

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2017年11月23日(23.11.2017)



(10) 国際公開番号

WO 2017/199513 A1

(51) 国際特許分類:

C07C 69/21 (2006.01) C09K 19/20 (2006.01)
C07C 69/54 (2006.01) C09K 19/30 (2006.01)
C07C 69/732 (2006.01) C09K 19/32 (2006.01)
C07C 229/30 (2006.01) C09K 19/34 (2006.01)
C09K 19/02 (2006.01) C09K 19/56 (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01) G02F 1/13 (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01) G02F 1/1337 (2006.01)
C09K 19/18 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2017/007042

(22) 国際出願日: 2017年2月24日(24.02.2017)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

特願 2016-099756 2016年5月18日(18.05.2016) JP
特願 2016-183560 2016年9月21日(21.09.2016) JP

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

(72) 発明者: 矢野 智広(YANO Tomohiro); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C 石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 近藤 史尚(KONDOU Fumitaka); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C 石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 山本 真一(YAMAMOTO Shin-ichi); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C 石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP).

(74) 代理人: 小林 浩, 外 (KOBAYASHI Hiroshi et al.); 〒1040028 東京都中央区八重洲二丁目8番7号 福岡ビル9階 阿部・井窪・片山法律事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

(54) Title: LOW MOLECULAR POLAR COMPOUND FOR HOMOGENEOUSLY ALIGNING LIQUID CRYSTAL MEDIUM, AND LIQUID CRYSTAL MEDIUM CONTAINING SAME

(54) 発明の名称: 液晶媒体をホモジニアス配向させる低分子極性化合物、およびそれを含有する液晶媒体

(57) Abstract: The present invention addresses the problem of providing a liquid crystal composition which does not require an alignment treatment or an alignment film on the substrate, and solves this problem by providing a low molecular polar compound which homogeneously aligns a liquid crystal medium on a substrate, and for example, is characterized by being represented by general formula (1). M-P (1) In formula (1), M is a nonpolar group having a carbon number of 1 or more, and P is a polar group.

(57) 要約: 基板上の配向膜や配向処理が不要な液晶組成物を提供する。液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる低分子極性化合物、例えば下記一般式(1)で表されることを特徴とする低分子極性化合物により、上記課題を解決する。M-P (1) 上記式(1)中、Mは炭素数1以上の無極性基であり、Pは極性基である。



WO 2017/199513 A1

明 細 書

発明の名称：

液晶媒体をホモジニアス配向させる低分子極性化合物、およびそれを含有する液晶媒体

技術分野

[0001] 本発明は、液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる低分子極性化合物（以下、単に「極性化合物」ともいう）、それを含有する液晶媒体に関する。

背景技術

[0002] 液晶表示素子では基板に配向膜を設けたり配向処理（偏光UV照射やラビングなど）を施したりすることによって、液晶セル中の液晶媒体を配向させる。

[0003] これに対して、このような配向処理を施さなくても液晶媒体に極性化合物等を添加することによって液晶媒体を配向させる技術は報告されている（特許文献1）。ここで報告されているのはホメオトロピック配向（垂直配向）させる技術である。

[0004] 一方、液晶媒体をホモジニアス配向させる技術としては、アゾベンゼン骨格をもつ重合性 dendrimer を用いる技術（非特許文献1）や重合性化合物を用いる技術（非特許文献2）があり、これらは配向膜を用いていないが偏光UV照射やラビングなどの配向処理が必要である。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特表2013-543526号公報
特許文献2：特開2003-287755号公報

非特許文献

[0006] 非特許文献1：Mol. Cryst. Liq. Cryst., Volume 610, Issue 1, 2015, Page 201-209

非特許文献2：Society for Information Display International Symposium
(2014), 45(1), 1418-1420

