^{\circ}\text{C}$ ):将试样置于包括偏光显微镜的熔点测定装置的热板上,以 $1^{\circ}\text{C}/\text{分钟}$ 的速度进行加热。对试样的一部分自向列相变化为各向同性液体时的温度进行测定。在试样为化合物(1)与母液晶的混合物时,以 $T_{NI}$ 的记号来表示。在试样为化合物(1)与选自化合物(2)至化合物(15)中的化合物的混合物时,以NI的记号来表示。有时将向列相的上限温度简称为“上限温度”。

[0424] (5) 向列相的下限温度( $T_C$ ; $^{\circ}\text{C}$ ):将具有向列相的试样放入至玻璃瓶中,在 $0^{\circ}\text{C}$ 、 $-10^{\circ}\text{C}$ 、 $-20^{\circ}\text{C}$ 、 $-30^{\circ}\text{C}$ 、及 $-40^{\circ}\text{C}$ 的冷冻器中保管10天后,观察液晶相。例如,在试样在 $-20^{\circ}\text{C}$ 下保持向列相的状态,而在 $-30^{\circ}\text{C}$ 下变化为结晶或近晶相时,将 $T_C$ 记载为 $<-20^{\circ}\text{C}$ 。有时将向列相的下限温度简称为“下限温度”。

[0425] (6) 粘度(体积粘度; $\eta$ ;在 $20^{\circ}\text{C}$ 下测定; $\text{mPa}\cdot\text{s}$ ):测定时使用东京计器股份有限公司制造的E型旋转粘度计。

[0426] (7) 光学各向异性(折射率各向异性;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定; $\Delta n$ ):测定是使用波长 $589\text{nm}$ 的光,通过在接目镜上安装有偏光板的阿贝折射计来进行。朝一方向摩擦主棱镜的表面后,将试样滴加至主棱镜上。在偏光的方向与摩擦的方向平行时测定折射率( $n_{//}$ )。在偏光的方向与摩擦的方向垂直时测定折射率( $n_{\perp}$ )。光学各向异性( $\Delta n$ )的值是根据 $\Delta n = n_{//} - n_{\perp}$ 的等式来计算。

[0427] (8) 比电阻( $\rho$ ;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定; $\Omega\text{cm}$ ):将试样 $1.0\text{mL}$ 注入至包括电极的容器中。对所述容器施加直流电压(10V),并测定10秒后的直流电流。比电阻是根据以下的等式来算出。  
(比电阻) = {(电压) × (容器的电容)} / {(直流电流) × (真空的介电常数)}。

[0428] (9) 电压保持率(VHR-1;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定;%):用于测定的TN元件具有聚酰亚胺取向膜,而且2片玻璃基板的间隔(单元间隙)为 $5\mu\text{m}$ 。所述元件是在放入试样后利用通过紫外线而硬化的接着剂进行密封。对所述元件施加脉冲电压(5V、60微秒)来进行充电。利用高速电压计在 $16.7\text{ms}$ 的期间内测定衰减的电压,求出单位周期中的电压曲线与横轴之间的面积A。面积B为未衰减时的面积。电压保持率是由面积A相对于面积B的百分率来表示。

[0429] (10) 电压保持率(VHR-2;在 $80^{\circ}\text{C}$ 下测定;%):除了在 $80^{\circ}\text{C}$ 下进行测定来代替在 $25^{\circ}\text{C}$ 下进行测定以外,通过所述方法来测定电压保持率。由VHR-2的记号来表示所获得的结果。

[0430] (11) 闪烁率 (在25℃下测定; %): 测定时使用横河电机 (股) 制造的多媒体显示器检测仪3298F。光源为发光二极管 (Light Emitting Diode, LED)。将试样放入至2片玻璃基板的间隔 (单元间隙) 为3.5 $\mu\text{m}$ 、摩擦方向为反平行的正常显黑模式 (normally black mode) 的FFS元件中。使用通过紫外线而硬化的接着剂对所述元件进行密封。对所述元件施加电压, 并测定透过元件的光量成为最大的电压。一边对元件施加所述电压, 一边使传感器部靠近元件, 并读取所显示的闪烁率。

[0431] 关于介电各向异性为正的试样与介电各向异性为负的试样, 物性的测定法有时不同。介电各向异性为正时的测定法记载于测定 (12a) 至测定 (16a) 中。介电各向异性为负的情况记载于测定 (12b) 至测定 (16b) 中。

[0432] (12a) 粘度 (旋转粘度;  $\gamma_1$ ; 在25℃下测定;  $\text{mPa} \cdot \text{s}$ ; 介电各向异性为正的试样): 依照M. 今井 (M. Imai) 等人的《分子晶体与液晶 (Molecular Crystals and Liquid Crystals)》(Vol. 259, 37 (1995)) 中所记载的方法来进行测定。将试样放入至扭转角为0度而且2片玻璃基板的间隔 (单元间隙) 为5 $\mu\text{m}$ 的TN元件中。以每次0.5V自16V至19.5V为止对所述元件阶段性地施加电压。在未施加电压0.2秒后, 以仅1个矩形波 (矩形脉冲; 0.2秒) 与未施加 (2秒) 的条件反复施加电压。测定通过所述施加而产生的暂态电流 (transient current) 的峰值电流 (peak current) 与峰值时间 (peak time)。根据这些测定值与M. 今井 (M. Imai) 等人的论文40页的等式 (8) 而获得旋转粘度的值。所述计算中所需的介电各向异性的值是使用所述测定了旋转粘度的元件并利用以下记载的方法而求出。

[0433] (12b) 粘度 (旋转粘度;  $\gamma_1$ ; 在25℃下测定;  $\text{mPa} \cdot \text{s}$ ; 介电各向异性为负的试样): 依照M. 今井 (M. Imai) 等人的《分子晶体与液晶 (Molecular Crystals and Liquid Crystals)》(Vol. 259, 37 (1995)) 中所记载的方法来进行测定。将试样放入至2片玻璃基板的间隔 (单元间隙) 为20 $\mu\text{m}$ 的VA元件中。以每次1V自39V至50V为止对所述元件阶段性地施加电压。在未施加电压0.2秒后, 以仅1个矩形波 (矩形脉冲; 0.2秒) 与未施加 (2秒) 的条件反复施加电压。测定通过所述施加而产生的暂态电流 (transient current) 的峰值电流 (peak current) 与峰值时间 (peak time)。根据这些测定值与M. 今井 (M. Imai) 等人的论文40页的等式 (8) 而获得旋转粘度的值。所述计算中所需的介电各向异性是通过下述的介电各向异性一项来测定。

[0434] (13a) 介电各向异性 ( $\Delta \epsilon$ ; 在25℃下测定; 介电各向异性为正的试样): 将试样放入至2片玻璃基板的间隔 (单元间隙) 为9 $\mu\text{m}$ 而且扭转角为80度的TN元件中。对所述元件施加正弦波 (10V, 1kHz), 在2秒后测定液晶分子的长轴方向上的介电常数 ( $\epsilon_{//}$ )。对所述元件施加正弦波 (0.5V, 1kHz), 在2秒后测定液晶分子的短轴方向上的介电常数 ( $\epsilon_{\perp}$ )。介电各向异性的值是根据  $\Delta \epsilon = \epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}$  的等式来计算。

[0435] (13b) 介电各向异性 ( $\Delta \epsilon$ ; 在25℃下测定; 介电各向异性为负的试样): 介电各向异性的值是根据  $\Delta \epsilon = \epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}$  的等式来计算。介电常数 ( $\epsilon_{//}$  及  $\epsilon_{\perp}$ ) 是以如下方式测定。

[0436] 介电常数 ( $\epsilon_{//}$ ) 的测定: 在经充分清洗的玻璃基板上涂布十八基三乙氧基硅烷 (0.16mL) 的乙醇 (20mL) 溶液。利用旋转器使玻璃基板旋转后, 在150℃下加热1小时。将试样放入至2片玻璃基板的间隔 (单元间隙) 为4 $\mu\text{m}$ 的VA元件中, 并利用通过紫外线而硬化的接着剂对所述元件进行密封。对所述元件施加正弦波 (0.5V, 1kHz), 2秒后测定液晶分子的长轴方向上的介电常数 ( $\epsilon_{//}$ )。

[0437] 介电常数( $\epsilon_{\perp}$ )的测定:在经充分清洗的玻璃基板上涂布聚酰亚胺溶液。将所述玻璃基板煅烧后,对所获得的取向膜进行摩擦处理。将试样放入至2片玻璃基板的间隔(单元间隙)为 $9\mu\text{m}$ 、扭转角为80度的TN元件中。对所述元件施加正弦波(0.5V,1kHz),在2秒后测定液晶分子的短轴方向上的介电常数( $\epsilon_{\perp}$ )。

[0438] (14a) 弹性常数(K;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定;pN;介电各向异性为正的试样):测定时使用横河惠普(Yokogawa-Hewlett-Packard)股份有限公司制造的HP4284A型LCR计。将试样放入至2片玻璃基板的间隔(单元间隙)为 $20\mu\text{m}$ 的水平取向元件中。对所述元件施加0V至20V的电荷,并测定静电电容(C)及施加电压(V)。使用《液晶元件手册(Liquid Crystal Device Handbook)》(日刊工业新闻社)75页中的等式(2.98)、等式(2.101)对这些测定值进行拟合,并根据等式(2.99)获得 $K_{11}$ 及 $K_{33}$ 的值。接着,将刚才所求出的 $K_{11}$ 及 $K_{33}$ 的值用于171页中的等式(3.18)中来算出 $K_{22}$ 。弹性常数K是由如此求出的 $K_{11}$ 、 $K_{22}$ 、及 $K_{33}$ 的平均值来表示。

[0439] (14b) 弹性常数( $K_{11}$ 及 $K_{33}$ ;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定;pN;介电各向异性为负的试样):测定时使用东阳特克尼卡(TOYO Technica)股份有限公司制造的EC-1型弹性常数测定器。将试样放入至2片玻璃基板的间隔(单元间隙)为 $20\mu\text{m}$ 的垂直取向元件中。对所述元件施加20V至0V的电荷,并测定静电电容(C)及施加电压(V)。使用《液晶元件手册(Liquid Crystal Device Handbook)》(日刊工业新闻社)75页中的等式(2.98)、等式(2.101)对这些值进行拟合,并根据等式(2.100)获得弹性常数的值。

[0440] (15a) 阈电压( $V_{th}$ ;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定;V;介电各向异性为正的试样):测定时使用大冢电子股份有限公司制造的LCD5100型亮度计。光源为卤素灯。将试样放入至2片玻璃基板的间隔(单元间隙)为 $0.45/\Delta n(\mu\text{m})$ 、扭转角为80度的正常显白模式(normally white mode)的TN元件中。对所述元件施加的电压(32Hz,矩形波)是以0.02V为单位,自0V阶段性地增加至10V。此时,自垂直方向对元件照射光,并测定透过元件的光量。制成所述光量达到最大时透过率为100%、且所述光量为最小时透过率为0%的电压-透过率曲线。阈电压是由透过率达到90%时的电压来表示。

[0441] (15b) 阈电压( $V_{th}$ ;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定;V;介电各向异性为负的试样):测定时使用大冢电子股份有限公司制造的LCD5100型亮度计。光源为卤素灯。将试样放入至2片玻璃基板的间隔(单元间隙)为 $4\mu\text{m}$ 、摩擦方向为反平行的正常显黑模式(normally black mode)的VA元件中,并使用通过紫外线而硬化的接着剂对所述元件进行密封。对所述元件施加的电压(60Hz,矩形波)是以0.02V为单位,自0V阶段性地增加至20V。此时,自垂直方向对元件照射光,并测定透过元件的光量。制成所述光量达到最大时透过率为100%、且所述光量为最小时透过率为0%的电压-透过率曲线。阈电压是由透过率达到10%时的电压来表示。

[0442] (16a) 响应时间( $\tau$ ;在 $25^{\circ}\text{C}$ 下测定;ms;介电各向异性为正的试样):测定时使用大冢电子股份有限公司制造的LCD5100型亮度计。光源为卤素灯。将低通滤波器(Low-pass filter)设定为5kHz。将试样放入至2片玻璃基板的间隔(单元间隙)为 $5.0\mu\text{m}$ 、扭转角为80度的正常显白模式(normally white mode)的TN元件中。对所述元件施加矩形波(60Hz,5V,0.5秒)。此时,自垂直方向对元件照射光,并测定透过元件的光量。在所述光量达到最大时视作透过率为100%,在所述光量为最小时视作透过率为0%。上升时间( $\tau_r$ :rise time;毫秒)是透过率自90%变化为10%所需的时间。下降时间( $\tau_f$ :fall time;毫秒)是透过率自10%变化为90%所需的时间。响应时间是由以所述方式求出的上升时间与下降时间的和来

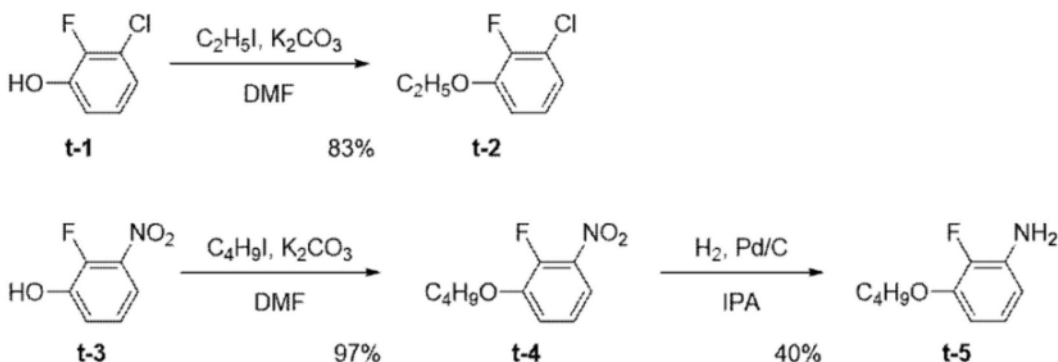
表示。

[0443] (16b) 响应时间 ( $\tau$ ; 在25°C下测定; ms; 介电各向异性为负的试样): 测定时使用大冢电子股份有限公司制造的LCD5100型亮度计。光源为卤素灯。将低通滤波器 (Low-pass filter) 设定为5kHz。将试样放入至2片玻璃基板的间隔 (单元间隙) 为3.2 $\mu$ m、摩擦方向为反平行的正常显黑模式 (normally black mode) 的图像垂直取向 (Patterned Vertical Alignment, PVA) 元件中。使用通过紫外线而硬化的接着剂对所述元件进行密封。对所述元件施加1分钟稍许超过阈电压的程度的电压, 接着, 一边施加5.6V的电压, 一边照射8分钟23.5mW/cm<sup>2</sup>的紫外线。对所述元件施加矩形波 (60Hz, 10V, 0.5秒)。此时, 自垂直方向对元件照射光, 并测定透过元件的光量。在所述光量达到最大时视作透过率为100%, 在所述光量为最小时视作透过率为0%。响应时间是由透过率自90%变化为10%所需的时间 (下降时间; fall time; 毫秒) 来表示。

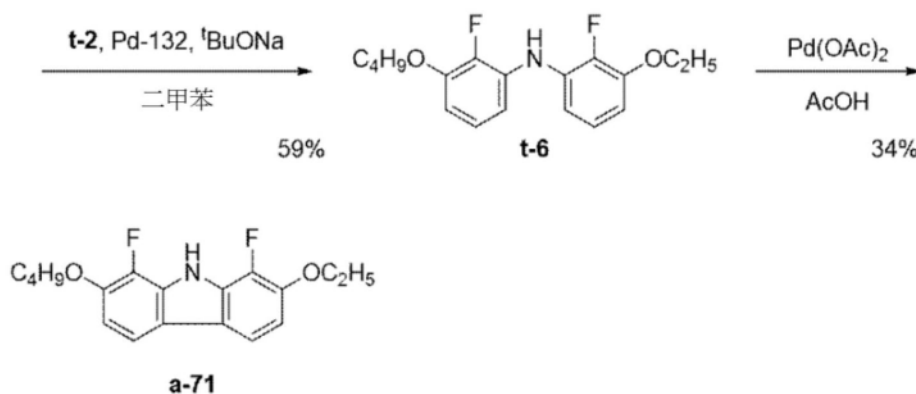
[0444] [合成例1]

[0445] 化合物 (a-71) 的合成

[0446] [化54]



[0447]



[0448] 第一步骤: 化合物 (t-2) 的合成

[0449] 使市售的化合物 (t-1) (10.0g, 68.2mmol)、碘乙烷 (12.8g, 81.9mmol)、碳酸钾 (18.9g, 136mmol) 溶解于N,N-二甲基甲酰胺 (100mL) 中, 在70°C~80°C下搅拌2小时。反应结束后, 冷却至室温, 注入至水中, 利用甲苯进行3次提取。利用水、饱和氯化钠水溶液对合并的有机层进行清洗后, 以无水硫酸镁加以干燥, 进行减压浓缩。利用硅胶色谱法 (庚烷: 甲苯=4:1) 对残渣进行精制, 由此以无色液体的形式获得化合物 (t-2) (9.83g, 56.3mmol)。

[0450] 第二步骤: 化合物 (t-4) 的合成

[0451] 使化合物(t-3) (10.0g, 63.7mmol)、1-碘丁烷(14.1g, 76.4mmol)、碳酸钾(17.6g, 127mmol)溶解于DMF(100mL)中,在70℃~80℃下搅拌2小时。反应结束后,冷却至室温,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水、饱和氯化钠水溶液对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:甲苯=1:1)对残渣进行精制,由此以黄色液体的形式获得化合物(t-4) (13.2g, 61.9mmol)。

[0452] 第三步骤:化合物(t-5)的合成

[0453] 使化合物(t-4) (13.2g, 61.9mmol)溶解于2-丙醇(140mL)中,添加5%钯-碳(0.660g),进行氢化。对催化剂进行过滤分离后,进行减压浓缩,利用硅胶色谱法(甲苯)对残渣进行精制,由此以褐色固体的形式获得化合物(t-5) (4.50g, 24.6mmol)。

[0454] 第四步骤:化合物(t-6)的合成

[0455] 使化合物(t-2) (4.29g, 24.6mmol)、化合物(t-5) (4.50g, 24.6mmol)、叔丁氧基钠(3.54g, 36.8mmol)及Pd(amphos)Cl<sub>2</sub>(0.174g)溶解于二甲苯(50mL)中,在110℃下搅拌3小时。反应结束后,冷却至室温,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水、饱和氯化钠水溶液对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:甲苯=4:1)对残渣进行精制,由此以桃色液体的形式获得化合物(t-6) (4.67g, 14.5mmol)。

[0456] 第五步骤:化合物(a-71)的合成

[0457] 使化合物(t-6) (4.67g, 14.5mmol)溶解于乙酸(80mL)中,加入乙酸钡(3.91g, 17.4mmol),加热回流50分钟。反应结束后,冷却至室温,利用硅酸镁(Florisil)/硅藻土进行过滤,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水、饱和氯化钠水溶液对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:甲苯=1:1)对残渣进行精制,由此以无色固体的形式获得化合物(a-71) (1.61g, 5.04mmol)。

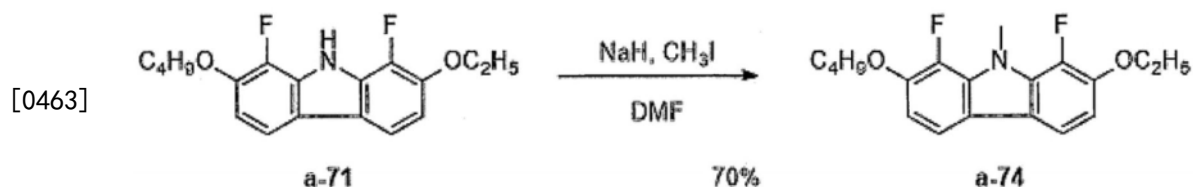
[0458] <sup>1</sup>H-NMR(CDCl<sub>3</sub>; δppm): 8.13(brs, J=8.13Hz, 1H), 7.58(d, J=8.6Hz, 2H), 6.89(ddd, J=7.9, 7.8, 1.1Hz, 2H), 4.21(q, J=7.0Hz, 2H), 4.14(t, J=6.6Hz, 2H), 1.84(quin, J=6.7Hz, 2H), 1.54(sext, J=7.5Hz, 2H), 1.48(t, J=7.1Hz, 3H), 1.00(t, J=7.4Hz, 3H)。

[0459] 相转变温度: C 92.4 I. 上限温度(NI) = -45.7℃; 介电各向异性(Δε) = -1.48; 光学各向异性(Δn) = 0.147; 粘度(η) = 127.4mPa·s。

[0460] [合成例2]

[0461] 化合物(a-74)的合成

[0462] [化55]



[0464] 使化合物(a-71) (0.710g, 2.22mmol)溶解于N,N-二甲基甲酰胺(10mL)中,进行冰浴冷却,每次少量加入氢化钠(0.196g, 4.49mmol),搅拌30分钟。滴加碘甲烷(0.821g, 2.59mmol),一边进行冰浴冷却一边搅拌1小时。反应结束后,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:甲苯=1:1)对残渣进行精制,由此以无色固体的形式获得化合物(a-74)

(0.52g, 1.56mmol)。

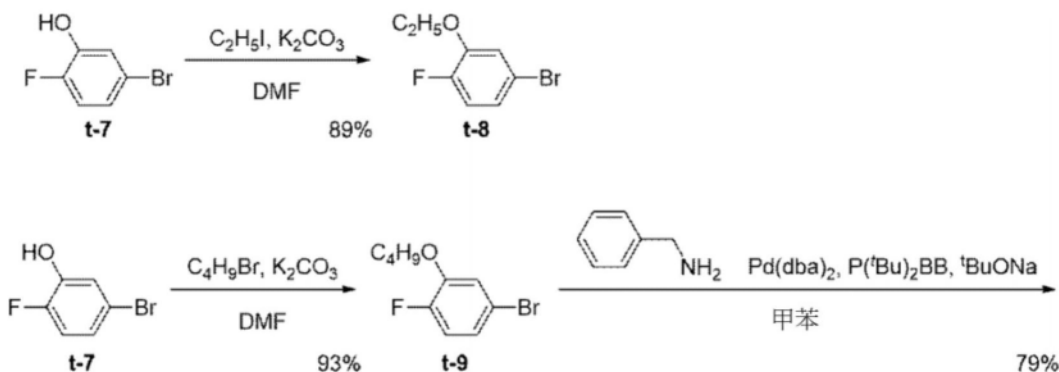
[0465]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$ ppm): 7.56 (d,  $J=8.5\text{Hz}$ , 2H), 6.86 (dd,  $J=7.8, 7.8, 1.4\text{Hz}$ , 1H), 4.21 (s, 3H), 4.20 (q,  $J=7.0\text{Hz}$ , 2H), 4.12 (t,  $J=6.6\text{Hz}$ , 2H), 1.84 (quin,  $J=6.6\text{Hz}$ , 2H), 1.55 (sext,  $J=7.4\text{Hz}$ , 2H), 1.48 (t,  $J=7.0\text{Hz}$ , 3H), 1.00 (t,  $J=7.4\text{Hz}$ , 3H)。

[0466] 相转变温度:  $C$  71.0 I. 上限温度 (NI) = 37.0°C; 介电各向异性 ( $\Delta\epsilon$ ) = -3.14; 光学各向异性 ( $\Delta n$ ) = 0.194; 粘度 ( $\eta$ ) = 54.1 mPa · s。