発明の概要

発明が解決しようとする課題

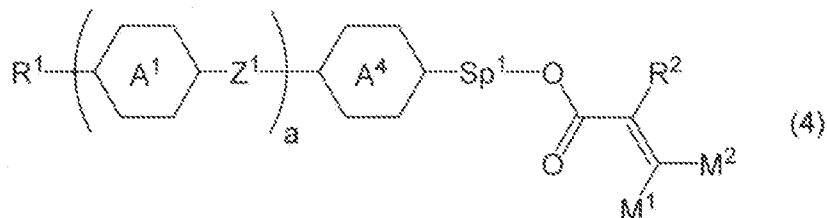
[0007] 本発明は上記状況に鑑みてなされたものであり、従来用いられてきた液晶媒体を配向させるための配向膜または偏光UV照射やラビング等の配向処理を必要とすることなく、液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させることができる低分子極性化合物、それを含有する液晶媒体を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0008] 本発明者らは、上記課題を解決すべく種々検討した結果、好ましくは特定構造の無極性基と極性基とからなる低分子極性化合物により、上記目的を達することができることを見だし、本発明を完成するに至った。

[0009] 項1. 配向処理または配向膜を施されておらず、かつ少なくとも一方に透明電極が形成された一对の基板の間に封入される液晶媒体であって、当該液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる下記一般式(4)で表される低分子極性化合物を含有し、基板に対して自発的にホモジニアス配向する、液晶媒体。

[化12]



上記式(4)中、

R^1 は炭素数1～15のアルキルであり、この R^1 において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は独立して $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で

置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環A¹および環A⁴は、独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、フルオレン-2, 7-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、アントラセン-2, 6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3, 17-ジイル、または2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、独立して、フッ素、塩素、炭素数1~12のアルキル、炭素数2~12のアルケニル、炭素数1~11のアルコキシ、または炭素数2~11のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z¹は独立して単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、このZ¹において、少なくとも1つの-CH₂-は、独立して、-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は独立して-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

S p¹は単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、このS p¹において、少なくとも1つの-CH₂-は、独立して、-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は独立して-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで

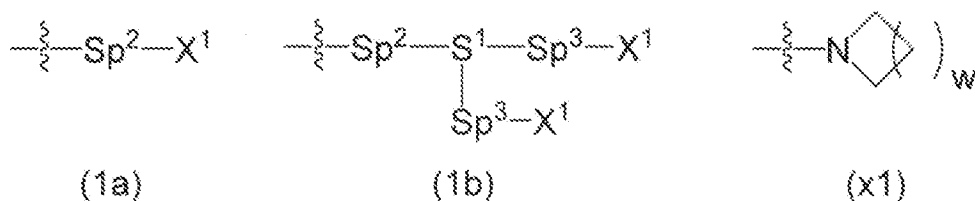
置き換えられてもよく；

M^1 および M^2 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルであり；

a は0、1、2、3、または4であり；

R^2 は、下記一般式(1a)または一般式(1b)で表される基であり；

[化13]



上記式(1a)および式(1b)中、

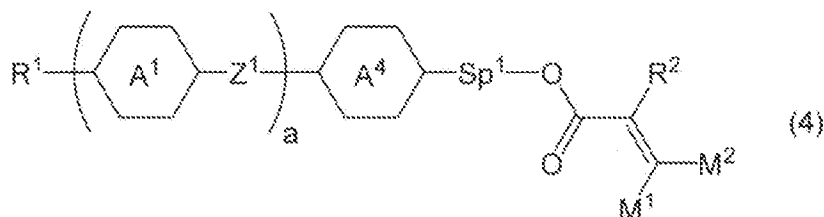
Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、独立して、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{NH}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

S^1 は、 $>\text{CH}-$ または $>\text{N}-$ であり；

X^1 は、独立して、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{OR}^3$ 、 $-\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、上記一般式(x1)で表される基、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{B}(\text{OH})_2$ 、または $-\text{Si}(\text{R}^3)_3$ で表される基であり、ここで R^3 は水素または炭素数1～10のアルキルであり、この R^3 において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、 X^1 において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、上記一般式(x1)中の w は1、2、3または4である。

[0010] 項2. 液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる、下記一般式(4)で表されることを特徴とする、低分子極性化合物。

[化14]



上記式（４）中、

R^1 は炭素数１～１５のアルキルであり、この R^1 において、少なくとも１つの $-CH_2-$ は独立して $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも１つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環 A^1 および環 A^4 は、独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサソ－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、アントラセン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ〔 a 〕フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ〔 a 〕フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、独立して、フッ素、塩素、炭素数１～１２のアルキル、炭素数２～１２のアルケニル、炭素数１～１１のアルコキシ、または炭素数２～１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも１つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z^1 は独立して単結合または炭素数１～１０のアルキレンであり、この Z^1

において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、独立して、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