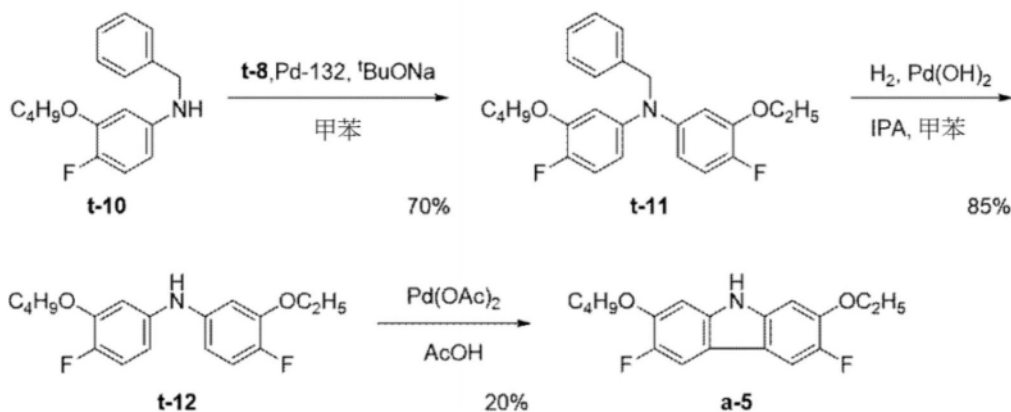
[0467] [合成例3]

[0468] 化合物 (a-5) 的合成

[0469] [化56]



[0470]



[0471] 第一步骤: 化合物 (t-8) 的合成

[0472] 使市售的化合物 (t-7) (12.5g, 64.1mmol)、碳酸钾 (11.6g, 83.4mmol) 溶解于 N,N-二甲基甲酰胺 (125mL) 中, 升温至 60°C。滴加碘乙烷 (11.2g, 70.6mmol) 的 N,N-二甲基甲酰胺 (20mL) 溶液, 在 60°C 下搅拌 6 小时 30 分钟。反应结束后, 冷却至室温, 注入至水中, 利用甲苯进行 3 次提取。利用 1N-NaOH 水溶液、水对合并的有机层进行清洗后, 以无水硫酸镁加以干燥, 进行减压浓缩。利用短程硅胶色谱法 (庚烷) 对残渣进行精制, 由此以无色液体的形式获得化合物 (t-8) (12.5g, 56.9mmol)。

[0473] 第二步骤: 化合物 (t-9) 的合成

[0474] 使市售的化合物 (t-7) (12.5g, 65.5mmol)、1-溴丁烷 (9.86g, 72.0mmol)、碳酸钾 (11.8g, 85.1mmol) 溶解于 N,N-二甲基甲酰胺 (125mL) 中, 在 80°C 下搅拌 3 小时。反应结束后, 冷却至室温, 注入至水中, 利用甲苯进行 3 次提取。利用 2N-NaOH 水溶液、水对合并的有机层进行清洗后, 以无水硫酸镁加以干燥, 进行减压浓缩。利用短程硅胶色谱法 (庚烷) 对残渣进

行精制,由此以淡茶色液体的形式获得化合物(t-9)(14.2g,57.5mmol)。

[0475] 第三步骤:化合物(t-10)的合成

[0476] 将化合物(t-9)(14.0g,56.7mmol)、苄基胺(7.29g,68.0mmol)、叔丁氧基钠(8.17g,85.0mmol)溶解于甲苯(196mL)中,进行减压脱气,加入钨(0)双(二亚苄基丙酮)(0.652g)、2-(二叔丁基膦基)联苯(0.676g,2.27mmol),在60℃下进行加热搅拌。在发热平息时,逐渐升温至回流温度,加热回流3小时。反应结束后,冷却至室温,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:乙酸乙酯=9:1)对残渣进行精制,由此以褐色液体的形式获得化合物(t-10)(15.0g,54.9mmol)。

[0477] 第四步骤:化合物(t-11)的合成

[0478] 使化合物(t-10)(11.0g,40.2mmol)、化合物(t-8)(8.82g,40.2mmol)、叔丁氧基钠(5.80g,60.4mmol)及Pd(amphos)Cl<sub>2</sub>(0.0285g)溶解于甲苯(330mL)中,加热回流3小时。反应结束后,冷却至室温,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水、饱和氯化钠水溶液对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:甲苯=1:1)对残渣进行精制,由此以无色液体的形式获得化合物(t-11)(11.6g,28.2mmol)。

[0479] 第五步骤:化合物(t-12)的合成

[0480] 使化合物(t-11)(11.6g,28.2mmol)溶解于甲苯(30mL)及2-丙醇(60mL)中,添加氢氧化钨(0.580g),进行氢化。对催化剂进行过滤分离后,进行减压浓缩,利用硅胶色谱法(庚烷:乙酸乙酯=4:1)对残渣进行精制,由此以褐色液体的形式获得化合物(t-12)(7.70g,24.0mmol)。

[0481] 第六步骤:化合物(a-5)的合成

[0482] 使化合物(t-12)(6.70g,20.9mmol)溶解于乙酸(110mL)中,加入乙酸钨(5.61g,25.0mmol),加热回流50分钟。反应结束后,冷却至室温,利用硅酸镁/硅藻土进行过滤,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水、饱和氯化钠水溶液对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:甲苯=1:1)对残渣进行精制,由此以无色固体的形式获得化合物(a-5)(1.34g,4.20mmol)。

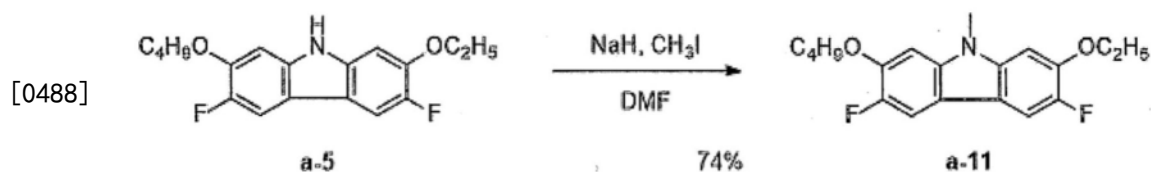
[0483] <sup>1</sup>H-NMR(CDCl<sub>3</sub>;δppm):7.80(brs,1H),7.56(dd,J=11.0,2.1Hz,2H),6.94(d,J=6.9Hz,1H),4.15(q,J=7.0Hz,2H),4.08(t,J=6.6Hz,2H),1.86(quin,J=6.6,2H),1.54(sext,J=7.5Hz,2H),1.50(t,J=7.0Hz,3H),1.00(t,J=7.4Hz,3H)。

[0484] 相转变温度:C 217.3 I.上限温度(NI)=71.0℃;介电各向异性(Δε)=-22.5;光学各向异性(Δn)=0.220;粘度(η)=202.9mPa·s。

[0485] [合成例4]

[0486] 化合物(a-11)的合成

[0487] [化57]



[0489] 使化合物 (a-5) (0.26g, 0.81mmol) 溶解于 N,N-二甲基甲酰胺 (5.0mL) 中, 进行冰浴冷却, 每次少量加入氢化钠 (0.0718g, 1.64mmol), 搅拌 30 分钟。滴加碘甲烷 (0.301g, 2.11mmol), 一边进行冰浴冷却一边搅拌 3 小时。反应结束后, 注入至水中, 利用甲苯进行 3 次提取。利用水对合并的有机层进行清洗后, 以无水硫酸镁加以干燥, 进行减压浓缩。利用硅胶色谱法 (庚烷: 甲苯 = 1:1) 对残渣进行精制, 由此以无色固体的形式获得化合物 (a-11) (0.20g, 0.600mmol)。

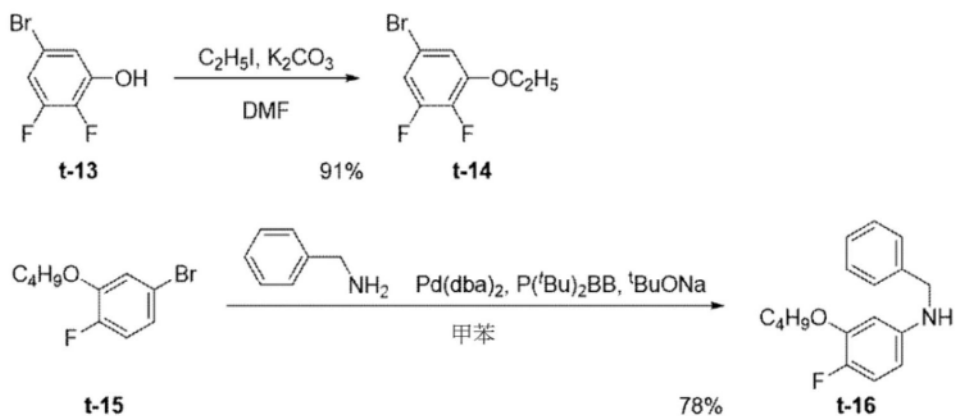
[0490]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$ ppm): 7.58 (dd,  $J=11.0, 2.3\text{Hz}$ , 2H), 6.86 (d,  $J=6.8\text{Hz}$ , 1H), 4.21 (q,  $J=7.0\text{Hz}$ , 2H), 4.13 (t,  $J=6.6\text{Hz}$ , 2H), 3.75 (s, 3H), 1.88 (quin,  $J=6.6\text{Hz}$ , 2H), 1.56 (sext,  $J=7.5\text{Hz}$ , 2H), 1.52 (t,  $J=7.0\text{Hz}$ , 3H), 1.01 (t,  $J=7.4\text{Hz}$ , 3H)。

[0491] 相转变温度: C 142.5 I.; 3% 也未溶解, 因此无法测定物性值。

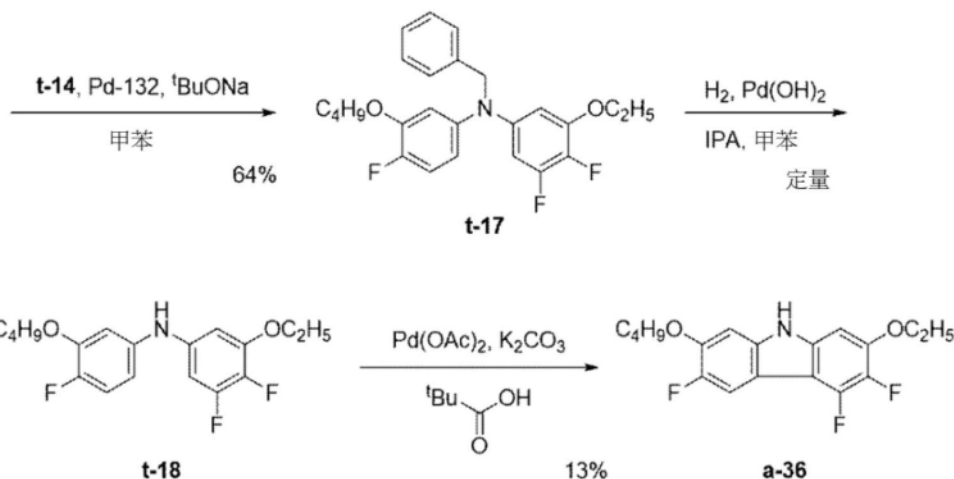
[0492] [合成例 5]

[0493] 化合物 (a-36) 的合成

[0494] [化 58]



[0495]



[0496] 第一步骤: 化合物 (t-14) 的合成

[0497] 使市售的化合物 (t-13) (25.0g, 120mmol)、碘乙烷 (20.5g, 132mmol)、碳酸钾 (21.5g, 156mmol) 溶解于 N,N-二甲基甲酰胺 (250mL) 中, 在 80°C 下搅拌 4 小时。反应结束后, 冷却至室温, 注入至水中, 利用甲苯进行 3 次提取。利用 2N-NaOH 水溶液、水对合并的有机层进行清洗后, 以无水硫酸镁加以干燥, 进行减压浓缩。利用短程硅胶色谱法 (甲苯) 对残渣进行精制, 由此以褐色液体的形式获得化合物 (t-14) (25.8g, 109mmol)。

[0498] 第二步骤:化合物(t-16)的合成

[0499] 将化合物(t-15) (18.0g, 72.8mmol)、苄基胺(9.37g, 87.4mmol)、叔丁氧基钠(10.5g, 109mmol)溶解于甲苯(252mL)中,进行减压脱气,加入钯(0)双(二亚苄基丙酮)(0.838g)、2-(二-叔丁基膦基)联苯(0.870g, 2.91mmol),在60℃下进行加热搅拌。在发热平息时,逐渐升温至回流温度,加热回流3小时。反应结束后,冷却至室温,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:乙酸乙酯=9:1)对残渣进行精制,由此以褐色液体的形式获得化合物(t-16) (15.6g, 57.1mmol)。

[0500] 第三步骤:化合物(t-17)的合成

[0501] 使化合物(t-14) (13.0g, 54.9mmol)、化合物(t-16) (15.0g, 54.9mmol)、叔丁氧基钠(7.91g, 82.3mmol)溶解于甲苯(450mL)中,进行减压脱气,加入Pd(amphos) C12(0.0389g),在60℃下进行加热搅拌。在发热平息时,逐渐升温至回流温度,加热回流3小时。反应结束后,冷却至室温,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用水对合并的有机层进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:甲苯=2:1)对残渣进行精制,由此以褐色液体的形式获得化合物(t-17) (15.0g, 34.9mmol)。

[0502] 第四步骤:化合物(t-18)的合成

[0503] 使化合物(t-17) (15.0g, 34.9mmol)溶解于甲苯(37.5mL)及2-丙醇(75mL)中,添加氢氧化钡(0.75g),进行氢化。对催化剂进行过滤分离后,进行减压浓缩,利用硅胶色谱法(甲苯)对残渣进行精制,由此以淡茶色液体的形式获得化合物(t-18) (13.1g, 38.6mmol)。

[0504] 第五步骤:化合物(a-36)的合成

[0505] 使化合物(t-18) (12.0g, 35.4mmol)、碳酸钾(0.489g, 3.54mmol)溶解于三甲基乙酸(120mL)中,加入乙酸钡(0.794g),在空气下加热回流16小时。反应结束后,冷却至室温,注入至水中,利用甲苯进行3次提取。利用碳酸钠对合并的有机层进行中和,并利用水进行清洗后,以无水硫酸镁加以干燥,进行减压浓缩。利用硅胶色谱法(庚烷:乙酸乙酯=3:1)对残渣进行精制,由此以无色固体的形式获得化合物(a-36) (1.50g, 4.45mmol)。

[0506]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$ ppm): 7.83 (brs, 1H), 7.74 (d,  $J=10.5\text{Hz}$ , 1H), 6.94 (d,  $J=6.5\text{Hz}$ , 1H), 6.72 (d,  $J=5.5\text{Hz}$ , 1H), 4.16 (q,  $J=7.0\text{Hz}$ , 2H), 4.08 (t,  $J=6.5\text{Hz}$ , 2H), 1.86 (quin,  $J=7.1$ , 2H), 1.55 (sext,  $J=7.5\text{Hz}$ , 2H), 1.50 (t,  $J=7.0\text{Hz}$ , 3H), 1.00 (t,  $J=7.5\text{Hz}$ , 3H)。

[0507] 相转变温度: C 187.5 I. 上限温度(NI) = 84.3℃; 介电各向异性( $\Delta\epsilon$ ) = -21.5; 光学各向异性( $\Delta n$ ) = 0.187; 粘度( $\eta$ ) = 149.4mPa·s。

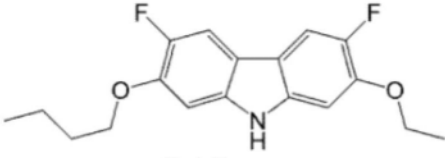
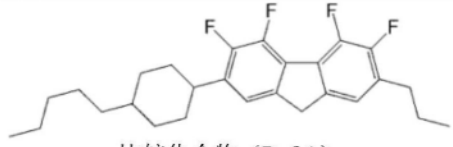
[0508] [比较实验]

[0509] 如以下那样对化合物(a-5)与比较化合物(Ref-1)的介电各向异性进行比较。比较化合物(Ref-1)是国际公开第2015/129412号的段落[0143]中所记载的化合物(1-2-5)。合成是依照国际公开第2015/129412号的段落[0143]~段落[0154]的方法来进行。

[0510] 对化合物(3)的合成中所获得的化合物(a-5)与比较化合物(Ref-1)的介电各向异性( $\Delta\epsilon$ )进行比较。得知化合物(a-5)的介电各向异性为负且非常大。因此,可获得化合物(1)比类似的化合物优异的结论。

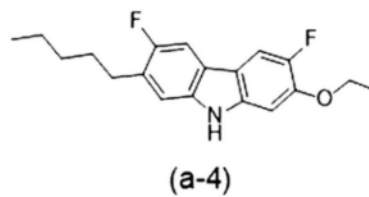
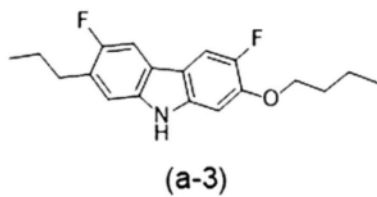
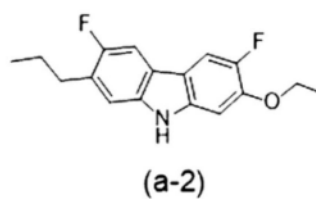
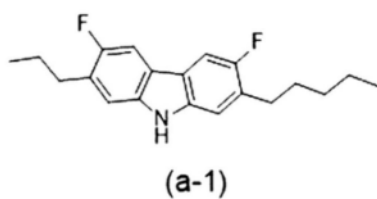
[0511] [表2]

[0512] 表2. 介电各向异性的比较

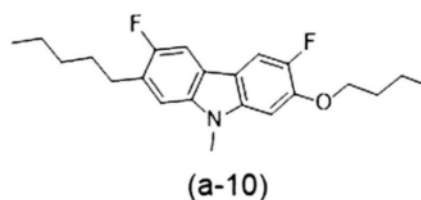
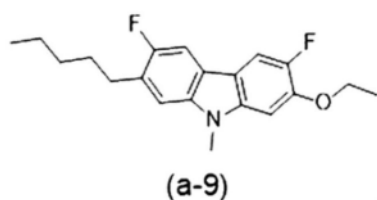
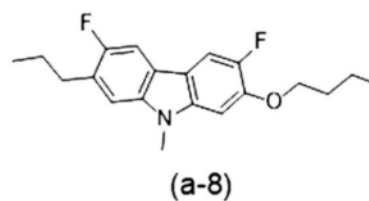
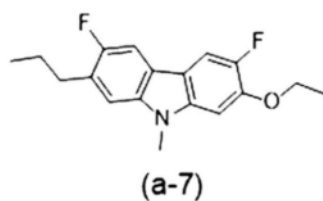
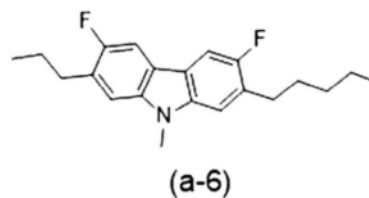
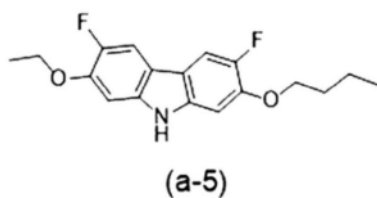
	化合物	介电各向异性 ( $\Delta\epsilon$ )
[0513] 合成例 3	 化合物 (a-5)	-22.5
比较化合物 1	 比较化合物 (Ref-1)	-10.4

[0514] 可一边参考合成例中所记载的方法、或“2. 化合物 (1) 的合成”一项, 一边合成以下所示的化合物。

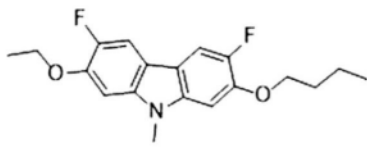
[0515] [化59]



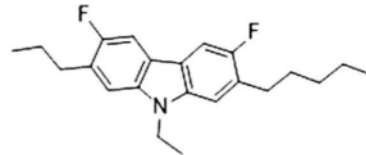
[0516]



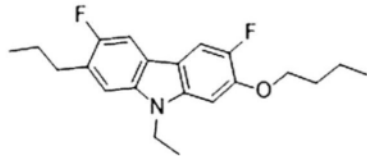
[0517] [化60]



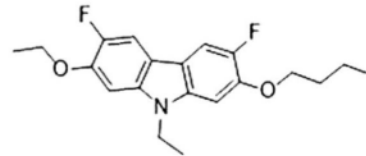
(a-11)



(a-12)

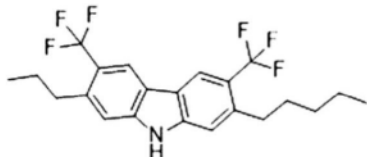


(a-13)

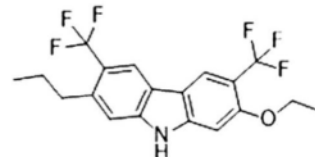


(a-14)

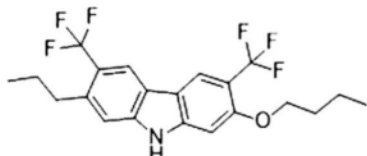
[0518]



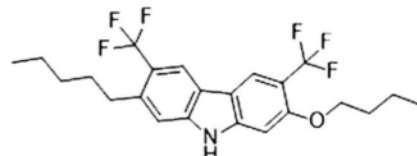
(a-15)



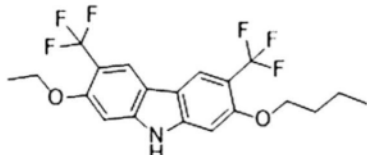
(a-16)



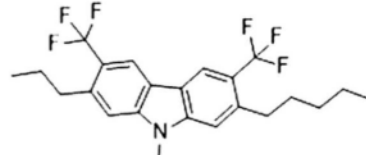
(a-17)



(a-18)

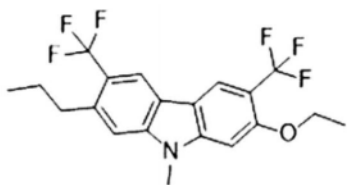


(a-19)

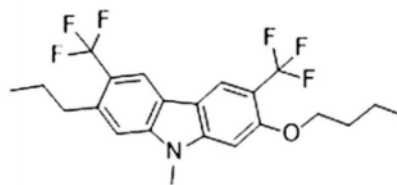


(a-20)

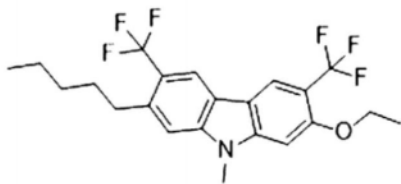
[0519] [化61]



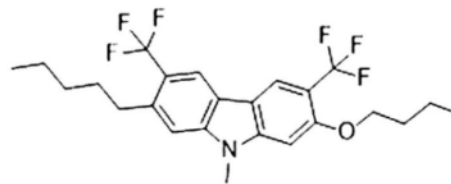
(a-21)



(a-22)

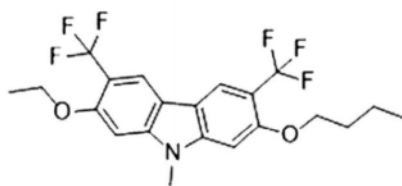


(a-23)

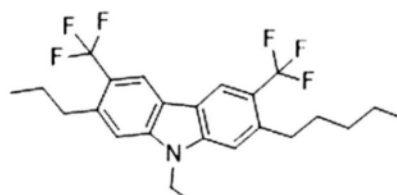


(a-24)

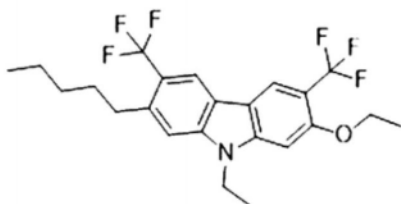
[0520]



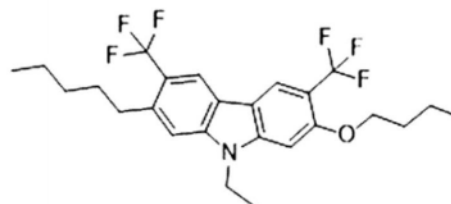
(a-25)