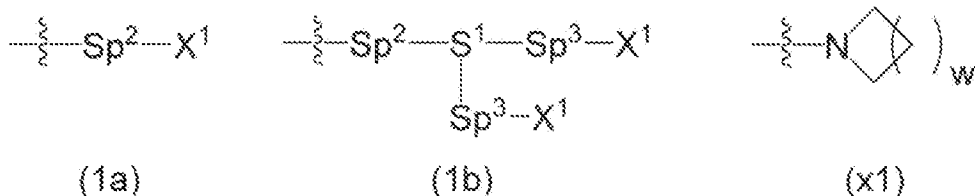
Sp^1 は単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Sp^1 において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、独立して、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

M^1 および M^2 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルであり；

a は0、1、2、3、または4であり；

R^2 は、下記一般式(1a)または一般式(1b)で表される基であり：

[化15]



上記式(1a)および式(1b)中、

Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、独立して、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{NH}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

S^1 は、 $>CH-$ または $>N-$ であり；

X^1 は、独立して、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、上記一般式 (x 1) で表される基、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで R^3 は水素または炭素数1～10のアルキルであり、この R^3 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、 X^1 において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、上記一般式 (x 1) 中の w は1、2、3または4である。

[0011] 項3. 1. 3以上の順相逆相C V積を有することを特徴とする、項2に記載の低分子極性化合物。

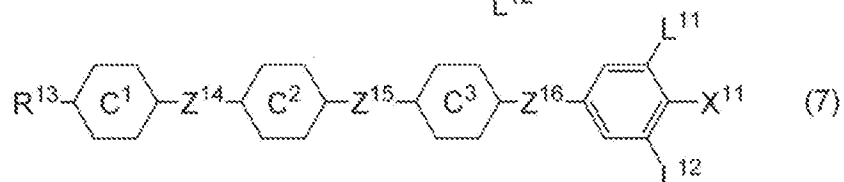
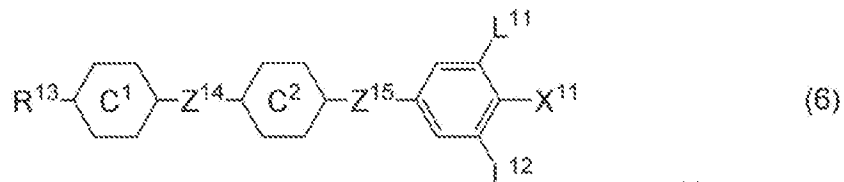
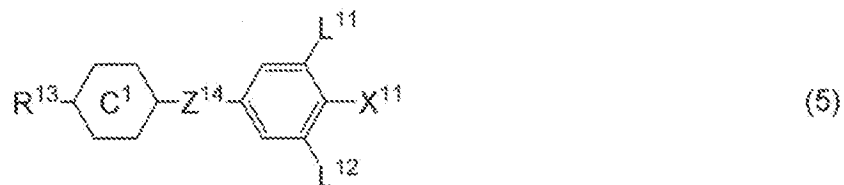
[0012] 項4. 項2または3に記載の低分子極性化合物の少なくとも1つを含有することを特徴とする、液晶組成物。

[0013] 項5. 前記低分子極性化合物の順相逆相C V積とその含有量との積である総順相逆相C V積が0.01以上であることを特徴とする、項4に記載の液晶組成物。

[0014] 項6. 前記総順相逆相C V積と前記基板の表面自由エネルギーとの比（総順相逆相C V積／表面自由エネルギー（N/m））が0.025～1であることを特徴とする、項5に記載の液晶組成物。

[0015] 項7. さらに下記一般式（5）～（7）のいずれかで表される液晶性化合物の少なくとも1つを含有する、項4～6のいずれかに記載の液晶組成物。

[化16]



上記式 (5) ～式 (7) 中、

R^{13} は炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、この R^{13} において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{11} は、フッ素、塩素、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、または $-\text{OCF}_2\text{CHFCF}_3$ であり；

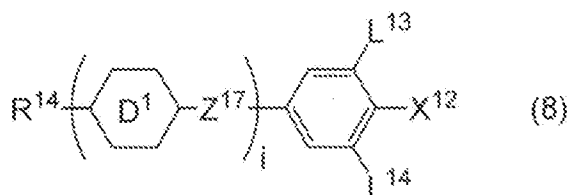
環 C^1 、環 C^2 および環 C^3 は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1, 4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、またはピリミジン-2, 5-ジイルであり；