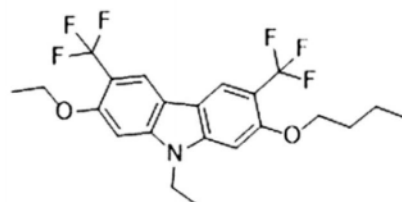
(a-26)



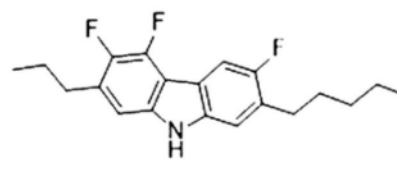
(a-27)



(a-28)

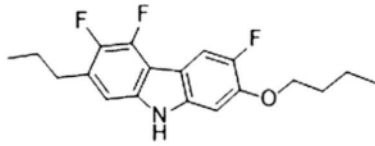


(a-29)

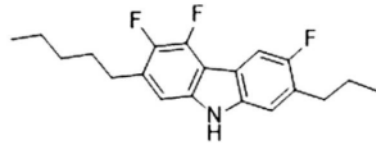


(a-30)

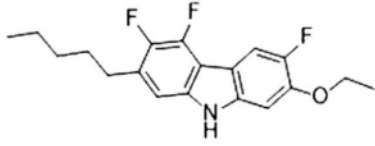
[0521] [化62]



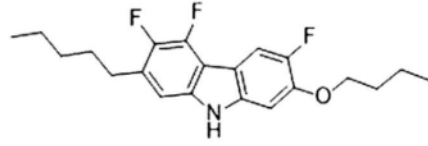
(a-31)



(a-32)

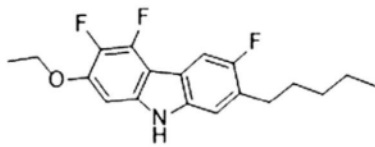


(a-33)

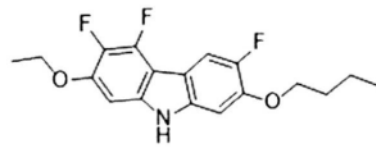


(a-34)

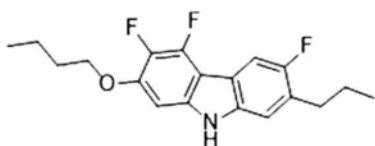
[0522]



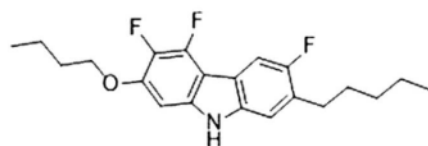
(a-35)



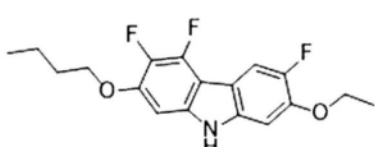
(a-36)



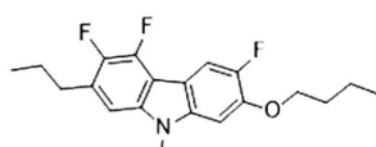
(a-37)



(a-38)



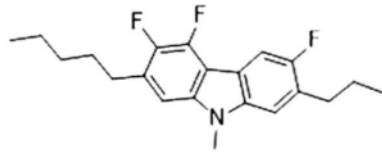
(a-39)



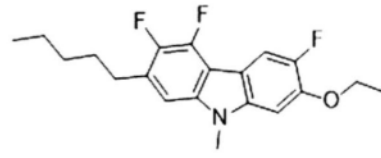
(a-40)

[0523]

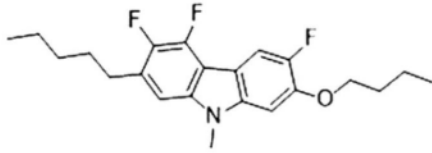
[化63]



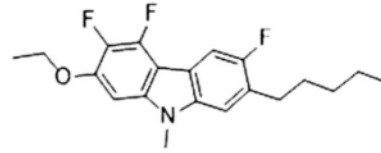
(a-41)



(a-42)

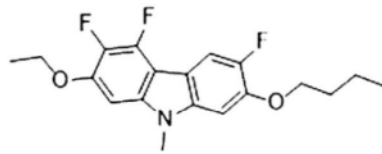


(a-43)

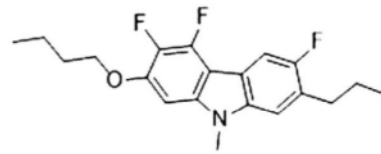


(a-44)

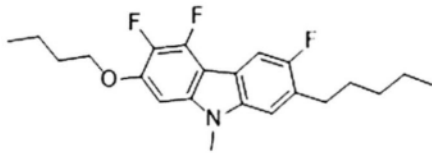
[0524]



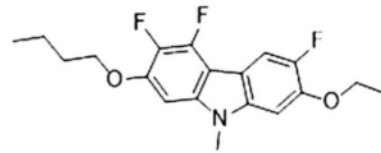
(a-45)



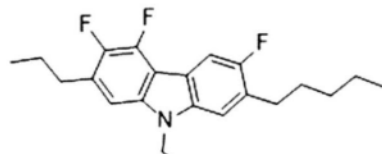
(a-46)



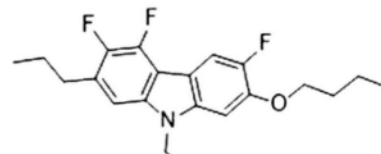
(a-47)



(a-48)

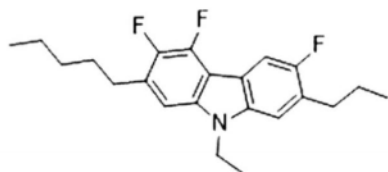


(a-49)

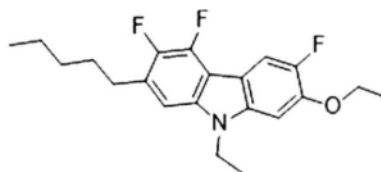


(a-50)

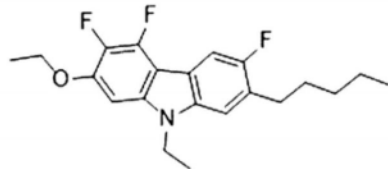
[0525] [化64]



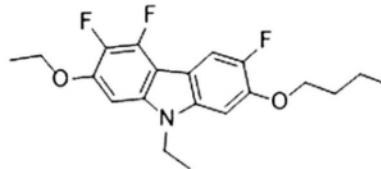
(a-51)



(a-52)

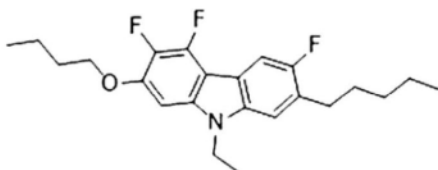


(a-53)

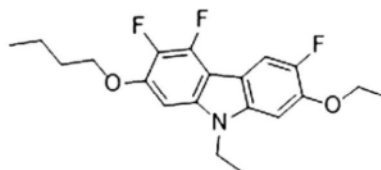


(a-54)

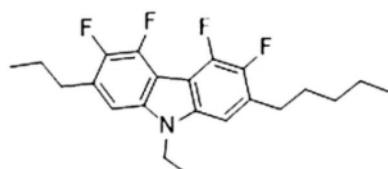
[0526]



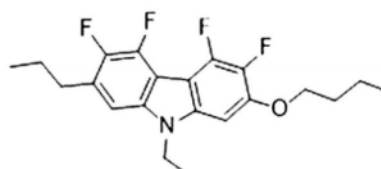
(a-55)



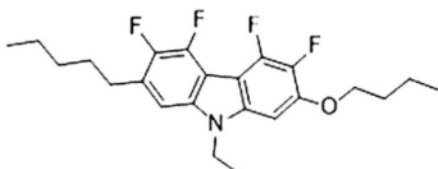
(a-56)



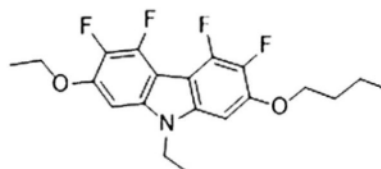
(a-57)



(a-58)

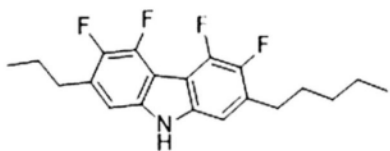


(a-59)

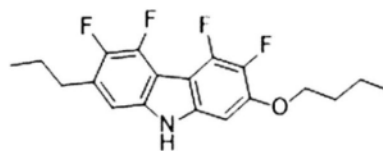


(a-60)

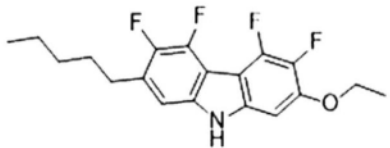
[0527] [化65]



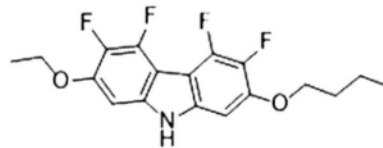
(a-61)



(a-62)

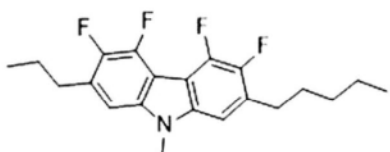


(a-63)

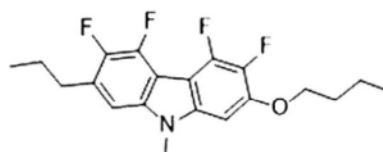


(a-64)

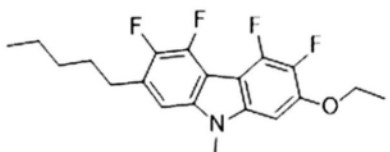
[0528]



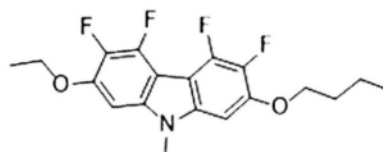
(a-65)



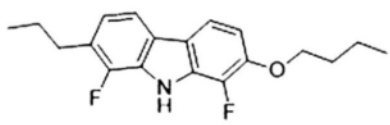
(a-66)



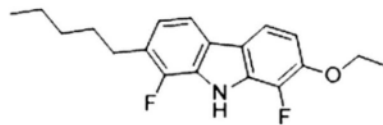
(a-67)



(a-68)

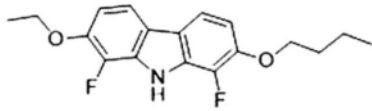


(a-69)

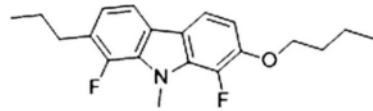


(a-70)

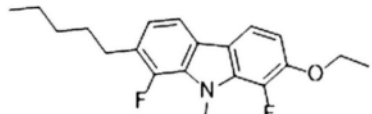
[0529] [化66]



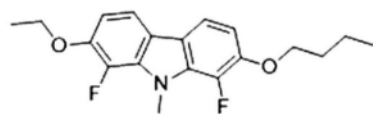
(a-71)



(a-72)

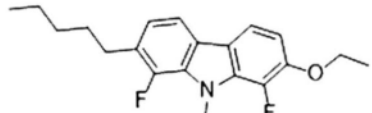


(a-73)

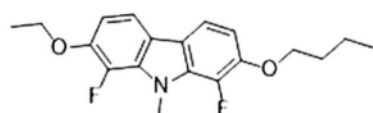


(a-74)

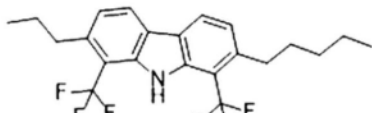
[0530]



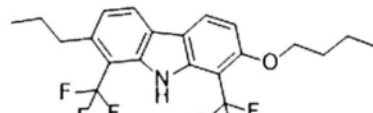
(a-75)



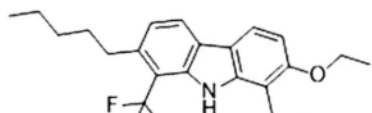
(a-76)



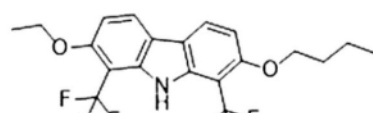
(a-77)



(a-78)



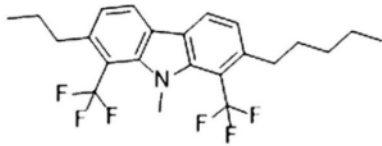
(a-79)



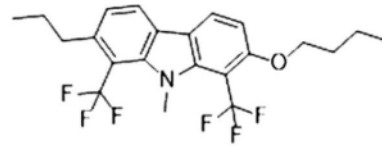
(a-80)

[0531]

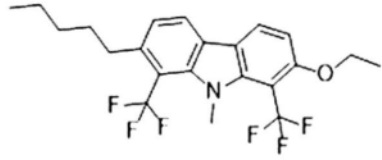
[化67]



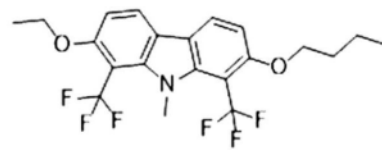
(a-81)



(a-82)

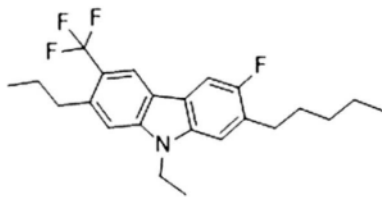


(a-83)

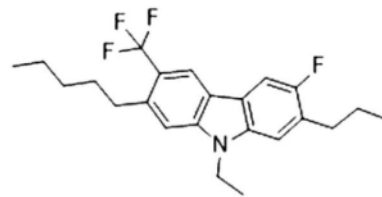


(a-84)

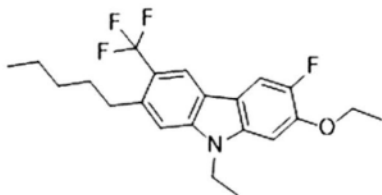
[0532]



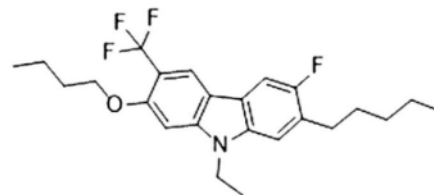
(a-85)



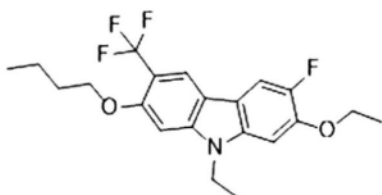
(a-86)



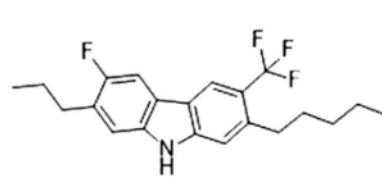
(a-87)



(a-88)

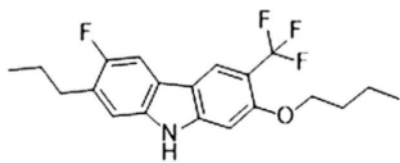


(a-89)

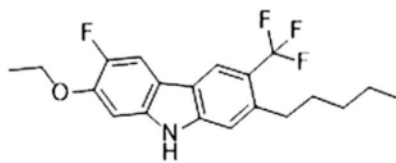


(a-90)

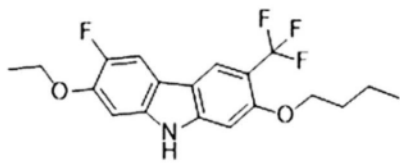
[0533] [化68]



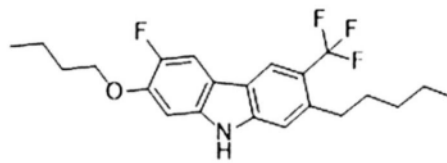
(a-91)



(a-92)

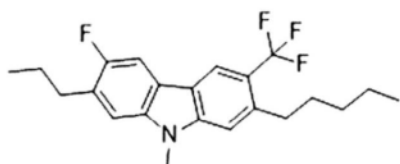


(a-93)

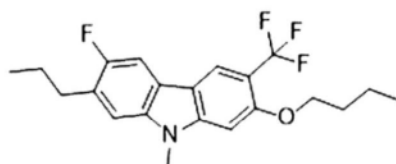


(a-94)

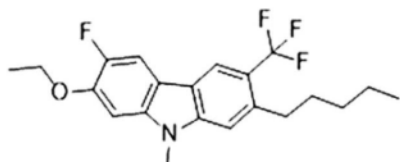
[0534]



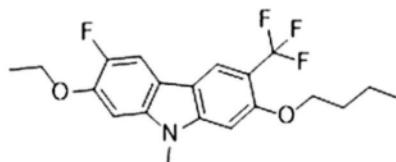
(a-95)



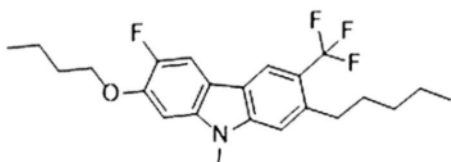
(a-96)



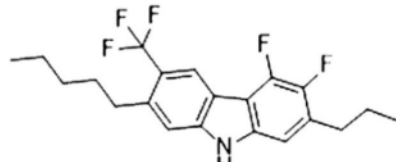
(a-97)



(a-98)

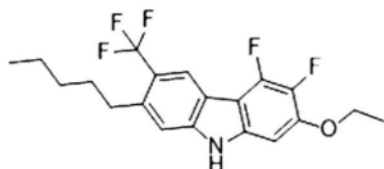


(a-99)

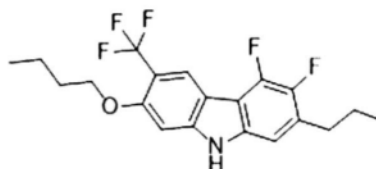


(a-100)

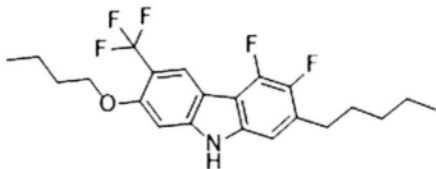
[0535] [化69]



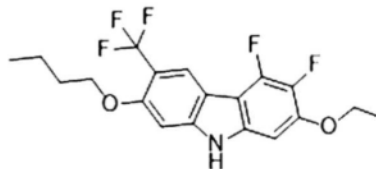
(a-101)



(a-102)

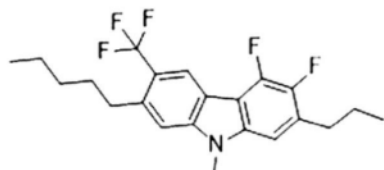


(a-103)

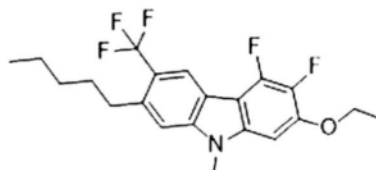


(a-104)

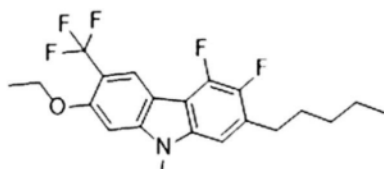
[0536]



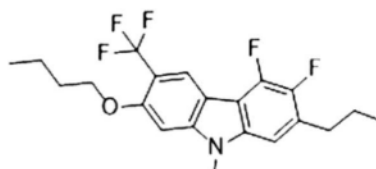
(a-105)



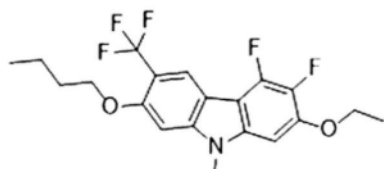
(a-106)



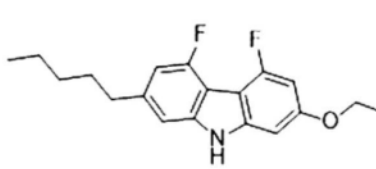
(a-107)



(a-108)

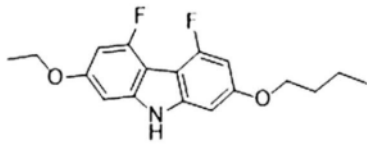


(a-109)

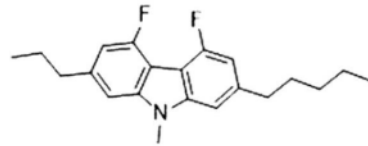


(a-110)

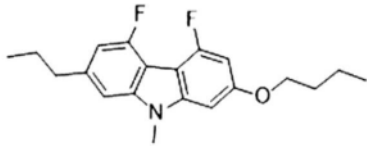
[0537] [化70]



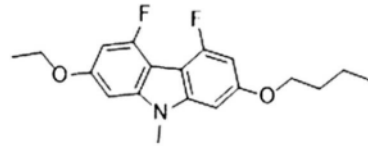
(a-111)



(a-112)

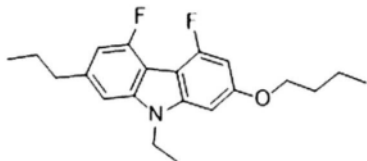


(a-113)

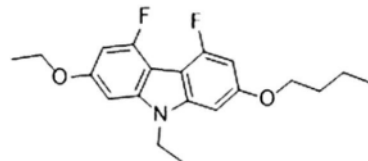


(a-114)

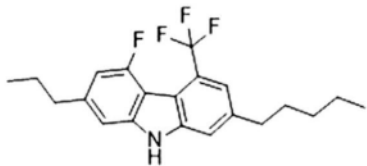
[0538]



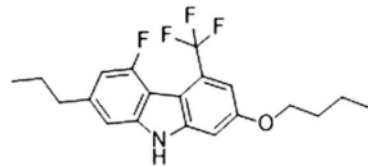
(a-115)



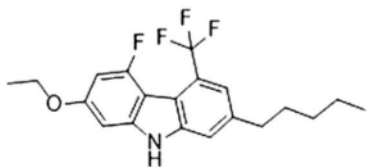
(a-116)



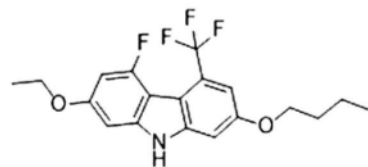
(a-117)



(a-118)

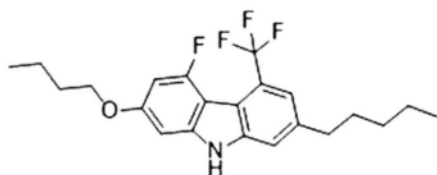


(a-119)

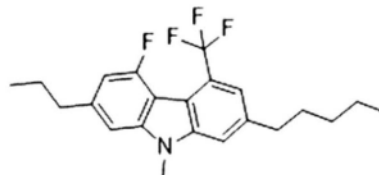


(a-120)

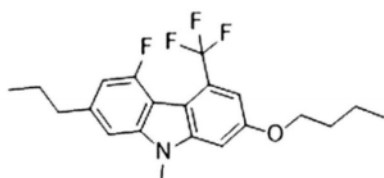
[0539] [化71]



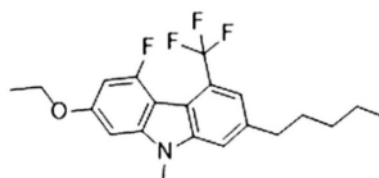
(a-121)



(a-122)

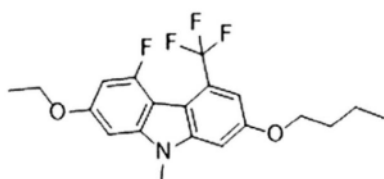


(a-123)

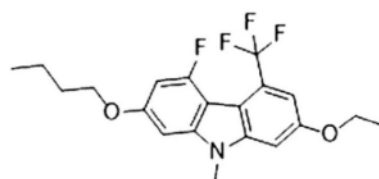


(a-124)