Z^{14} 、 Z^{15} および Z^{16} は独立して、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、または $-(\text{CH}_2)_4-$ であり；

L^{11} および L^{12} は独立して水素またはフッ素である。

[0016] 項8. さらに下記一般式 (8) で表される液晶性化合物を含有する、項4～7のいずれかに記載の液晶組成物。

[化17]



上記式（８）中、

R^{14} は炭素数１～１０のアルキルまたは炭素数２～１０のアルケニルであり、この R^{14} において、少なくとも１つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{12} は $-C \equiv N$ または $-C \equiv C - C \equiv N$ であり；

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

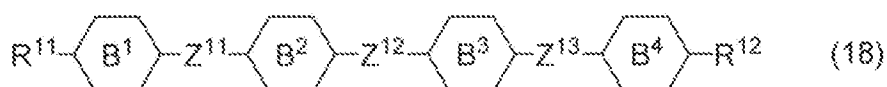
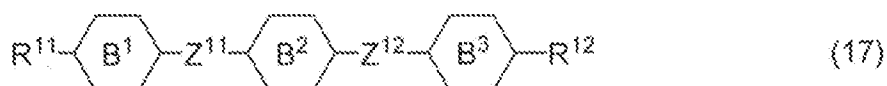
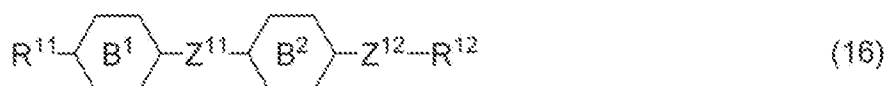
Z^{17} は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

L^{13} および L^{14} は独立して水素またはフッ素であり；

i は、１、２、３、または４である。

[0017] 項９． さらに下記一般式（１６）～（１８）のいずれかで表される液晶性化合物の少なくとも１つを含有する、項４～８のいずれかに記載の液晶組成物。

[化18]



上記式（１６）～式（１８）中、

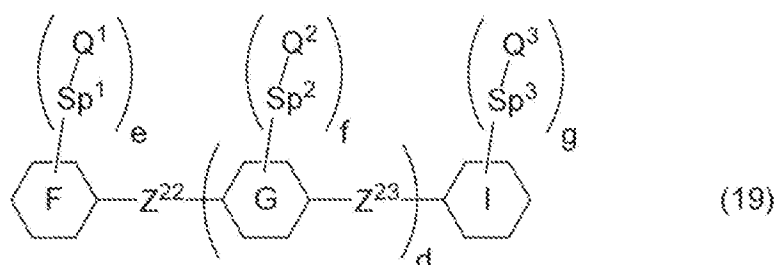
R^{11} および R^{12} は独立して炭素数１～１０のアルキル、炭素数１～１０のアルコキシ、炭素数２～１０のアルコキシアルキル、炭素数２～１０のアルケニルまたはジフルオロビニルであり；

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

Z^{11} 、 Z^{12} および Z^{13} は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、または $-COO-$ である。

[0018] 項１０． さらに下記一般式（１９）で表される重合性化合物を含有する、項４～９のいずれかに記載の液晶組成物。

[化19]



上記式（１９）中、

環 F および環 I は独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、１－ナフチル、２－ナフチル、テトラヒドロピラン－２－イル、１，３－ジオキサソ－２－イル、ピリミジン－２－イル、またはピリジン－２－イルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、独立して、ハロゲン、炭素数１～１２のアルキル、炭素数１～１２のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１～１２のアルキルで置き換えられてもよく；

環 G は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－１，２－ジイル、ナフタレン－１，３－ジイル、ナフタレン－１，４－ジイル、ナフタレン－１，５－ジイル、ナフタレ

ン-1, 6-ジイル、ナフタレン-1, 7-ジイル、ナフタレン-1, 8-ジイル、ナフタレン-2, 3-ジイル、ナフタレン-2, 6-ジイル、ナフタレン-2, 7-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサ-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、またはピリジン-2, 5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、独立して、ハロゲン、炭素数1~12のアルキル、炭素数1~12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1~12のアルキルで置き換えられてもよく；

Z^{22} および Z^{23} は独立して単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、この Z^{22} および Z^{23} において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、または $-COO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-C(CH_3)=CH-$ 、または $-C(CH_3)=C(CH_3)-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Q^1 、 Q^2 および Q^3 は独立して重合性基であり；

Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、この Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、独立して、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

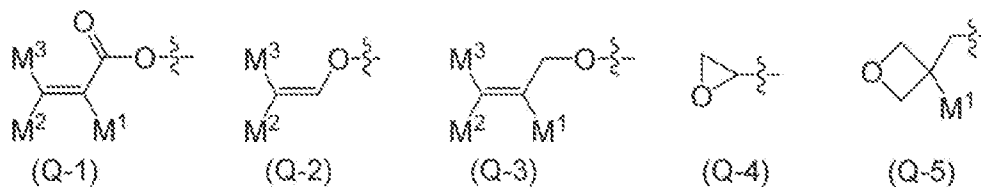
d は0、1、または2であり；

e 、 f 、および g は独立して0、1、2、3、または4であり、そして e 、 f 、および g の和は1以上である。

[0019] 項11. 上記一般式(19)において、 Q^1 、 Q^2 および Q^3 が独立して下記一般式($Q-1$)~($Q-5$)のいずれかで表される重合性基である、項1

0に記載の液晶組成物。

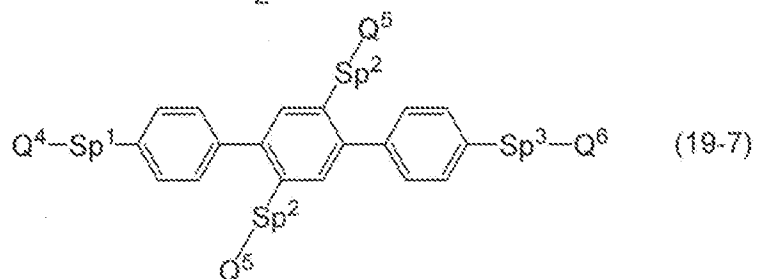
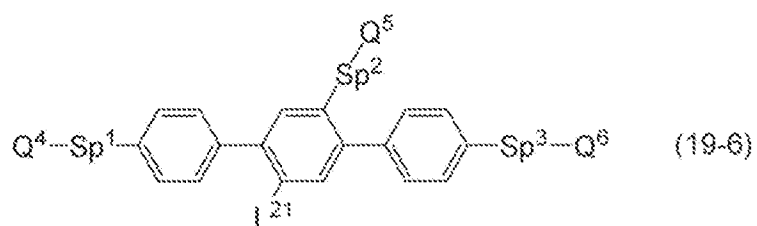
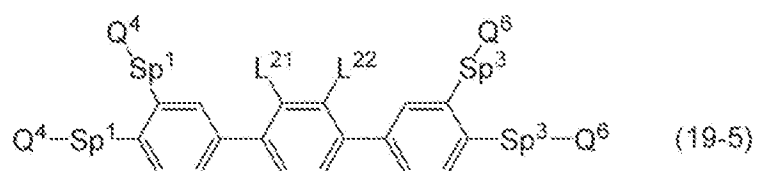
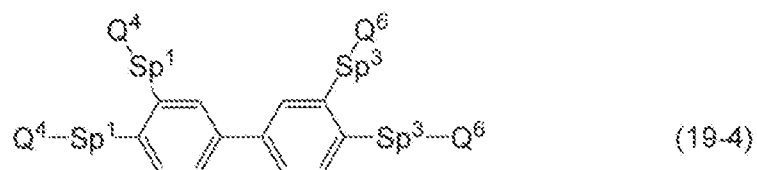
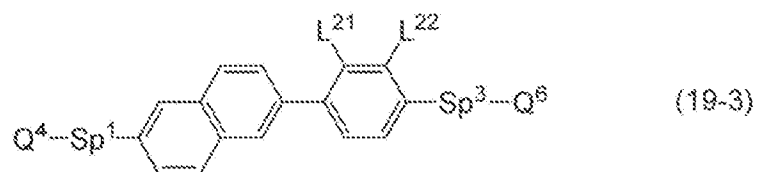
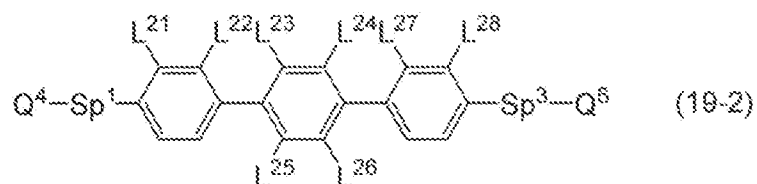
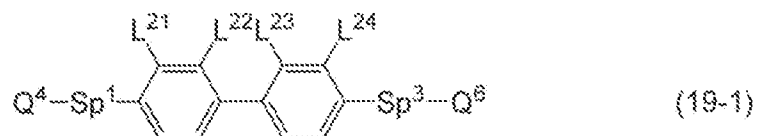
[化20]