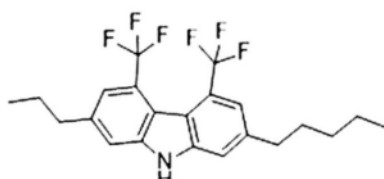
[0540]



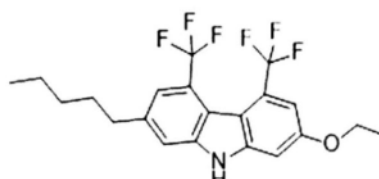
(a-125)



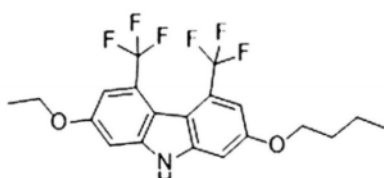
(a-126)



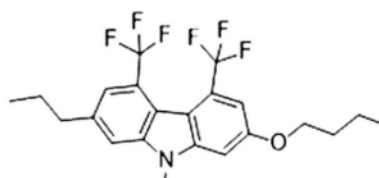
(a-127)



(a-128)

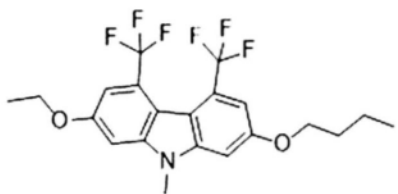


(a-129)

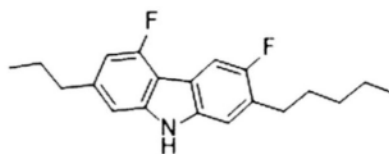


(a-130)

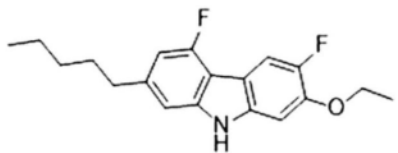
[0541] [化72]



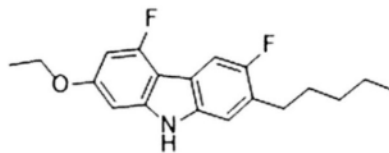
(a-131)



(a-132)

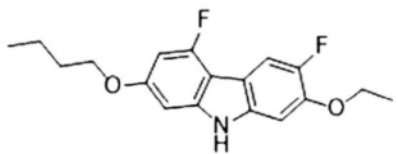


(a-133)

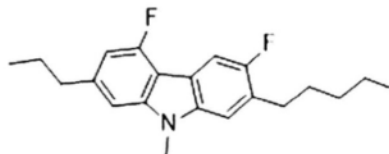


(a-134)

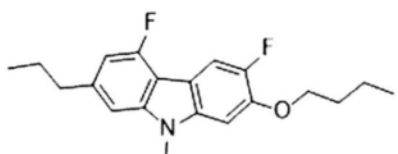
[0542]



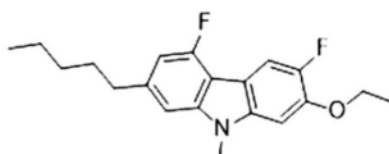
(a-135)



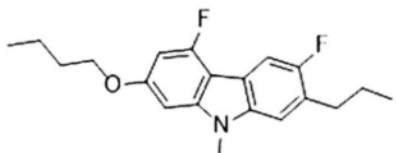
(a-136)



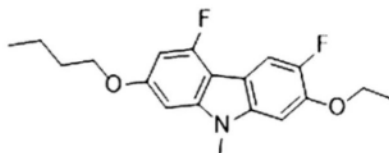
(a-137)



(a-138)

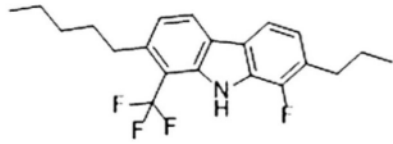


(a-139)

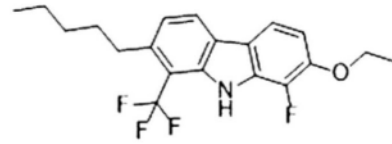


(a-140)

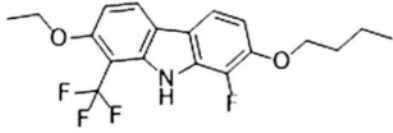
[0543] [化73]



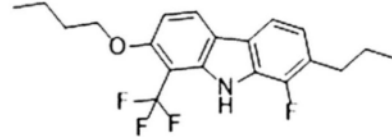
(a-141)



(a-142)

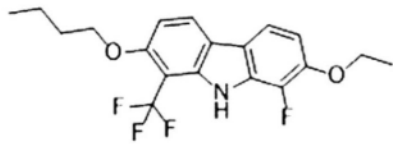


(a-143)

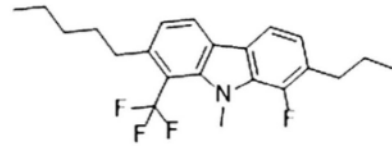


(a-144)

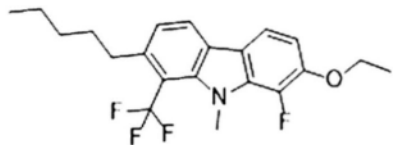
[0544]



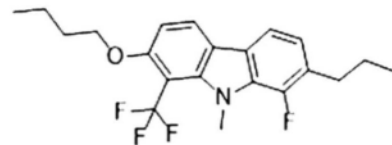
(a-145)



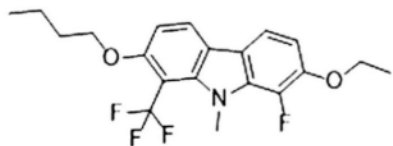
(a-146)



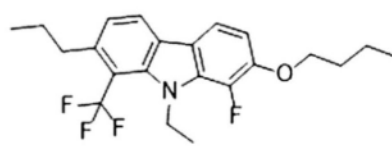
(a-147)



(a-148)



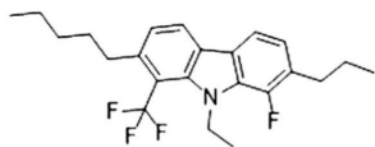
(a-149)



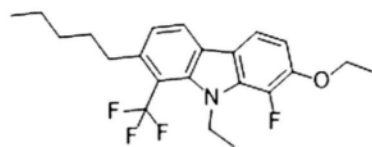
(a-150)

[0545]

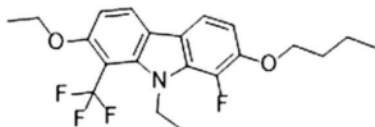
[化74]



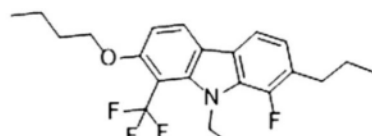
(a-151)



(a-152)

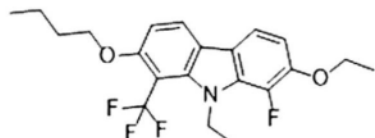


(a-153)

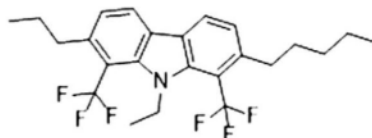


(a-154)

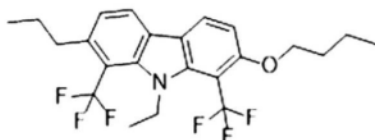
[0546]



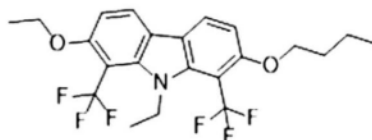
(a-155)



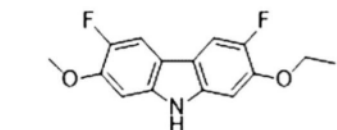
(a-156)



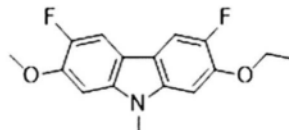
(a-157)



(a-158)

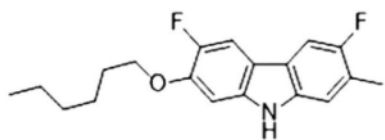


(a-159)

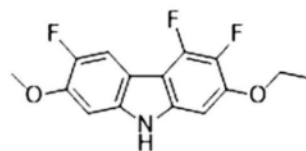


(a-160)

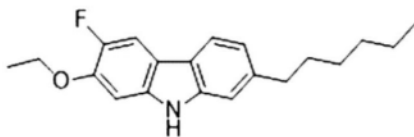
[0547] [化75]



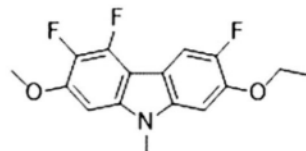
(a-161)



(a-162)

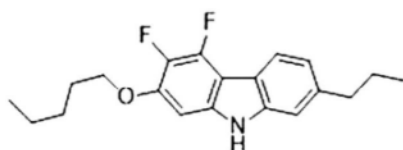


(a-163)

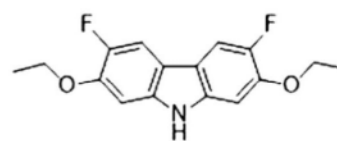


(a-164)

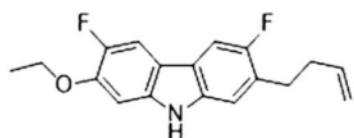
[0548]



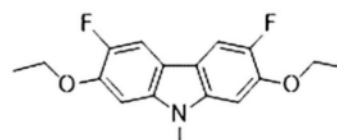
(a-165)



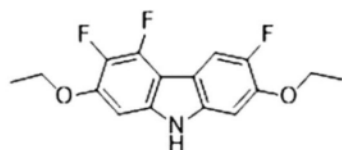
(a-166)



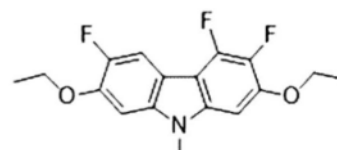
(a-167)



(a-168)

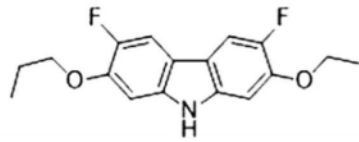


(a-169)

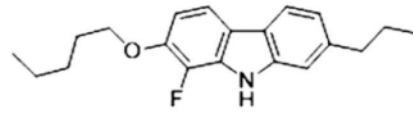


(a-170)

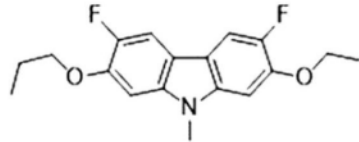
[0549] [化76]



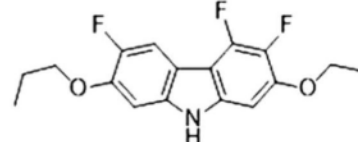
(a-171)



(a-172)

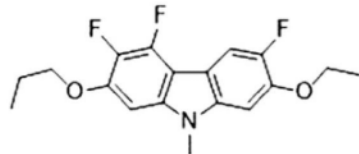


(a-173)

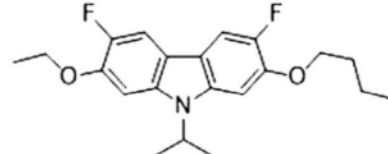


(a-174)

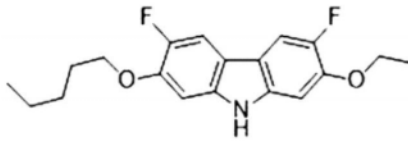
[0550]



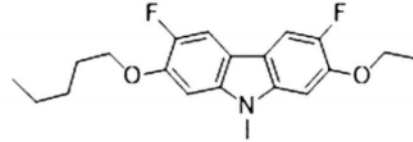
(a-175)



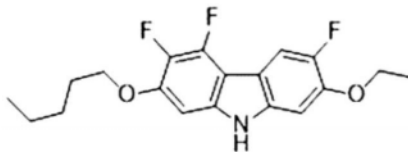
(a-176)



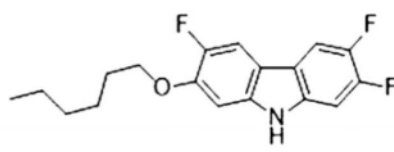
(a-177)



(a-178)

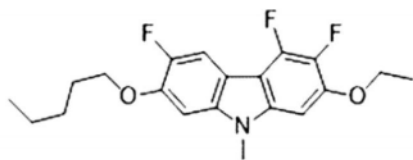


(a-179)

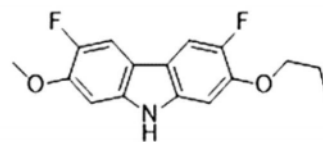


(a-180)

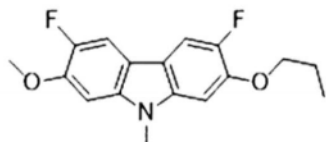
[0551] [化77]



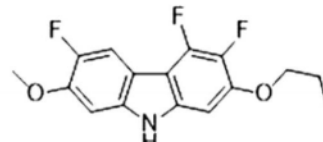
(a-181)



(a-182)

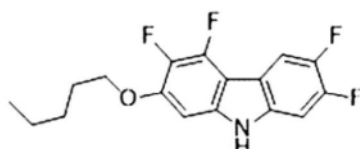


(a-183)

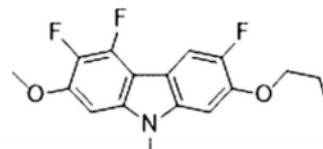


(a-184)

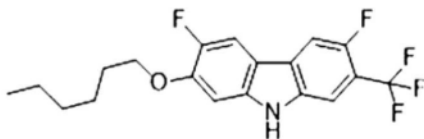
[0552]



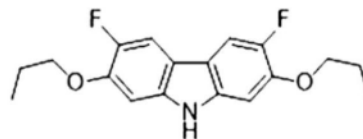
(a-185)



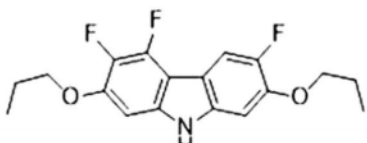
(a-186)



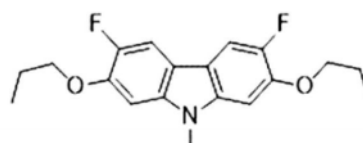
(a-187)



(a-188)

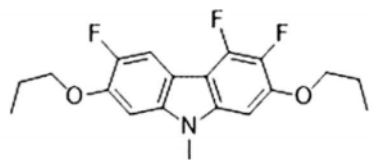


(a-189)

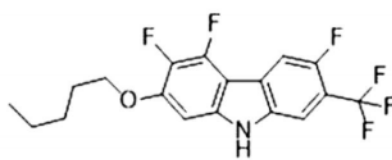


(a-190)

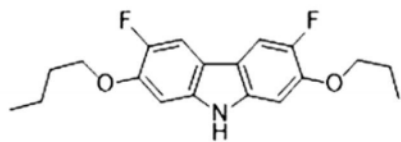
[0553] [化78]



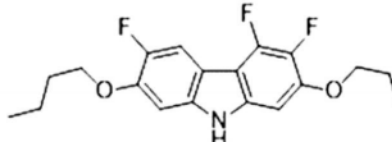
(a-191)



(a-192)

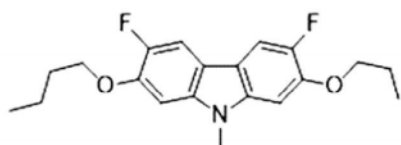


(a-193)

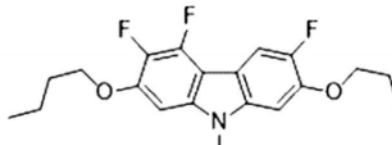


(a-194)

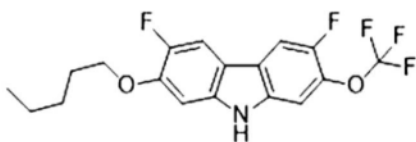
[0554]



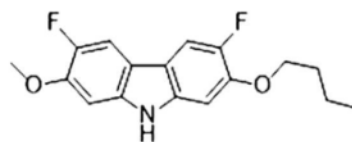
(a-195)



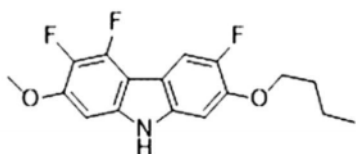
(a-196)



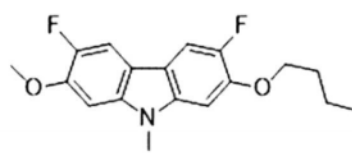
(a-197)



(a-198)

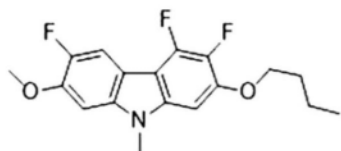


(a-199)

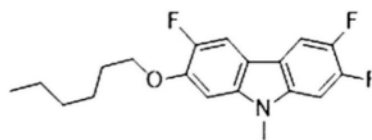


(a-200)

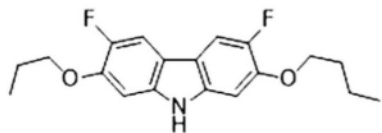
[0555] [化79]



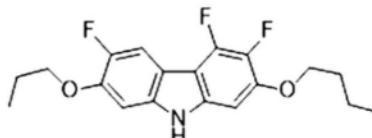
(a-201)



(a-202)

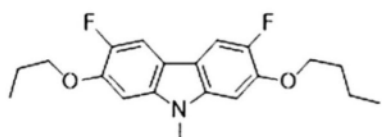


(a-203)

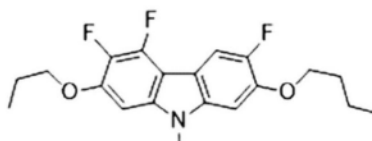


(a-204)

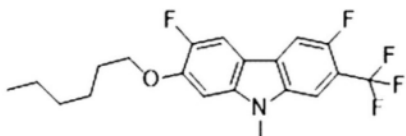
[0556]



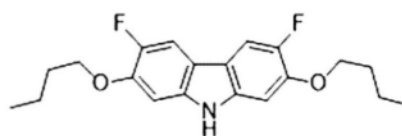
(a-205)



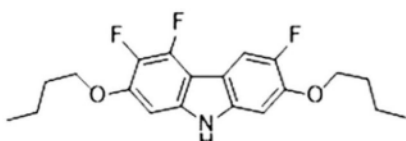
(a-206)



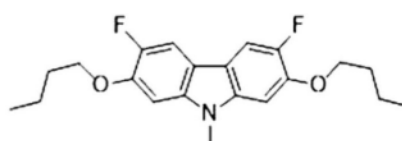
(a-207)



(a-208)

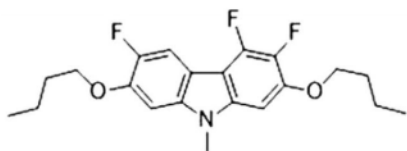


(a-209)

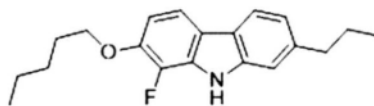


(a-210)

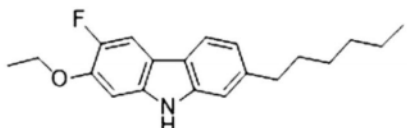
[0557] [化80]



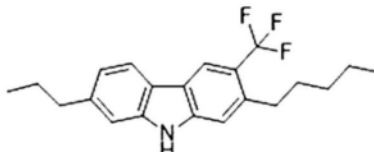
(a-211)



(a-212)

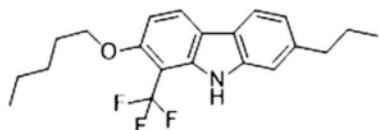


(a-213)

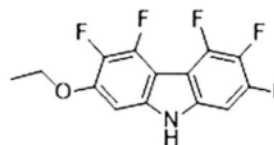


(a-214)

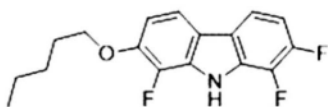
[0558]



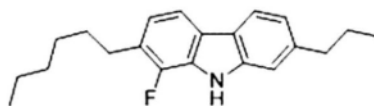
(a-215)



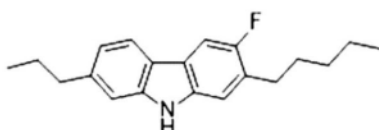
(a-216)



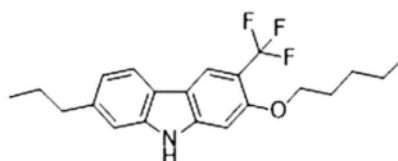
(a-217)



(a-218)

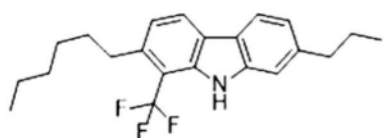


(a-219)

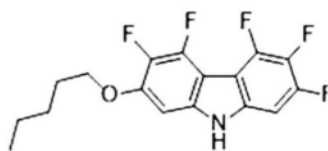


(a-220)

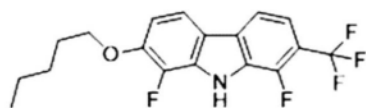
[0559] [化81]



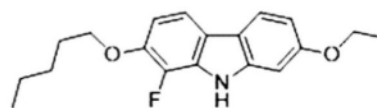
(a-221)



(a-222)

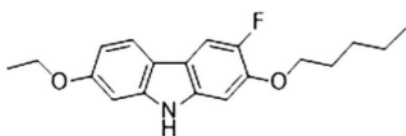


(a-223)

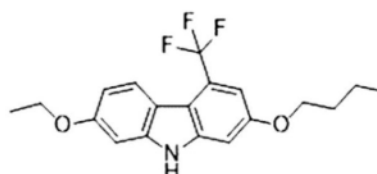


(a-224)

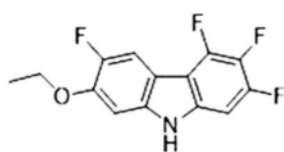
[0560]



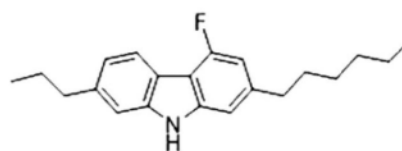
(a-225)



(a-226)

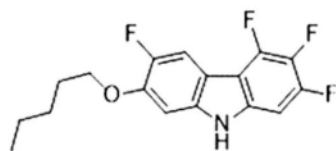


(a-227)

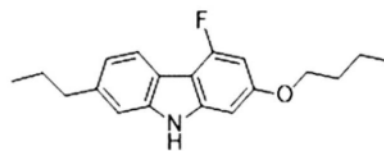


(a-228)

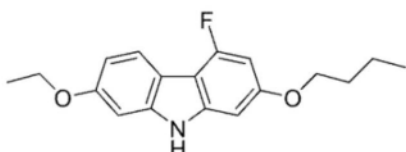
[0561] [化82]



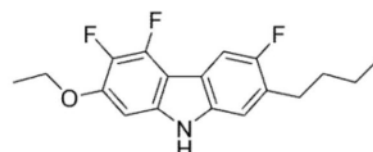
(a-229)



(a-230)

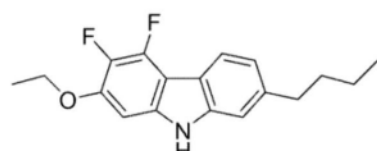


(a-231)

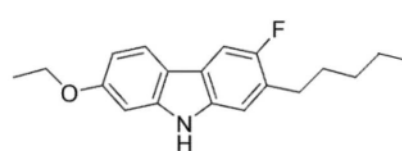


(a-232)

[0562]

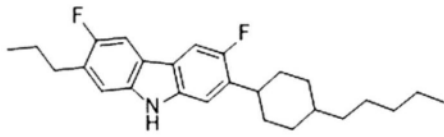


(a-233)

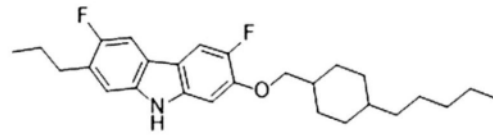


(a-234)