上記式 (Q-1) ~ 式 (Q-5) において、M¹、M²およびM³は独立して、水素、フッ素、炭素数1~5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1~5のアルキルである。

[0020] 項12. 前記一般式(19)で表される重合性化合物が、下記一般式(19-1)~(19-7)のいずれかで表される重合性化合物である、項10に記載の液晶組成物。

[化21]



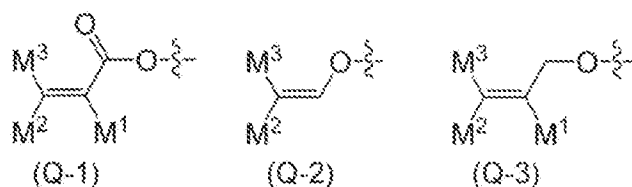
上記式(19-1)～式(19-7)中、

L²¹、L²²、L²³、L²⁴、L²⁵、L²⁶、L²⁷およびL²⁸は独立して、水素、フッ素、またはメチルであり；

$S p^1$ 、 $S p^2$ および $S p^3$ は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この $S p^1$ 、 $S p^2$ および $S p^3$ において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Q^4 、 Q^5 および Q^6 は独立して、下記一般式（Q-1）～式（Q-3）のいずれかで表される重合性基であり、ここで M^1 、 M^2 および M^3 は独立して、水素、フッ素、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルである。

[化22]



[0021] 項13. さらに、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤および消泡剤から選択される少なくとも1つを含有する、項4～12のいずれかに記載の液晶組成物。

発明の効果

[0022] 低分子の添加剤により液晶媒体をホモニアス配向させることができる技術はこれまでになく、本願発明の好ましい態様によれば特定の低分子極性化合物を添加するだけで液晶媒体をホモニアス配向させることができ、従来の液晶を配向させるための配向膜や配向処理を不要とすることができる。この結果、例えばFFSなどの横電界を用いるモードのポリイミドス化が可能となる。

図面の簡単な説明

[0023] [図1]実施例1の電圧－透過率曲線である。

発明を実施するための形態

[0024] この明細書における用語の使い方は次のとおりである。「液晶媒体」とは、液晶表示素子または装置に用いられる液晶または液晶性のものであり、以下に限定されるわけではないが、例えば液晶性化合物、液晶組成物、高分子液晶等である。「液晶組成物」および「液晶表示素子」の用語をそれぞれ「組成物」および「素子」と略すことがある。「液晶表示素子」は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。「液晶性化合物」は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物および液晶相を有しないが、ネマチック相の温度範囲、粘度、誘電率異方性のような特性を調節する目的で組成物に混合される化合物の総称である。この化合物は、例えば1, 4-シクロヘキシレンや1, 4-フェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状 (rod like) である。「重合性化合物」は、組成物中に重合体を生成させる目的で添加する化合物である。「低分子」とは、「高分子」でないものをいう。「高分子」とは、重合反応が可能な構造を持つ化合物が、重合反応によって生成したモノマー単位の繰り返し構造を持つものである。重合反応ではない反応で合成され、モノマー単位の繰り返し構造を待たない高分子量の化合物は低分子である。また、重合反応が可能な構造を持つ化合物であって、重合前の化合物は低分子である。

[0025] 液晶組成物は、複数の液晶性化合物を混合することによって調製される。液晶性化合物の割合（含有量）は、この液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。この液晶組成物に、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤、色素のような添加物が必要に応じて添加される。添加物の割合（添加量）は、液晶性化合物の割合と同様に、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。重量百万分率（ppm）が用いられることもある。重合開始剤および重合禁止剤の割合は、例外的に重合性化合物の重量に基づいて表される。