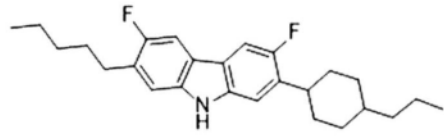
[0563] [化83]



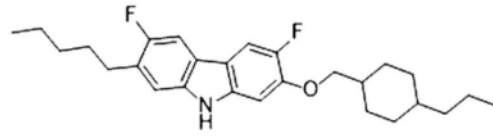
(b-1)



(b-2)

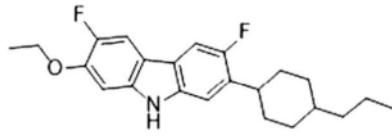


(b-3)

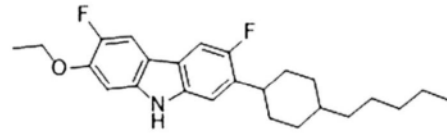


(b-4)

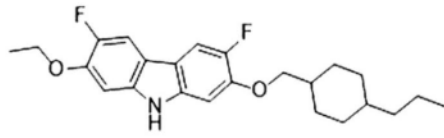
[0564]



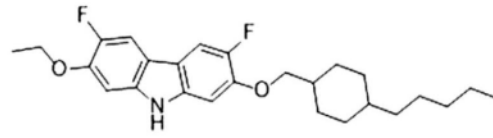
(b-5)



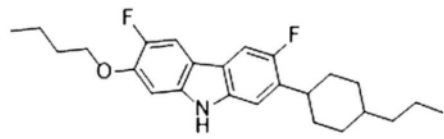
(b-6)



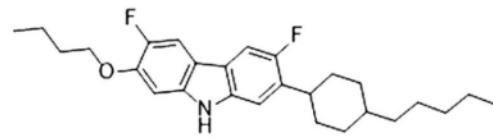
(b-7)



(b-8)

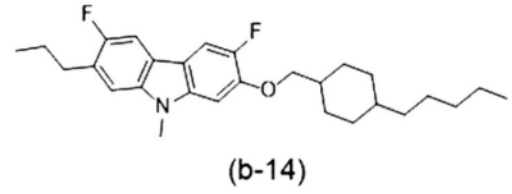
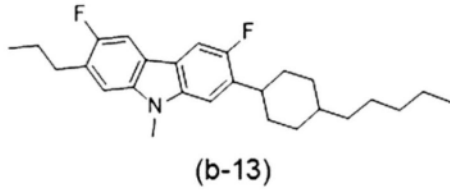
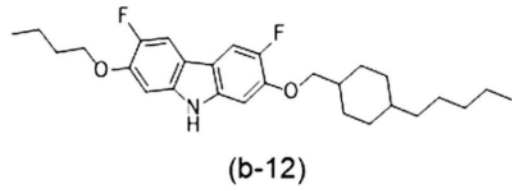
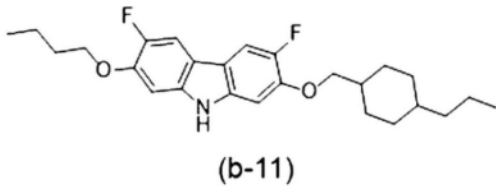


(b-9)

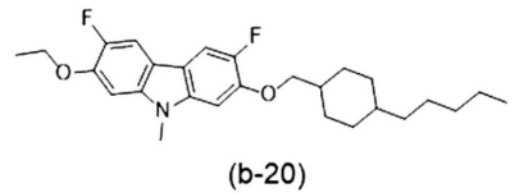
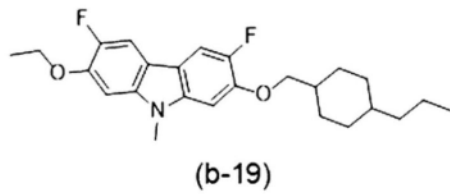
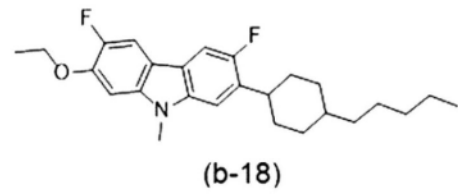
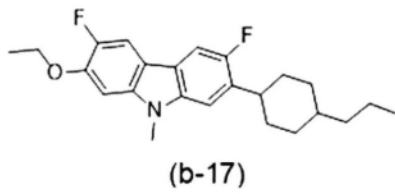
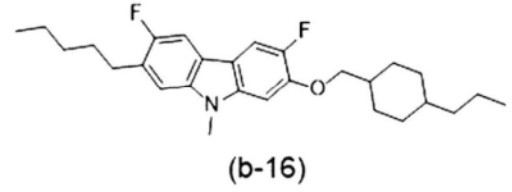
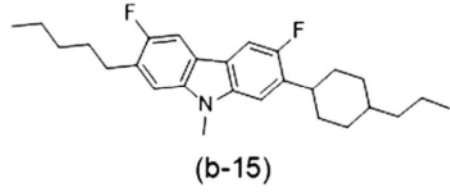


(b-10)

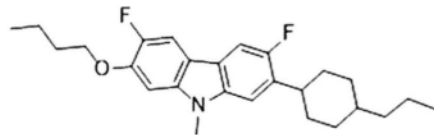
[0565] [化84]



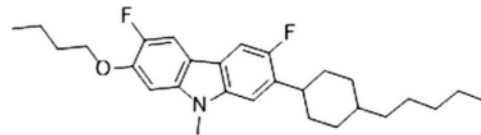
[0566]



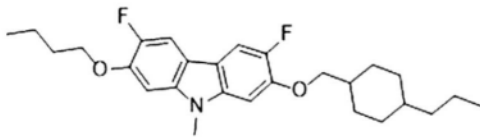
[0567] [化85]



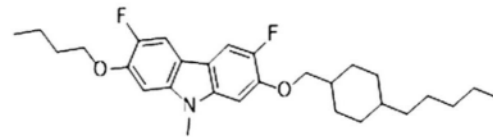
(b-21)



(b-22)

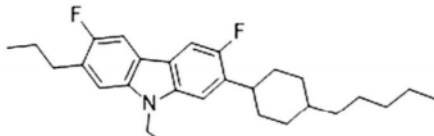


(b-23)

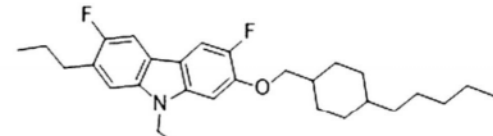


(b-24)

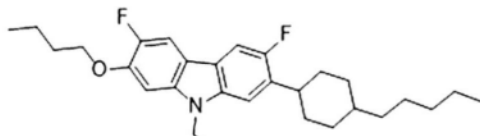
[0568]



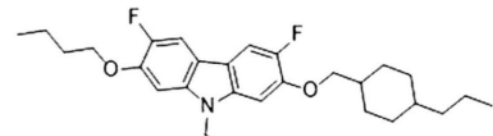
(b-25)



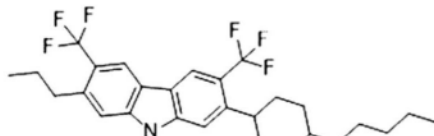
(b-26)



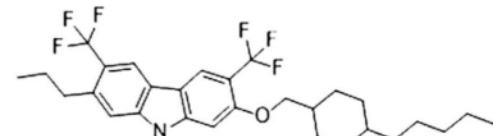
(b-27)



(b-28)

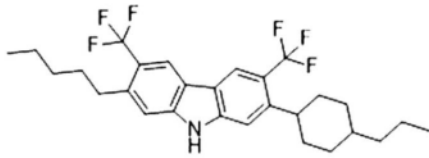


(b-29)

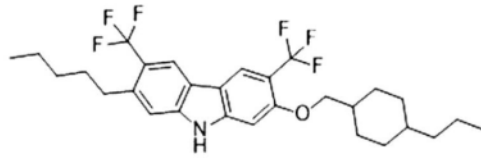


(b-30)

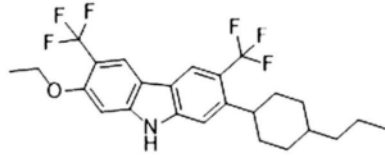
[0569] [化86]



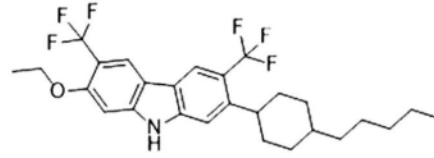
(b-31)



(b-32)

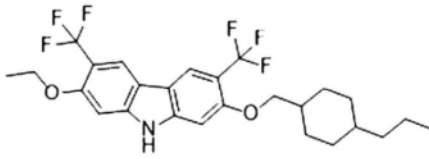


(b-33)

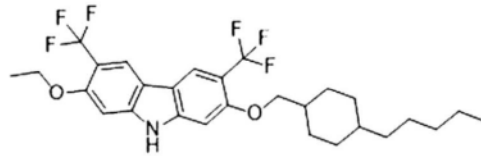


(b-34)

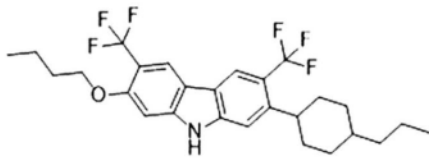
[0570]



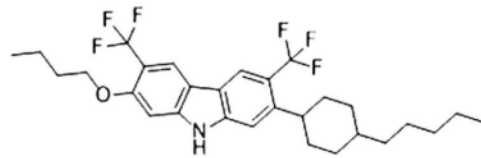
(b-35)



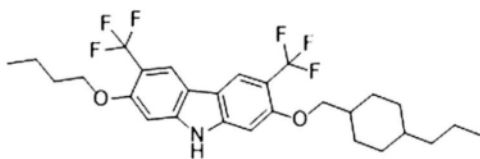
(b-36)



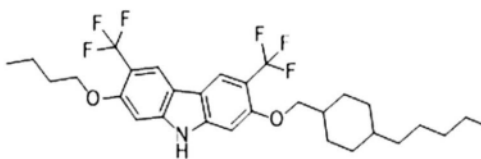
(b-37)



(b-38)

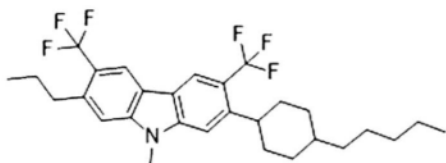


(b-39)

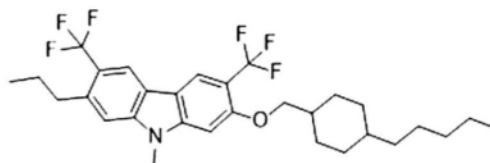


(b-40)

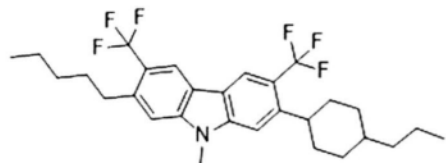
[0571] [化87]



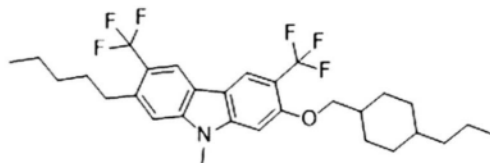
(b-41)



(b-42)

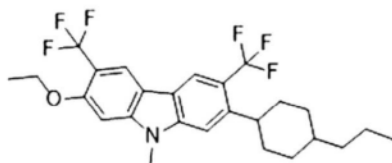


(b-43)

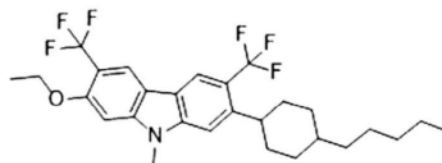


(b-44)

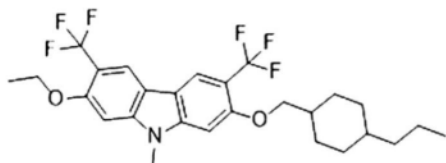
[0572]



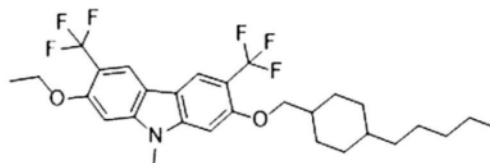
(b-45)



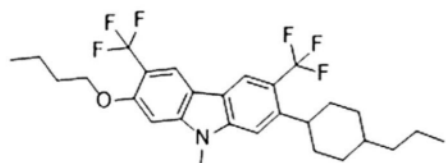
(b-46)



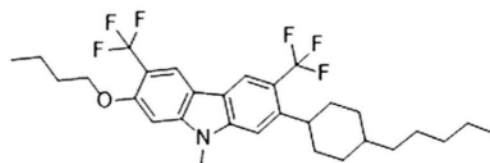
(b-47)



(b-48)

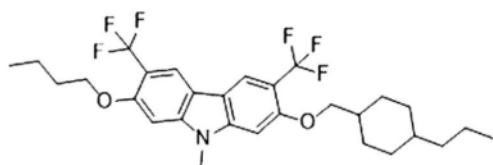


(b-49)

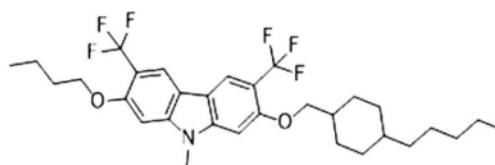


(b-50)

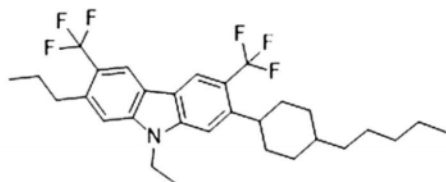
[0573] [化88]



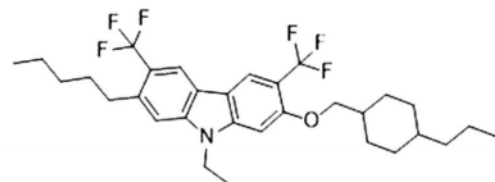
(b-51)



(b-52)

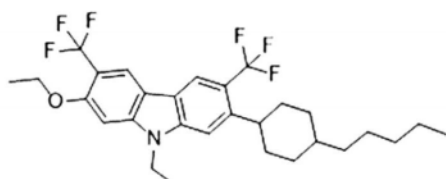


(b-53)

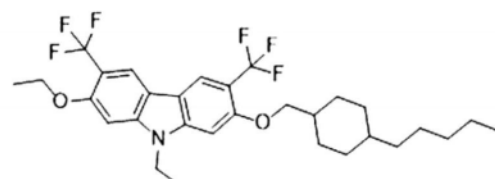


(b-54)

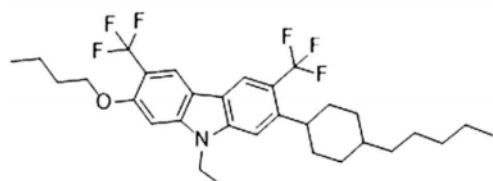
[0574]



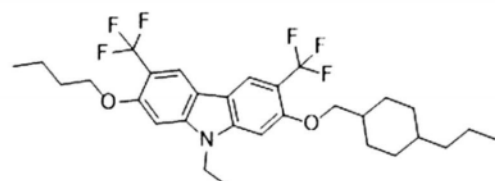
(b-55)



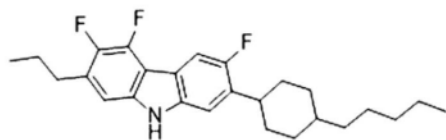
(b-56)



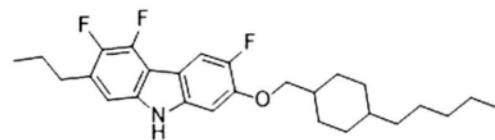
(b-57)



(b-58)

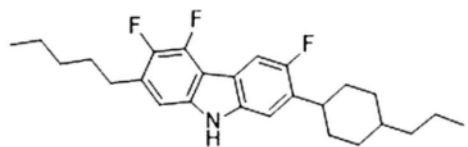


(b-59)

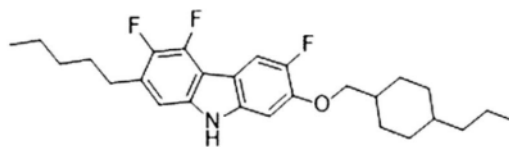


(b-60)

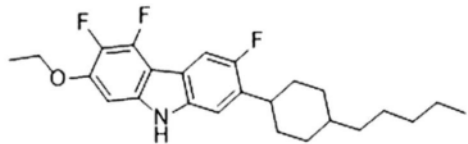
[0575] [化89]



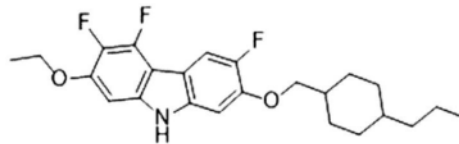
(b-61)



(b-62)

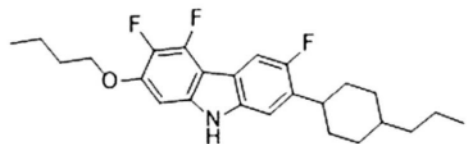


(b-63)

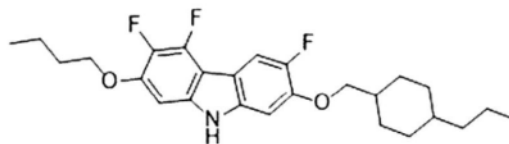


(b-64)

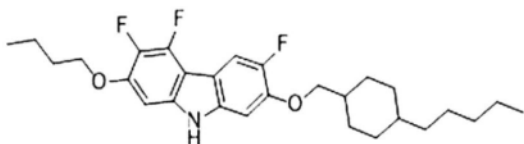
[0576]



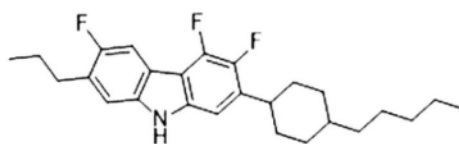
(b-65)



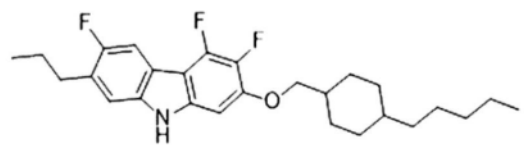
(b-66)



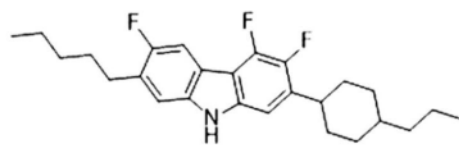
(b-67)



(b-68)

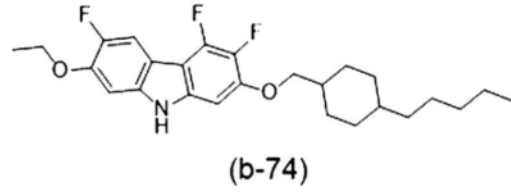
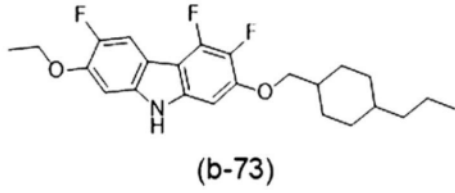
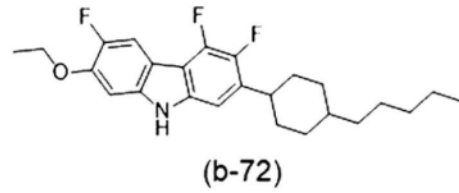
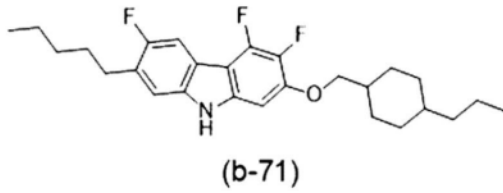


(b-69)

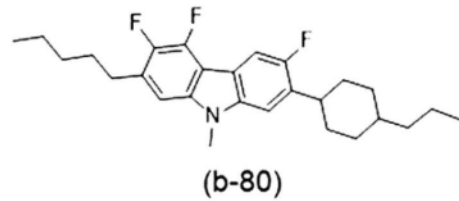
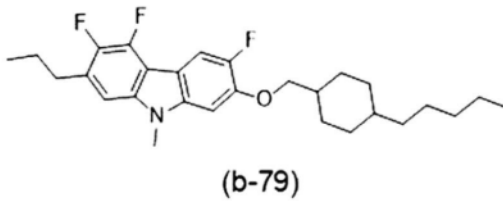
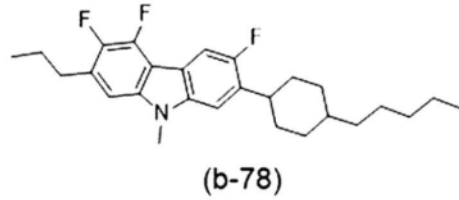
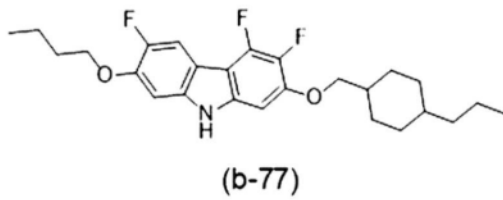
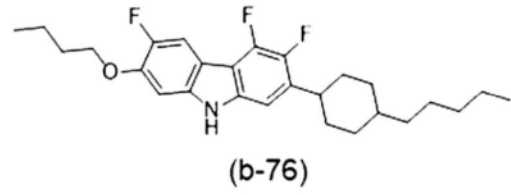
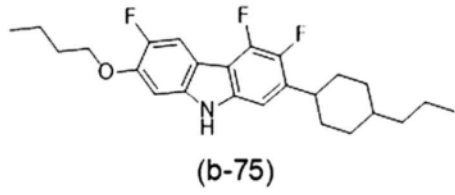


(b-70)

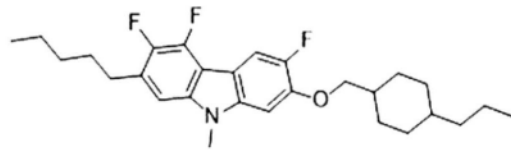
[0577] [化90]



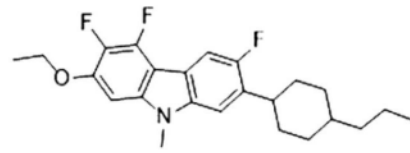
[0578]



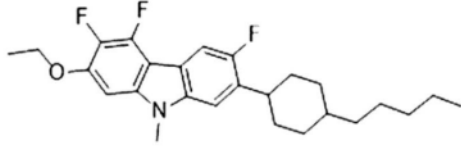
[0579] [化91]



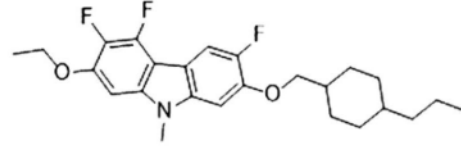
(b-81)



(b-82)

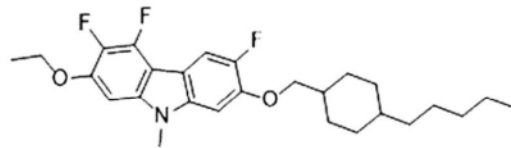


(b-83)

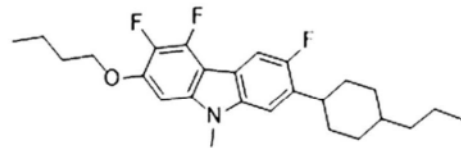


(b-84)

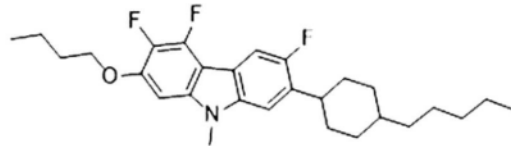
[0580]



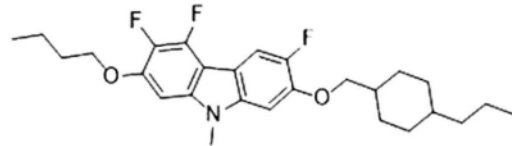
(b-85)



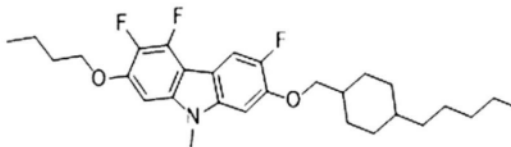
(b-86)



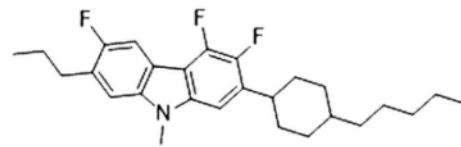
(b-87)



(b-88)

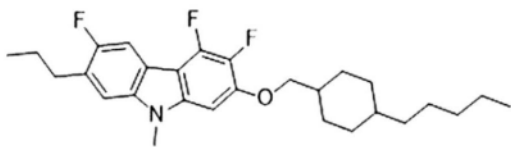


(b-89)

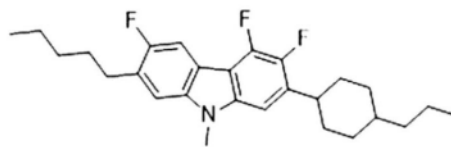


(b-90)

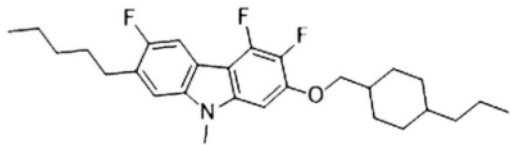
[0581] [化92]



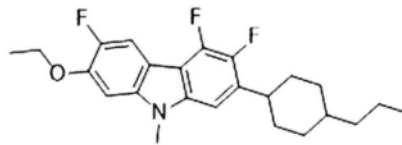
(b-91)



(b-92)

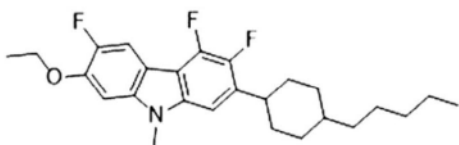


(b-93)

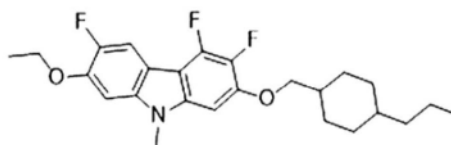


(b-94)

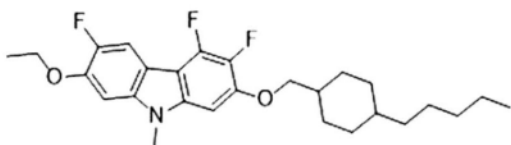
[0582]



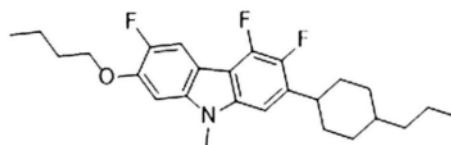
(b-95)



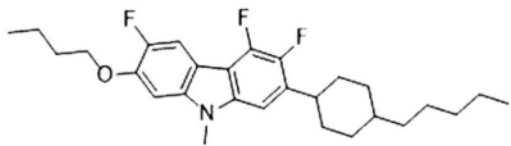
(b-96)



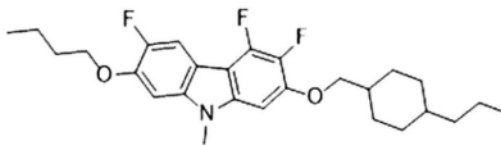
(b-97)



(b-98)



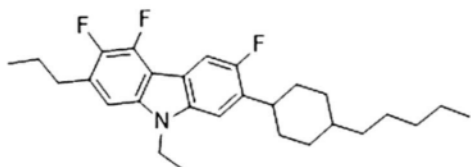
(b-99)



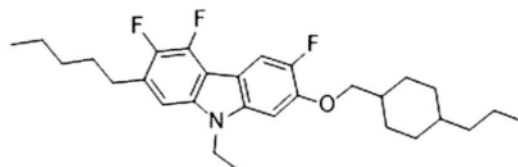
(b-100)

[0583]

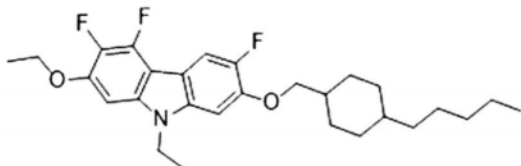
[化93]



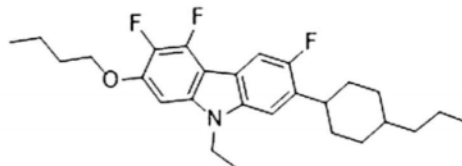
(b-101)



(b-102)

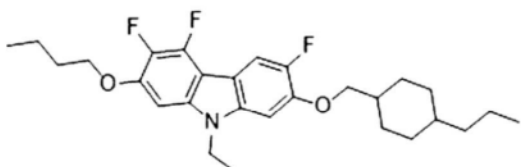


(b-103)

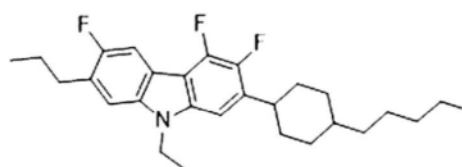


(b-104)

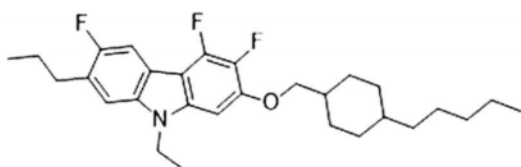
[0584]



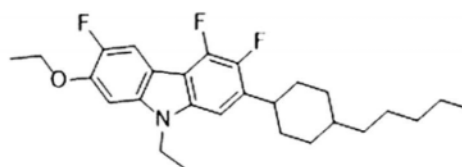
(b-105)



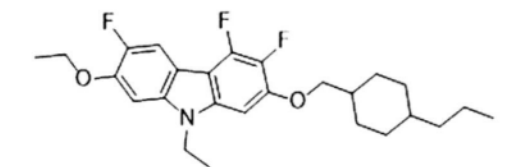
(b-106)



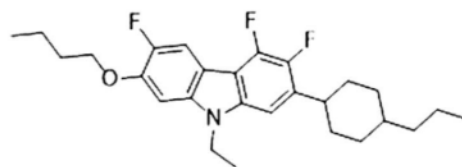
(b-107)



(b-108)

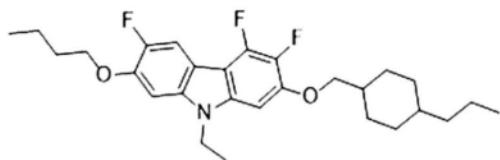


(b-109)

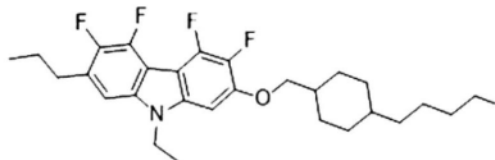


(b-110)

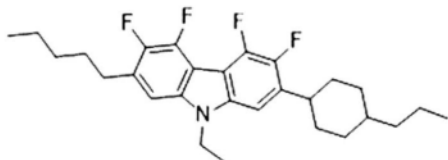
[0585] [化94]



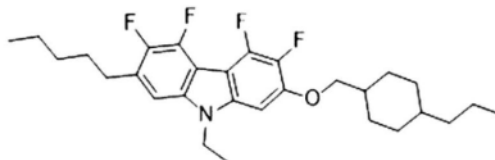
(b-111)



(b-112)

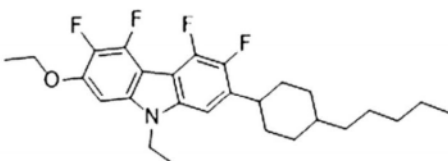


(b-113)

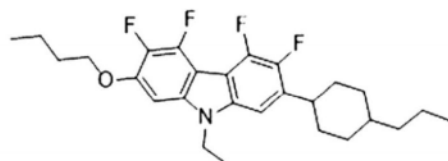


(b-114)

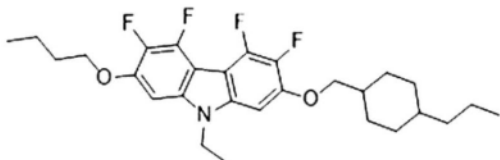
[0586]



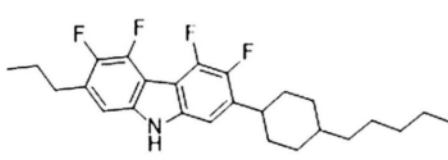
(b-115)



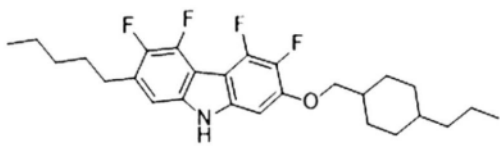
(b-116)



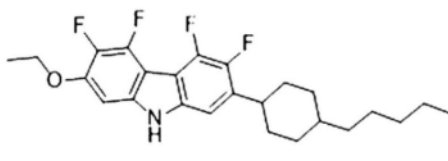
(b-117)



(b-118)

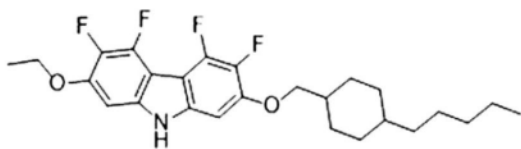


(b-119)

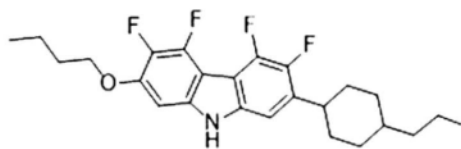


(b-120)

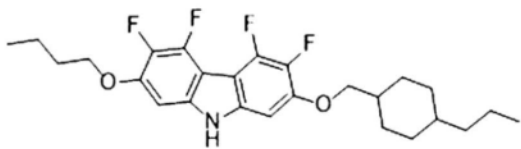
[0587] [化95]



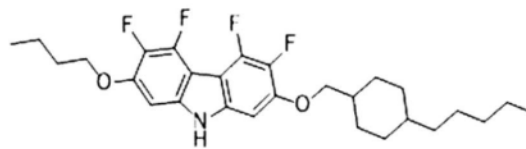
(b-121)



(b-122)

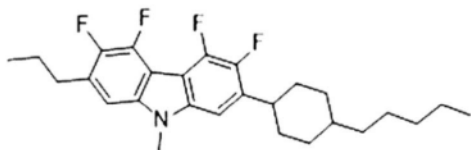


(b-123)

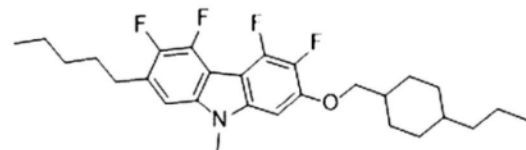


(b-124)

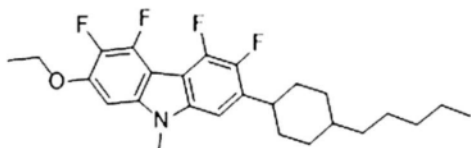
[0588]



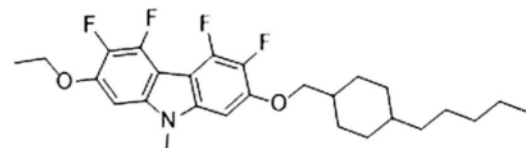
(b-125)



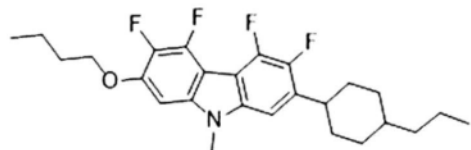
(b-126)



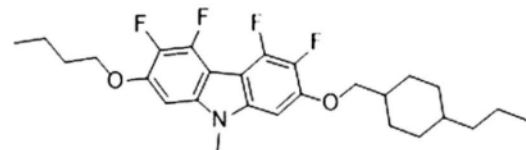
(b-127)



(b-128)

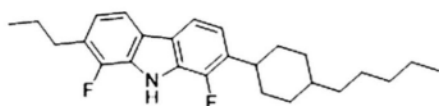


(b-129)

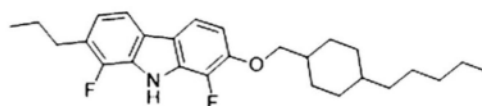


(b-130)

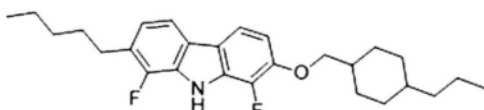
[0589] [化96]



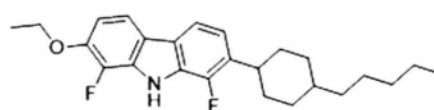
(b-131)



(b-132)

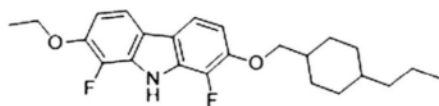


(b-133)

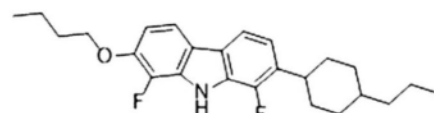


(b-134)

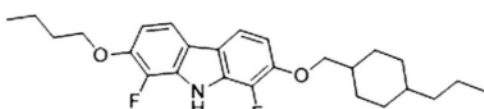
[0590]



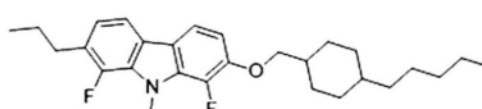
(b-135)



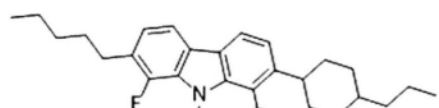
(b-136)



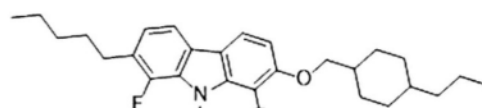
(b-137)



(b-138)

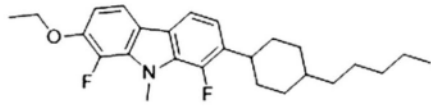


(b-139)

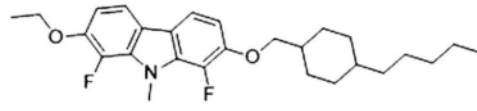


(b-140)

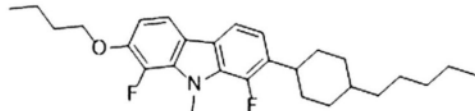
[0591] [化97]



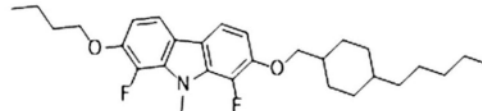
(b-141)



(b-142)

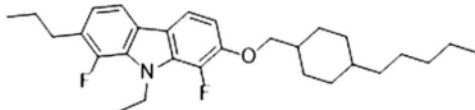


(b-143)

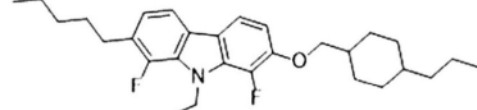


(b-144)

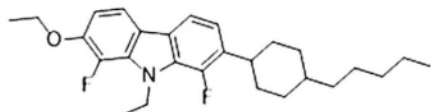
[0592]



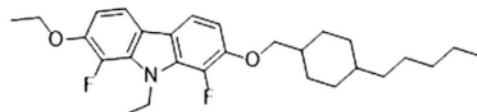
(b-145)



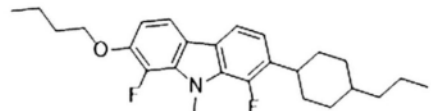
(b-146)



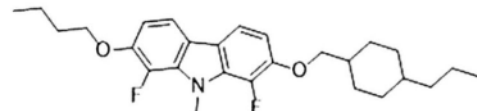
(b-147)



(b-148)



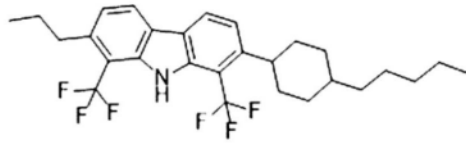
(b-149)



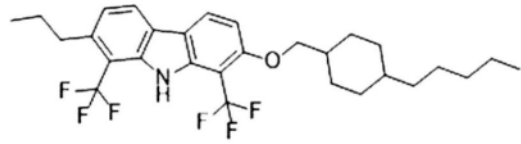
(b-150)

[0593]

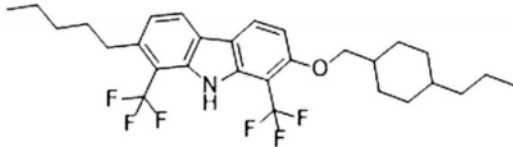
[化98]



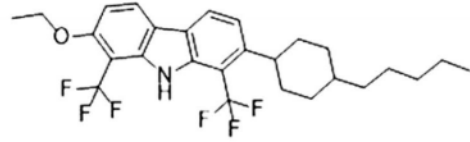
(b-151)



(b-152)

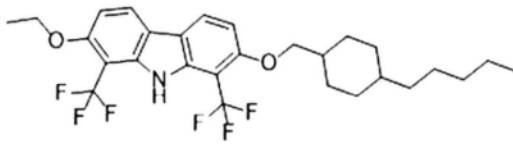


(b-153)

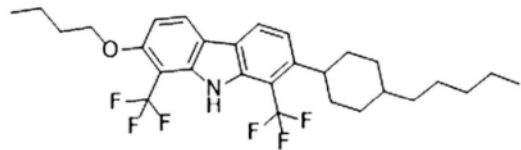


(b-154)

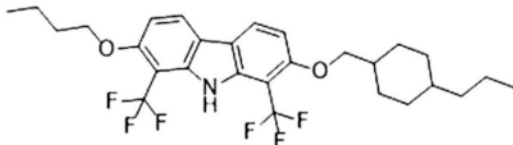
[0594]



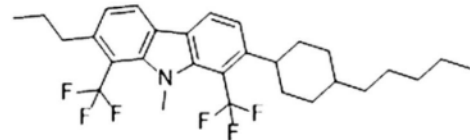
(b-155)



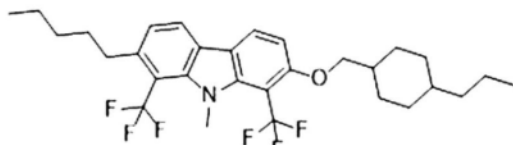
(b-156)



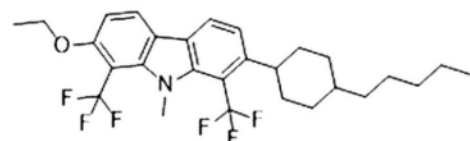
(b-157)



(b-158)

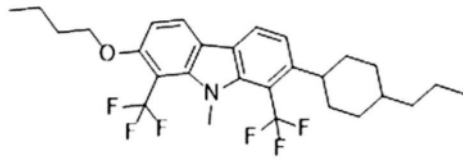


(b-159)

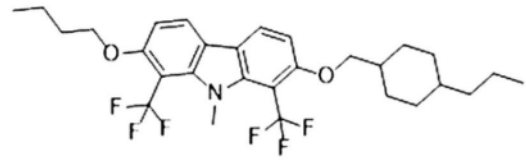


(b-160)

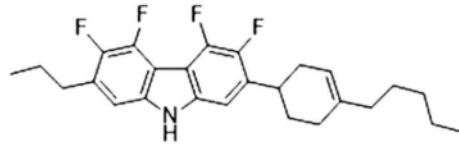
[0595] [化99]



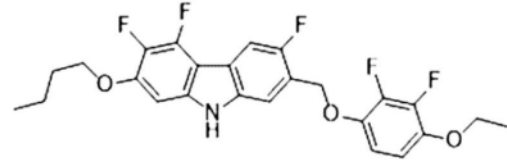
(b-161)



(b-162)

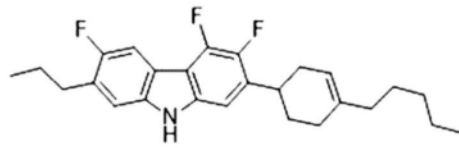


(b-163)

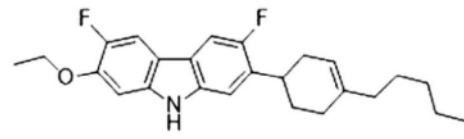


(b-164)

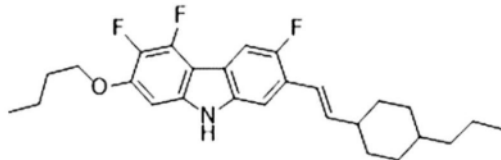
[0596]



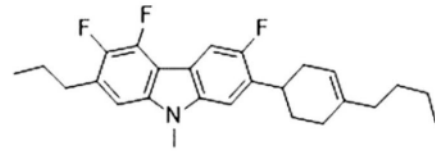
(b-165)



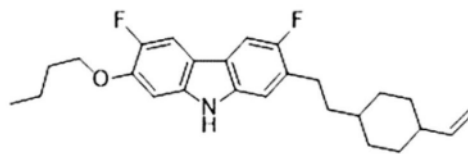
(b-166)



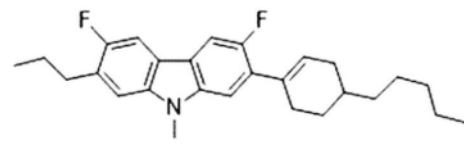
(b-167)



(b-168)

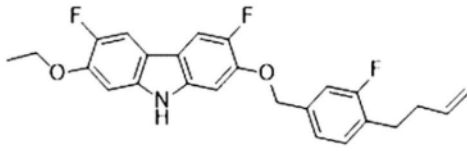


(b-169)

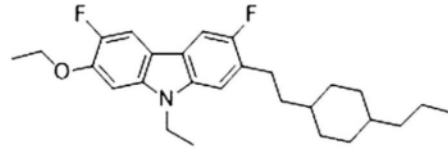


(b-170)

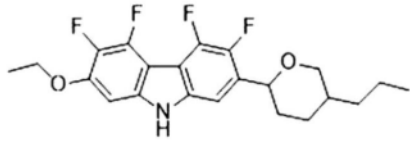
[0597] [化100]



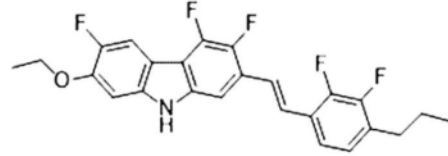
(b-171)



(b-172)

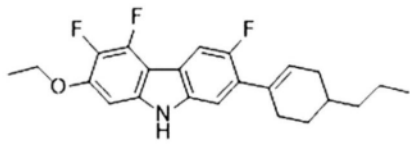


(b-173)

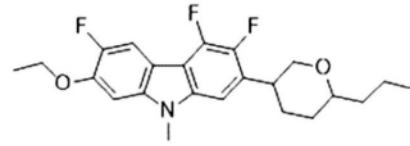


(b-174)

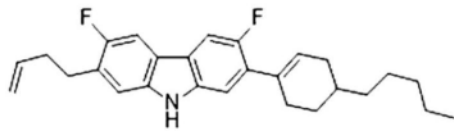
[0598]



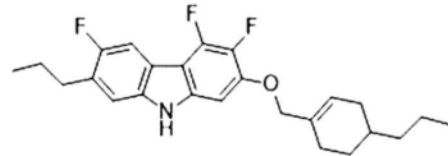
(b-175)



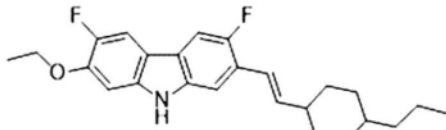
(b-176)



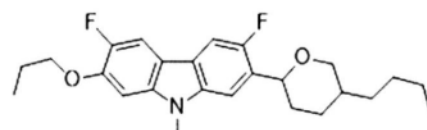
(b-177)



(b-178)

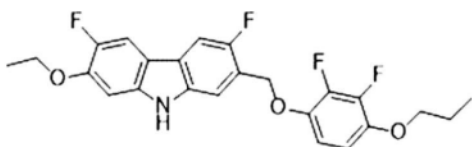


(b-179)

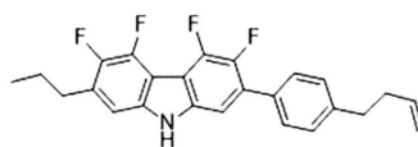


(b-180)

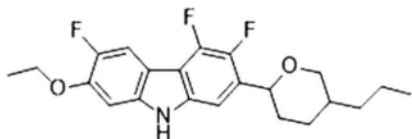
[0599] [化101]



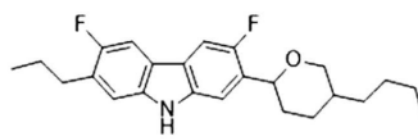
(b-181)



(b-182)

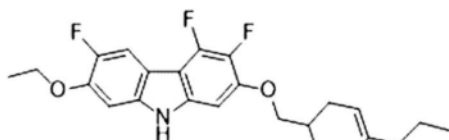


(b-183)

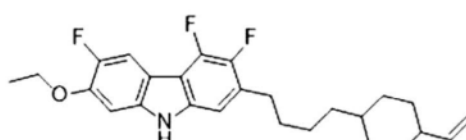


(b-184)

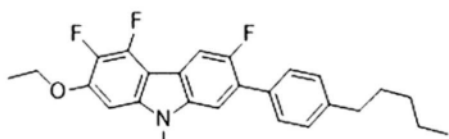
[0600]



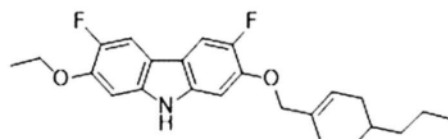
(b-185)



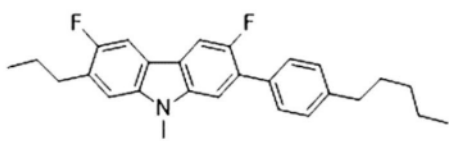
(b-186)



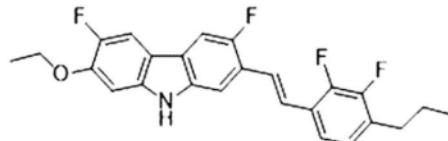
(b-187)



(b-188)



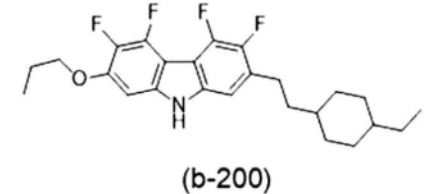
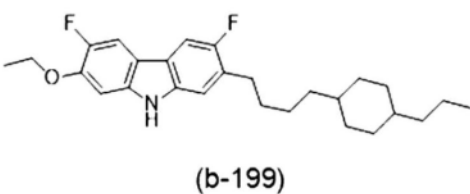
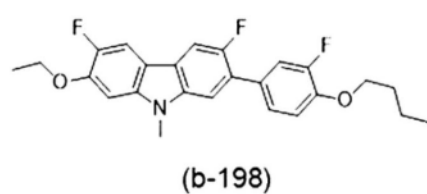
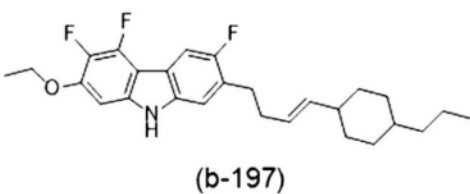
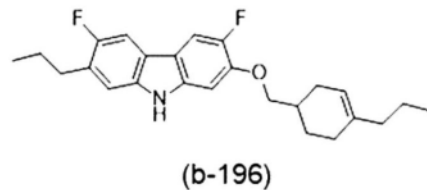
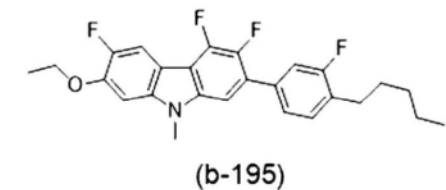
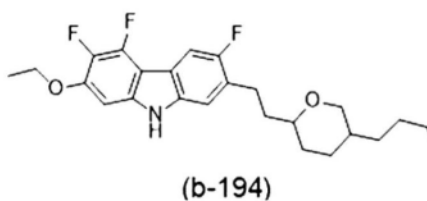
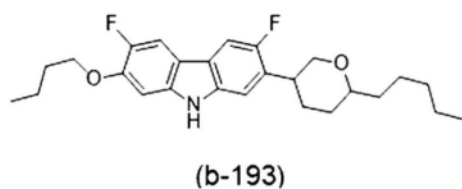
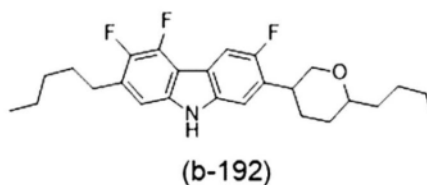
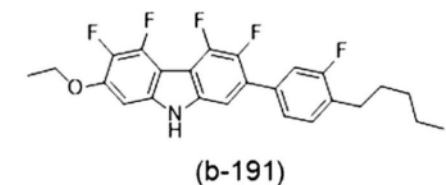
(b-189)



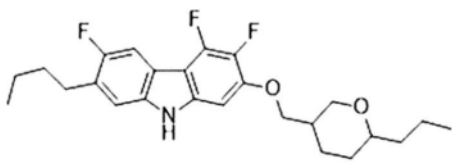
(b-190)

[0601] [化102]

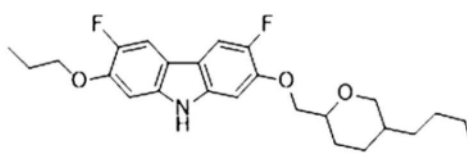
[0602]



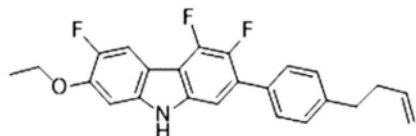
[0603] [化103]



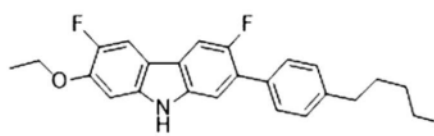
(b-201)



(b-202)

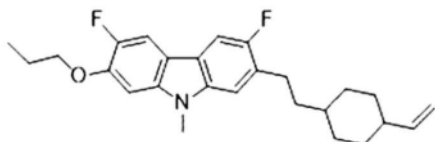


(b-203)

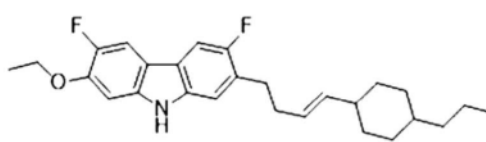


(b-204)

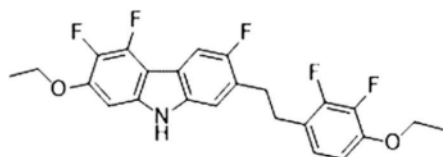
[0604]



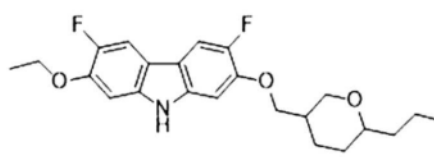
(b-205)



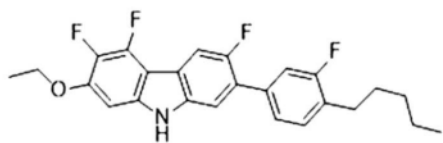
(b-206)



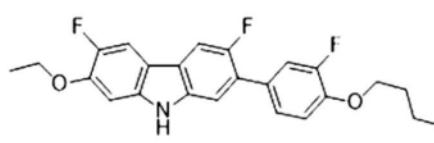
(b-207)



(b-208)

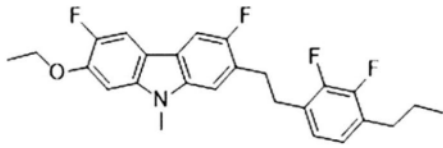


(b-209)

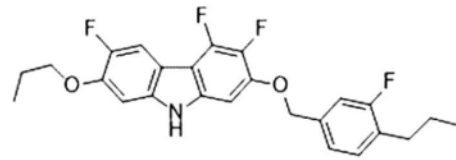


(b-210)

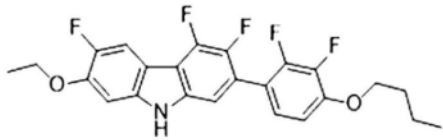
[0605] [化104]



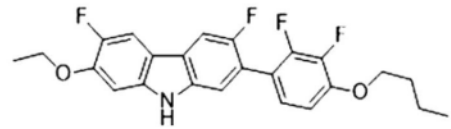
(b-211)



(b-212)

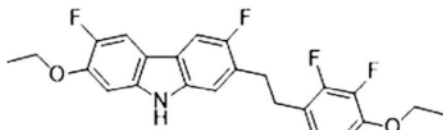


(b-213)

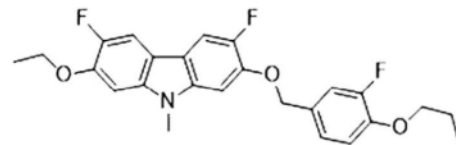


(b-214)

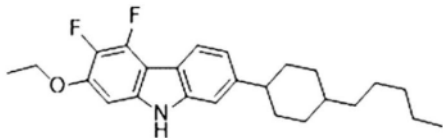
[0606]



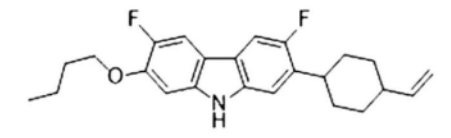
(b-215)



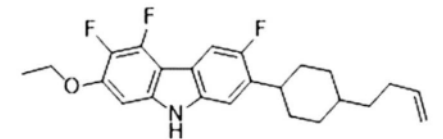
(b-216)



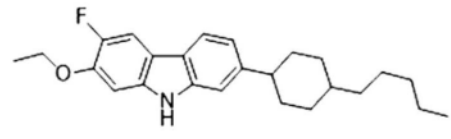
(b-217)



(b-218)

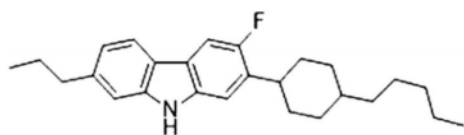


(b-219)

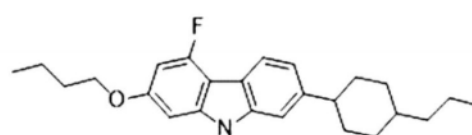


(b-220)

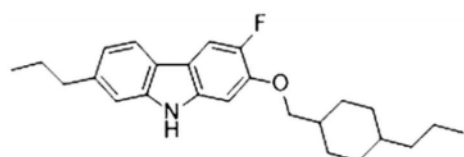
[0607] [化105]



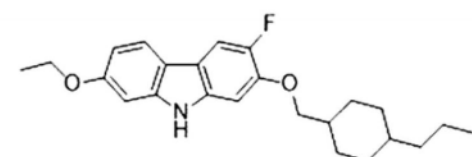
(b-221)



(b-222)

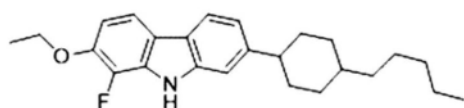


(b-223)

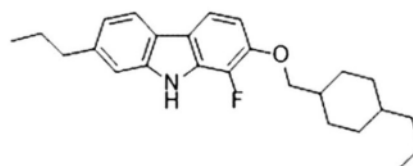


(b-224)

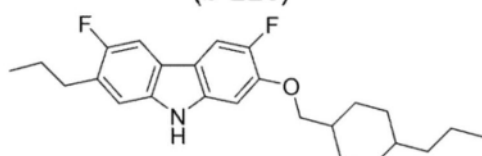
[0608]



(b-225)



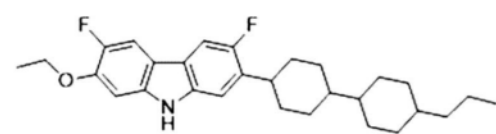
(b-226)



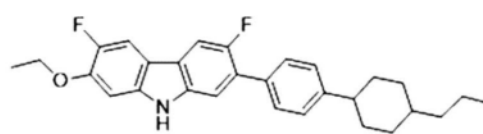
(b-227)

[0609]

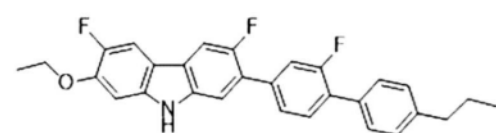
[化106]



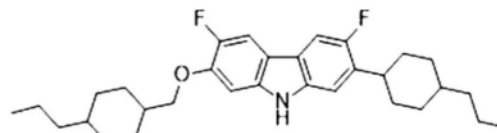
(c-1)



(c-2)

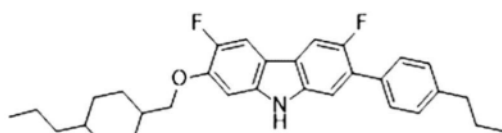


(c-3)

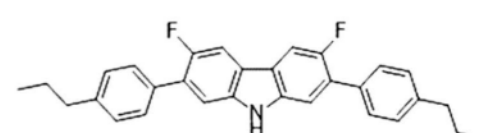


(c-4)

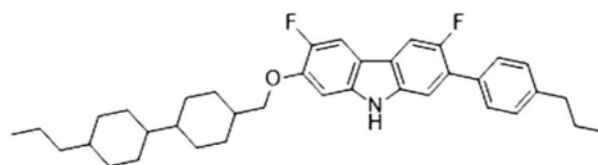
[0610]



(c-5)



(c-6)

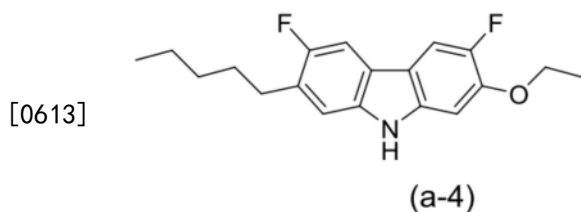


(c-7)

[0611] 一边参考合成例中所记载的方法、或“2.化合物(1)的合成”一项,一边合成以下所

示的化合物。

[0612] [化107]



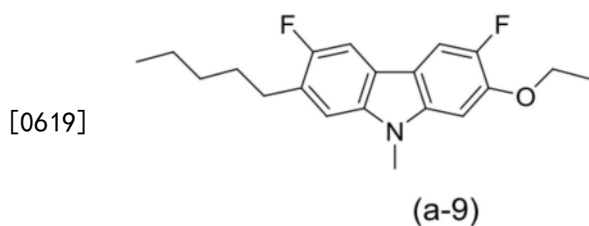
[0614]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$ ppm) : 7.79 (brs, 1H) , 7.62 (d,  $J=10.9\text{Hz}$ , 1H) , 7.50 (d,  $J=10.3\text{Hz}$ , 1H) , 7.15 (d,  $J=6.3\text{Hz}$ , 1H) , 6.94 (d,  $J=6.9\text{Hz}$ , 1H) , 4.17 (q,  $J=6.9\text{Hz}$ , 2H) , 2.76 (t,  $J=7.5\text{Hz}$ , 2H) , 1.67 (quin,  $J=7.5\text{Hz}$ , 2H) , 1.51 (t,  $J=6.9\text{Hz}$ , 3H) , 1.40-1.32 (m, 4H) , 0.90 (t,  $J=7.5\text{Hz}$ , 3H) .

[0615] 化合物 (a-4) 的物性为如下所述。

[0616] 转变温度: C 173.7 I.

[0617] 上限温度 ( $T_{\text{NI}}$ ) = 47.3°C; 光学各向异性 ( $\Delta n$ ) = 0.187; 介电各向异性 ( $\Delta \epsilon$ ) = -15.18; 粘度 ( $\eta$ ) = 258.2 mPa · s.

[0618] [化108]



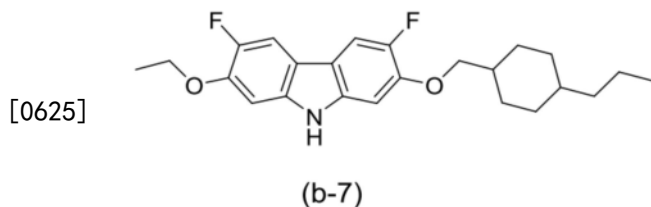
[0620]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$ ppm) : 7.64 (d,  $J=11.5\text{Hz}$ , 1H) , 7.53 (d,  $J=9.7\text{Hz}$ , 1H) , 7.10 (d,  $J=6.3\text{Hz}$ , 1H) , 6.87 (d,  $J=6.9\text{Hz}$ , 1H) , 4.22 (q,  $J=6.9\text{Hz}$ , 2H) , 3.77 (s, 3H) , 2.80 (t,  $J=7.5\text{Hz}$ , 2H) , 1.70 (quin,  $J=7.5\text{Hz}$ , 2H) , 1.53 (t,  $J=6.9\text{Hz}$ , 3H) , 1.41-1.35 (m, 4H) , 0.91 (t,  $J=7.5\text{Hz}$ , 3H) .

[0621] 化合物 (a-9) 的物性为如下所述。

[0622] 转变温度: C 73.4 I.

[0623] 上限温度 ( $T_{\text{NI}}$ ) = -44.7°C; 光学各向异性 ( $\Delta n$ ) = 0.127; 介电各向异性 ( $\Delta \epsilon$ ) = -7.72; 粘度 ( $\eta$ ) = 145.7 mPa · s.

[0624] [化109]



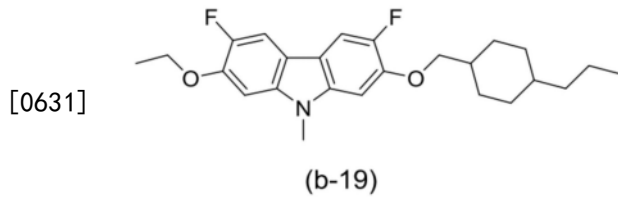
[0626]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$ ppm) : 7.79 (brs, 1H) , 7.57 (d,  $J=4.0\text{Hz}$ , 1H) , 7.55 (d,  $J=3.5\text{Hz}$ , 1H) , 6.95 (d,  $J=6.3\text{Hz}$ , 1H) , 6.94 (d,  $J=6.3\text{Hz}$ , 1H) , 4.17 (q,  $J=6.9\text{Hz}$ , 2H) , 3.88 (d,  $J=6.3\text{Hz}$ , 2H) , 1.98-1.94 (m, 2H) , 1.87-1.80 (m, 3H) , 1.51 (t,  $J=6.9\text{Hz}$ , 3H) , 1.37-1.16 (m, 5H) , 1.09 (dq,  $J=2.9, 12.6\text{Hz}$ , 2H) , 0.96 (dq,  $J=2.9, 12.6\text{Hz}$ , 2H) , 0.89 (t,  $J=7.5\text{Hz}$ , 3H) .

[0627] 化合物 (b-7) 的物性为如下所述。

[0628] 转变温度: C 233.1 I.

[0629] 上限温度 ( $T_{NI}$ ) = 114.3°C; 光学各向异性 ( $\Delta n$ ) = 0.187; 介电各向异性 ( $\Delta \epsilon$ ) = -10.5; 粘度 ( $\eta$ ) = 99.4 mPa · s.

[0630] [化110]



[0632]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta_{\text{ppm}}$ ): 7.59 (d,  $J=3.5\text{Hz}$ , 1H), 7.57 (d,  $J=4.0\text{Hz}$ , 1H), 6.87 (d,  $J=6.9\text{Hz}$ , 1H), 6.85 (d,  $J=6.9\text{Hz}$ , 1H), 4.21 (q,  $J=6.9\text{Hz}$ , 2H), 3.91 (d,  $J=6.3\text{Hz}$ , 2H), 3.75 (s, 3H), 2.00-1.96 (m, 2H), 1.91-1.81 (m, 3H), 1.52 (t,  $J=6.9\text{Hz}$ , 3H), 1.37-1.17 (m, 5H), 1.11 (dq,  $J=3.5, 12.6\text{Hz}$ , 2H), 0.97 (dq,  $J=3.5, 12.6\text{Hz}$ , 2H), 0.89 (t,  $J=7.5\text{Hz}$ , 3H).

[0633] 化合物 (b-19) 的物性为如下所述。

[0634] 转变温度: C 170.9 I.

[0635] 上限温度 ( $T_{NI}$ ) = 84.3°C; 光学各向异性 ( $\Delta n$ ) = 0.187; 介电各向异性 ( $\Delta \epsilon$ ) = -11.5; 粘度 ( $\eta$ ) = 145.4 mPa · s.

[0636] 2. 组合物的实施例

[0637] 通过实施例来更详细地说明本发明。实施例为典型例, 因此本发明不受实施例的限制。例如, 本发明除了包含使用例的组合物以外, 也包含使用例1的组合物与使用例2的组合物的混合物。本发明也包含通过将使用例的组合物至少两种混合而制备的混合物。使用例中的化合物是基于下述的表2的定义而由记号表示。表2中, 与1,4-亚环己基相关的立体构型为反式。使用例中位于记号后的括弧内的编号表示化合物所属的化学式。(-)的记号是指与化合物(1)至化合物(15)不同的液晶性化合物。液晶性化合物的比例(百分率)是基于不含添加物的液晶组合物的重量的重量百分率(重量%)。最后, 汇总组合物的物性值。物性是依照之前所记载的方法来测定, 并直接记载(不进行外推)测定值。

[0638] [表3]

[0639] 表3使用记号的化合物的表述法

[0640]  $\text{R}-(\text{A}_1)-\text{Z}_1-\text{-----}-\text{Z}_n-(\text{A}_n)-\text{R}'$

1) 左末端基 -R-	记号	4) 环结构 -A-	记号
$C_nH_{2n+1}-$	n-		H
$C_nH_{2n+1}O-$	nO-		B
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}-$	mOn-		B(F)
$CH_2=CH-$	V-		B(2F)
$C_nH_{2n+1}-CH=CH-$	nV-		B(F,F)
$CH_2=CH-C_nH_{2n}-$	Vn-		B(2F,5F)
$C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-$	mVn-		B(2F,3F)
$CF_2=CH-$	VFF-		B(2F,3Cl)
$CF_2=CH-C_nH_{2n}-$	VFFn-		Py
2) 右末端基 -R'			G
$-C_nH_{2n+1}$	-n		ch
$-OC_nH_{2n+1}$	-On		Dh
$-COOCH_3$	-EMe		ch
$-CH=CH_2$	-V		Cro(7F,8F)
$-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	-Vn		FLF4
$-C_nH_{2n}-CH=CH_2$	-nV		Ca(3F,4F)
$-C_mH_{2m}-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	-mVn		Ca(1F,8F)
$-CH=CF_2$	-VFF		Ca(1F,8F,9Me)
$-F$	-F		
$-Cl$	-Cl		
$-OCF_3$	-OCF3		
$-OCF_2H$	-OCF2H		
$-CF_3$	-CF3		
$-OCH=CH-CF_3$	-OVCF3		
$-C\equiv N$	-C		
3) 键结基 -Z-			
$-C_nH_{2n}-$	n		
$-COO-$	E		
$-CH=CH-$	V		
$-CH_2O-$	1O		
$-OCH_2-$	O1		
$-CF_2O-$	X		
$-C\equiv C-$	T		
	Ca(3F,6F)		
	Ca(3F,6F,9Me)		
	Ca(3F,4F,6F)		
	Ca(6F)		
5) 表述例			
例1 2O-Ca(3F,6F)-O4		例2 3-BB(F,F)XB(F,F)-F	
例3 3-HB-O2		例4 3-HBB(2F,3F)-O2	

[0641]

[0642] [使用例1]

	2O-Ca(3F,6F)-O4	(a-5)	3%
	1-BB-3	(2-8)	7%
	1-BB-5	(2-8)	8%
	2-BTB-1	(2-10)	3%
	3-HHB-1	(3-1)	8%
	3-HHB-O1	(3-1)	5%
	3-HHB-3	(3-1)	14%
[0643]	3-HHB-F	(22-1)	4%
	2-HHB(F)-F	(22-2)	7%
	3-HHB(F)-F	(22-2)	7%
	5-HHB(F)-F	(22-2)	7%
	3-HHB(F,F)-F	(22-3)	2%
	3-HHEB-F	(22-10)	4%
	5-HHEB-F	(22-10)	4%
	2-HB-C	(24-1)	5%
	3-HB-C	(24-1)	12%
[0644]	NI = 95.7°C; $\eta = 22.1 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ ; $\Delta n = 0.112$ ; $\Delta \varepsilon = 3.8$ 。		
[0645]	[使用例2]		
	4O-Ca(1F,8F)-O2	(a-71)	8%
	3-HH-4	(2-1)	12%
	7-HB-1	(2-5)	3%
	5-HB-O2	(2-5)	2%
[0646]	5-HBB(F)B-2	(4-5)	7%
	5-HBB(F)B-3	(4-5)	6%
	3-HB-CL	(21-2)	5%
	3-HHB(F,F)-F	(22-3)	3%
	3-HBB(F,F)-F	(22-24)	30%
	5-HBB(F,F)-F	(22-24)	24%
[0647]	NI = 73.6°C; $\eta = 32.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ ; $\Delta n = 0.125$ ; $\Delta \varepsilon = 5.2$ 。		
[0648]	[使用例3]		
	2O-Ca(3F,6F,9Me)-O4	(a-11)	3%
	1V2-HH-1	(2-1)	3%
	1V2-HH-3	(2-1)	4%
[0649]	7-HB(F,F)-F	(21-4)	3%
	2-HHB(F)-F	(22-2)	10%
	3-HHB(F)-F	(22-2)	10%
	5-HHB(F)-F	(22-2)	7%
	2-HBB-F	(22-22)	4%

	3-HBB-F	(22-22)	4%
	5-HBB-F	(22-22)	3%
	2-HBB(F)-F	(22-23)	9%
[0650]	3-HBB(F)-F	(22-23)	9%
	5-HBB(F)-F	(22-23)	16%
	3-HBB(F,F)-F	(22-24)	5%
	5-HBB(F,F)-F	(22-24)	10%
[0651]	[使用例4]		
	4O-Ca(1F,8F,9Me)-O2	(a-74)	10%
	2-HH-3	(2-1)	4%
	3-HH-4	(2-1)	12%
	1O1-HBBH-5	(4-1)	3%
	5-HB-CL	(21-2)	16%
	3-HHB-F	(22-1)	4%
	3-HHB-CL	(22-1)	3%
	4-HHB-CL	(22-1)	4%
[0652]	3-HHB(F)-F	(22-2)	5%
	4-HHB(F)-F	(22-2)	4%
	5-HHB(F)-F	(22-2)	9%
	7-HHB(F)-F	(22-2)	8%
	5-HBB(F)-F	(22-23)	4%
	3-HHBB(F,F)-F	(23-6)	2%
	4-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
	5-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
	3-HH2BB(F,F)-F	(23-15)	3%
	4-HH2BB(F,F)-F	(23-15)	3%
[0653]	NI=106.7°C; $\eta=21.6\text{mPa}\cdot\text{s}$ ; $\Delta n=0.101$ ; $\Delta \varepsilon=2.7$ 。		
[0654]	[使用例5]		

	2O-Ca(3F,4F,6F)-O4	(a-36)	2%
	V-HBB-2	(3-4)	10%
	1O1-HBBH-4	(4-1)	4%
	1O1-HBBH-5	(4-1)	2%
	3-HHB(F,F)-F	(22-3)	9%
[0655]	3-H2HB(F,F)-F	(22-15)	8%
	4-H2HB(F,F)-F	(22-15)	8%
	5-H2HB(F,F)-F	(22-15)	8%
	3-HBB(F,F)-F	(22-24)	11%
	5-HBB(F,F)-F	(22-24)	20%
	3-H2BB(F,F)-F	(22-27)	10%
	5-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
[0656]	3-HH2BB(F,F)-F	(23-15)	3%
	5-HHEBB-F	(23-17)	2%
[0657]	NI=103.0℃;η=34.3mPa·s;Δn=0.123;Δε=7.8。		
[0658]	[使用例6]		
	2O-Ca(3F,4F,6F)-4	(a-232)	3%
	5-HBBH-3	(4-1)	3%
	3-HB(F)BH-3	(4-2)	3%
	5-HB-F	(21-2)	9%
	6-HB-F	(21-2)	9%
	7-HB-F	(21-2)	7%
	2-HHB-OCF3	(22-1)	7%
	3-HHB-OCF3	(22-1)	7%
[0659]	4-HHB-OCF3	(22-1)	7%
	5-HHB-OCF3	(22-1)	5%
	3-HHB(F,F)-OCF2H	(22-3)	4%
	3-HHB(F,F)-OCF3	(22-3)	5%
	3-HH2B-OCF3	(22-4)	4%
	5-HH2B-OCF3	(22-4)	4%
	3-HH2B(F)-F	(22-5)	3%
	3-HBB(F)-F	(22-23)	10%
	5-HBB(F)-F	(22-23)	10%
[0660]	[使用例7]		

	2O-Ca(3F,6F)-5	(a-4)	3%
	2-HH-5	(2-1)	5%
	3-HH-4	(2-1)	4%
	5-B(F)BB-2	(3-8)	4%
	5-HB-CL	(21-2)	11%
	3-HHB(F,F)-F	(22-3)	8%
	3-HHEB(F,F)-F	(22-12)	7%
[0661]	4-HHEB(F,F)-F	(22-12)	3%
	5-HHEB(F,F)-F	(22-12)	3%
	3-HBB(F,F)-F	(22-24)	20%
	5-HBB(F,F)-F	(22-24)	15%
	2-HBEB(F,F)-F	(22-39)	3%
	3-HBEB(F,F)-F	(22-39)	5%
	5-HBEB(F,F)-F	(22-39)	3%
	3-HHBB(F,F)-F	(23-6)	6%
[0662]	[使用例8]		
	2O-Ca(3F,4F)-4	(a-233)	3%
	V2-HHB-1	(3-1)	5%
	3-HB-CL	(21-2)	6%
	5-HB-CL	(21-2)	4%
	3-HHB-OCF3	(22-1)	5%
	5-HHB(F)-F	(22-2)	5%
	V-HHB(F)-F	(22-2)	5%
[0663]	3-H2HB-OCF3	(22-13)	5%
	5-H2HB(F,F)-F	(22-15)	5%
	5-H4HB-OCF3	(22-19)	12%
	5-H4HB(F,F)-F	(22-21)	7%
	3-H4HB(F,F)-CF3	(22-21)	8%
	5-H4HB(F,F)-CF3	(22-21)	10%
	2-H2BB(F)-F	(22-26)	5%
	3-H2BB(F)-F	(22-26)	10%
	3-HBEB(F,F)-F	(22-39)	5%
[0664]	[使用例9]		

	2O-Ca(6F)-5	(a-234)	3%
	3-HH-4	(2-1)	10%
	3-HH-5	(2-1)	5%
	3-HB-O2	(2-5)	15%
	3-HHB-1	(3-1)	8%
	3-HHB-O1	(3-1)	5%
[0665]	5-HB-CL	(21-2)	14%
	7-HB(F,F)-F	(21-4)	3%
	2-HHB(F)-F	(22-2)	7%
	3-HHB(F)-F	(22-2)	7%
	5-HHB(F)-F	(22-2)	7%
	3-HHB(F,F)-F	(22-3)	6%
	3-H2HB(F,F)-F	(22-15)	5%
	4-H2HB(F,F)-F	(22-15)	5%
[0666]	[使用例10]		
	5-HCa(3F,6F)-3	(b-1)	3%
	3-HH-4	(2-1)	9%
	3-HH-5	(2-1)	10%
[0667]	3-HHB-3	(3-1)	10%
	5-HB-CL	(21-2)	3%
	7-HB(F)-F	(21-3)	7%
	2-HHB(F,F)-F	(22-3)	4%
	3-HHB(F,F)-F	(22-3)	5%
	3-HHEB-F	(22-10)	8%
	5-HHEB-F	(22-10)	8%
[0668]	3-HHEB(F,F)-F	(22-12)	10%
	4-HHEB(F,F)-F	(22-12)	5%
	3-GHB(F,F)-F	(22-109)	5%
	4-GHB(F,F)-F	(22-109)	6%
	5-GHB(F,F)-F	(22-109)	7%
[0669]	NI=82.6℃;η=21.7mPa·s;Δn=0.068;Δε=5.9。		
[0670]	[使用例11]		

	3-H1OCa(3F,6F)-3	(b-227)	3%
	3-HH-VFF	(2-1)	5%
	5-HH-VFF	(2-1)	25%
	2-BTB-1	(2-10)	7%
	3-HHB-1	(3-1)	4%
[0671]	VFF-HHB-1	(3-1)	8%
	VFF2-HHB-1	(3-1)	11%
	3-H2BTB-2	(3-17)	5%
	3-H2BTB-3	(3-17)	4%
	3-H2BTB-4	(3-17)	4%
	3-HB-C	(24-1)	18%
	1V2-BEB(F,F)-C	(24-15)	6%
[0672]	[使用例12]		
	2O-Ca(3F,6F)-O4	(a-5)	4%
	3-HH-V	(2-1)	35%
	3-HH-V1	(2-1)	5%
	5-HH-V	(2-1)	5%
	3-HHB-1	(3-1)	4%
	V-HHB-1	(3-1)	5%
	2-BB(F)B-3	(3-6)	5%
[0673]	3-HHEH-5	(3-13)	3%
	1V2-BB-F	(21-1)	3%
	3-BB(F,F)XB(F,F)-F	(22-97)	6%
	3-BB(2F,3F)XB(F,F)-F	(22-114)	3%
	3-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
	3-HBBXB(F,F)-F	(23-32)	3%
	5-HB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-41)	5%
	3-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	3%
	4-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	5%
[0674]	5-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	3%
[0675]	NI=81.0°C; $\eta=18.0\text{mPa}\cdot\text{s}$ ; $\Delta n=0.102$ ; $\Delta \varepsilon=3.5$ 。		
[0676]	[使用例13]		

	4O-Ca(1F,8F)-O2	(a-71)	10%
	3-HH-V	(2-1)	31%
	3-HH-V1	(2-1)	7%
	V-HH-V1	(2-1)	6%
	3-HHB-1	(3-1)	4%
	V-HHB-1	(3-1)	5%
	1-BB(F)B-2V	(3-6)	4%
	3-HHEH-5	(3-13)	3%
[0677]	1V2-BB-F	(21-1)	3%
	3-BB(F,F)XB(F,F)-F	(22-97)	3%
	3-HHXB(F,F)-CF3	(22-100)	3%
	3-GB(F,F)XB(F,F)-F	(22-113)	2%
	3-GB(F)B(F,F)-F	(22-116)	2%
	3-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
	3-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	3%
	4-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	5%
	5-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	3%
	3-GB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-57)	3%
[0678]	NI=72.3°C; $\eta=19.9\text{mPa}\cdot\text{s}$ ; $\Delta n=0.106$ ; $\Delta \varepsilon=3.7$ 。		
[0679]	[使用例14]		
	2O-Ca(3F,6F,9Me)-O4	(a-11)	5%
	3-HH-V	(2-1)	30%
	3-HH-V1	(2-1)	5%
	3-HHB-1	(3-1)	4%
	V-HHB-1	(3-1)	5%
	3-HBB-2	(3-4)	5%
	V2-BB(F)B-1	(3-6)	5%
[0680]	3-HHEH-3	(3-13)	3%
	3-HHEH-5	(3-13)	3%
	1V2-BB-F	(21-1)	3%
	3-BB(F,F)XB(F,F)-F	(22-97)	4%
	3-GB(F,F)XB(F,F)-F	(22-113)	3%
	3-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
	3-HBB(F,F)XB(F,F)-F	(23-38)	3%
	3-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-46)	3%
	4-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	3%

	5-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	3%
[0681]	3-GB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-57)	5%
	4-GB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-57)	3%
	5-GB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-57)	2%
[0682]	[使用例15]		
	4O-Ca(1F,8F,9Me)-O2	(a-74)	9%
	3-HH-V	(2-1)	25%
	3-HH-V1	(2-1)	4%
	3-HHB-1	(3-1)	5%
	V-HHB-1	(3-1)	4%
	V2-BB(F)B-1	(3-6)	4%
	3-HHEH-5	(3-13)	3%
	3-HHEBH-3	(4-6)	4%
	1V2-BB-F	(21-1)	4%
[0683]	3-BB(F)B(F,F)-F	(22-69)	3%
	3-BB(F,F)XB(F,F)-F	(22-97)	5%
	3-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
	5-HB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-41)	4%
	4-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	5%
	5-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-47)	3%
	2-dhBB(F,F)XB(F,F)-F	(23-50)	2%
	3-dhBB(F,F)XB(F,F)-F	(23-50)	3%
	3-GBB(F)B(F,F)-F	(23-55)	3%
	4-GBB(F)B(F,F)-F	(23-55)	3%
	3-BB(F,F)XB(F)B(F,F)-F	(23-56)	4%
[0684]	NI=83.2℃;η=25.5mPa·s;Δn=0.115;Δε=5.5。		
[0685]	[使用例16]		

	2O-Ca(3F,4F,6F)-O4	(a-36)	2%
	3-HH-V	(2-1)	33%
	3-HH-V1	(2-1)	5%
	3-HHB-1	(3-1)	4%
	V-HHB-1	(3-1)	5%
[0686]	V2-BB(F)B-1	(3-6)	5%
	3-HHEH-5	(3-13)	3%
	1V2-BB-F	(21-1)	3%
	3-BB(F)B(F,F)-CF3	(22-69)	3%
	3-BB(F,F)XB(F,F)-F	(22-97)	5%
	3-HHXB(F,F)-F	(22-100)	5%
	3-GB(F,F)XB(F,F)-F	(22-113)	3%
	3-GB(F)B(F)-F	(22-115)	3%
	3-HHBB(F,F)-F	(23-6)	3%
	5-HB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-41)	3%
[0687]	3-GB(F)B(F,F)XB(F,F)-F	(23-57)	3%
	3-GBB(F,F)XB(F,F)-F	(23-58)	3%
	4-GBB(F,F)XB(F,F)-F	(23-58)	3%
	5-GBB(F,F)XB(F,F)-F	(23-58)	3%
	3-GB(F)B(F)B(F)-F	(23-59)	3%
[0688]	NI=81.9°C; $\eta=19.0\text{mPa}\cdot\text{s}$ ; $\Delta n=0.096$ ; $\Delta\varepsilon=5.4$ 。		
[0689]	[使用例17]		
	2O-Ca(3F,4F,6F)-4	(a-232)	4%
	3-HH-4	(2-1)	5%
	3-HB-O1	(2-5)	15%
	3-HHB-1	(3-1)	6%
[0690]	3-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	12%
	5-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	12%
	2-HHB(2F,3F)-1	(6-1)	8%
	3-HHB(2F,3F)-1	(6-1)	12%
	3-HHB(2F,3F)-O2	(6-1)	13%
	5-HHB(2F,3F)-O2	(6-1)	13%
[0691]	[使用例18]		

	2O-Ca(3F,6F)-5	(a-4)	2%
	2-HH-5	(2-1)	3%
	3-HH-4	(2-1)	15%
	3-HH-5	(2-1)	4%
	3-HB-O2	(2-5)	12%
	3-HHB-1	(3-1)	3%
[0692]	3-HHB-3	(3-1)	4%
	3-HHB-O1	(3-1)	3%
	3-H2B(2F,3F)-O2	(5-4)	15%
	5-H2B(2F,3F)-O2	(5-4)	13%
	2-HBB(2F,3F)-O2	(6-7)	3%
	3-HBB(2F,3F)-O2	(6-7)	9%
	5-HBB(2F,3F)-O2	(6-7)	9%
	3-HHB(2F,3Cl)-O2	(6-12)	5%
[0693]	[使用例19]		
	2O-Ca(3F,4F)-4	(a-233)	4%
[0694]	2-HH-3	(2-1)	16%
	2-HH-5	(2-1)	5%
	3-HH-4	(2-1)	9%
	3-HB-O2	(2-5)	2%
	1-BB-3	(2-8)	9%
	3-HHB-1	(3-1)	5%
	3-HHB-O1	(3-1)	3%
[0695]	5-B(F)BB-2	(3-8)	2%
	3-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	9%
	5-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	6%
	2-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	13%
	3-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	17%
[0696]	[使用例20]		

	2O-Ca(6F)-5	(a-234)	3%
	2-HH-3	(2-1)	16%
	7-HB-1	(2-5)	10%
	5-HB-O2	(2-5)	8%
	5-HBB(F)B-2	(4-5)	7%
[0697]	5-HBB(F)B-3	(4-5)	10%
	3-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	17%
	5-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	16%
	3-HHB(2F,3Cl)-O2	(6-12)	3%
	4-HHB(2F,3Cl)-O2	(6-12)	3%
	5-HHB(2F,3Cl)-O2	(6-12)	2%
	3-HH1OCro(7F,8F)-5	(10-6)	5%
[0698]	[使用例21]		
	5-HCa(3F,6F)-3	(b-1)	3%
	3-HH-V	(2-1)	29%
	1-BB-3	(2-8)	10%
[0699]	3-HHB-1	(3-1)	8%
	5-B(F)BB-2	(3-8)	6%
	3-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	13%
	2-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	17%
	3-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	14%
[0700]	[使用例22]		
	3-H1OCa(3F,6F)-3	(b-227)	2%
	2-HH-3	(2-1)	6%
[0701]	3-HH-V1	(2-1)	9%
	1V2-HH-1	(2-1)	7%
	1V2-HH-3	(2-1)	6%
	4-HH-V	(2-1)	3%
	3-HHB-1	(3-1)	3%
	3-HHB-3	(3-1)	2%
	3-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	8%
	5-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	4%
[0702]	3-H1OB(2F,3F)-O2	(5-5)	7%
	3-HDhB(2F,3F)-O2	(6-3)	7%
	2-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	8%
	3-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	17%
	2-BB(2F,3F)B-3	(7-1)	11%
[0703]	[使用例23]		

	2O-Ca(3F,6F)-O4	(a-5)	3%
	3-HH-4	(2-1)	5%
	3-HH-VFF	(2-1)	4%
	3-HB-O1	(2-5)	15%
	1-BB-5	(2-8)	4%
[0704]	3-HHB-1	(3-1)	6%
	5-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	9%
	V-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	4%
	2-HHB(2F,3F)-1	(6-1)	12%
	3-HHB(2F,3F)-1	(6-1)	12%
	3-HHB(2F,3F)-O2	(6-1)	13%
	5-HHB(2F,3F)-O2	(6-1)	13%
[0705]	NI=88.1℃;η=37.4mPa·s;Δn=0.096;Δε=-3.5。		
[0706]	[使用例24]		
	4O-Ca(1F,8F)-O2	(a-71)	5%
	2-HH-3	(2-1)	16%
	7-HB-1	(2-5)	8%
	5-HB-O2	(2-5)	7%
	5-HBB(F)B-2	(4-5)	9%
	5-HBB(F)B-3	(4-5)	10%
	3-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	13%
[0707]	5-HB(2F,3F)-O2	(5-1)	11%
	2-H1OB(2F,3F)-O2	(5-5)	2%
	3-H1OB(2F,3F)-O2	(5-5)	2%
	2O-B(2F,3F)B(F)-O2	(5-9)	2%
	4O-B(2F,3F)B(F)-O2	(5-9)	2%
	V-HHB(2F,3F)-O2	(6-1)	5%
	V2-HHB(2F,3F)-O2	(6-1)	4%
	5-HHB(2F,3Cl)-O2	(6-12)	2%
[0708]	3-HH1OCro(7F,8F)-5	(10-6)	2%
[0709]	NI=74.1℃;η=24.6mPa·s;Δn=0.108;Δε=-2.4。		
[0710]	[使用例25]		

	2O-Ca(3F,6F,9Me)-O4	(a-11)	3%
	2-HH-5	(2-1)	3%
	3-HH-4	(2-1)	15%
	3-HH-5	(2-1)	4%
	3-HB-O2	(2-5)	12%
	3-HHB-1	(3-1)	3%
	3-HHB-3	(3-1)	4%
	3-HHB-O1	(3-1)	3%
[0711]	3-DhB(2F,3F)-O2	(5-2)	3%
	2-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	9%
	5-H2B(2F,3F)-O2	(5-4)	9%
	3-HH2B(2F,3F)-O2	(6-4)	3%
	3-HBB(2F,3F)-O2	(6-7)	9%
	5-HBB(2F,3F)-O2	(6-7)	9%
	V-HBB(2F,3F)-O2	(6-7)	3%
	3-HHB(2F,3Cl)-O2	(6-12)	5%
	2O-B(2F,3F)B(F)H-3	(6-19)	3%
[0712]	[使用例26]		
	4O-Ca(1F,8F,9Me)-O2	(a-74)	12%
	2-HH-3	(2-1)	6%
	3-HH-V1	(2-1)	10%
	1V2-HH-1	(2-1)	8%
	1V2-HH-3	(2-1)	7%
	V-HHB-1	(3-1)	3%
	V2-HHB-1	(3-1)	3%
	3-HHB-1	(3-1)	3%
[0713]	3-HHB-3	(3-1)	2%
	5-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	4%
	V2-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	4%
	3-H1OB(2F,3F)-O2	(5-5)	7%
	3-HDhB(2F,3F)-O2	(6-3)	7%
	3-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	13%
	3-dhBB(2F,3F)-O2	(6-9)	3%
	3-HchB(2F,3F)-O2	(6-18)	3%
	2-BB(2F,3F)B-3	(7-1)	5%
[0714]	NI=84.1℃;η=20.7mPa·s;Δn=0.114;Δε=-3.7。		
[0715]	[使用例27]		

	2O-Ca(3F,4F,6F)-O4	(a-36)	2%
	2-HH-3	(2-1)	21%
	3-HH-4	(2-1)	9%
	3-HB-O2	(2-5)	2%
	1-BB-3	(2-8)	5%
	3-HHB-1	(3-1)	3%
	3-HHB-O1	(3-1)	3%
[0716]	V-HBB-2	(3-4)	3%
	5-B(F)BB-2	(3-8)	3%
	3-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	9%
	5-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	6%
	2-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	13%
	3-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	13%
	3-HB(2F,3F)B-2	(7-2)	4%
	V-HH2BB(2F,3F)-O2	(8-3)	4%
[0717]	NI = 76.8°C ; $\eta = 17.2 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ ; $\Delta n = 0.100$ ; $\Delta \varepsilon = -3.2$ 。		
[0718]	[使用例28]		
	2O-Ca(3F,4F,6F)-4	(a-232)	4%
	3-HH-V	(2-1)	28%
	1-BB-3	(2-8)	7%
	3-HHB-1	(3-1)	8%
	5-B(F)BB-2	(3-8)	6%
[0719]	3-BB(2F,3F)-O2	(5-3)	12%
	2-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	15%
	3-HH1OB(2F,3F)-O2	(6-5)	14%
	3-H2BBB(2F,3F)-O2	(8-1)	3%
	5-HFLF4-3	(13-1)	3%

[0720] 产业上的可利用性

[0721] 本发明的液晶性化合物具有良好的物性。含有所述化合物的液晶组合物可广泛地用于个人计算机、电视机等液晶显示元件中。