[0026] 例として式（X）で表される化合物は、式（X）で表される1つの化合物

、2つの化合物の混合物、または3つ以上の化合物の混合物を意味する。六角形で囲んだ B^1 、 C^1 、 F などの記号はそれぞれ環 B^1 、環 C^1 、環 F などに対応する。六角形は、シクロヘキサン環やベンゼン環のような六員環またはナフタレン環のような縮合環を表す。この六角形を横切る斜線は、環上の任意の水素が $-S p^1-Q^1$ などの基で置き換えられてもよいことを表す。 e などの添え字は、置き換えられた基の数を示す。添え字が0のとき、そのような置き換えはない。

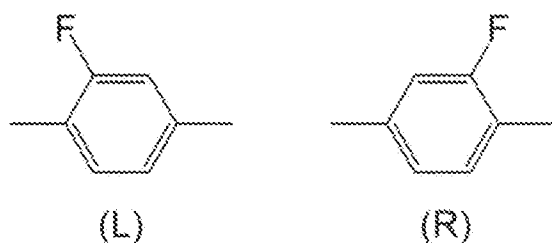
[0027] 末端基の記号（例えば R に上付き添え字）を複数の成分化合物に用いた。これらの化合物において、任意の2つの同記号の末端基が表す2つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。例えば、化合物（ Y ）の末端基がエチルであり、化合物（ Z ）の同記号の末端基がエチルであるケースがある。化合物（ Y ）の末端基がエチルであり、化合物（ Z ）の同記号の末端基がプロピルであるケースもある。このルールは、他の末端基、環、結合基などの記号にも適用される。式（8）において、 i が2のとき、2つの環 D^1 が存在する。この化合物において、2つの環 D^1 が表す2つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。このルールは、 i が2より大きいときの任意の2つの環 D^1 にも適用される。このルールは、他の環、結合基などの記号にも適用される。

[0028] 「少なくとも1つの‘ X ’」の表現は、‘ X ’の数は任意であることを意味する。「少なくとも1つの‘ X ’は、‘ Y ’で置き換えられてもよい」の表現は、‘ X ’の数が1つのとき、‘ X ’の位置は任意であり、‘ X ’の数が2つ以上のときも、それらの位置は制限なく選択できる。このルールは、「少なくとも1つの‘ X ’が、‘ Y ’で置き換えられた」の表現にも適用される。「少なくとも1つの X が、 Y 、 Z 、または W で置き換えられてもよい」という表現は、少なくとも1つの X が Y で置き換えられた場合、少なくとも1つの X が Z で置き換えられた場合、および少なくとも1つの X が W で置き換えられた場合、さらに複数の X が Y 、 Z 、 W の少なくとも2つで置き換えられた場合を含むことを意味する。例えば、少なくとも1つの $-CH_2-$ （

または、 $-(CH_2)_2-$ が $-O-$ （または、 $-CH=CH-$ ）で置き換えられてもよいアルキルには、アルキル、アルケニル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシアルケニル、アルケニルオキシアルキルが含まれる。なお、連続する2つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられて、 $-O-O-$ のようになることは好ましくない。液晶性化合物においては、アルキルなどにおいて、メチル部分（ $-CH_2-H$ ）の $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられて $-O-H$ になることは好ましくない。

[0029] ハロゲンハフ素、塩素、臭素、またはヨウ素を意味する。好ましいハロゲンハフ素は、フッ素または塩素である。さらに好ましいハロゲンハフ素はフッ素である。アルキルは、直鎖状または分岐状であり、断りがない限りは環状アルキルを含まない。直鎖状アルキルは、一般的に分岐状アルキルよりも好ましい。これらのことは、アルコキシ、アルケニルなどの末端基についても同様である。1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置は、ネマチック相の上限温度を上げるためにシスよりもトランスが好ましい。2-フルオロ-1, 4-フェニレンは、下記の2つの二価基を意味する。化学式において、フッ素は左向き（L）であってもよいし、右向き（R）であってもよい。このルールは、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイルのような、環から水素を2つ除くことによって生成した非対称な二価基にも適用される。

[化23]



[0030] 本発明は、配向処理または配向膜が施されておらず、かつ少なくとも一方に透明電極が形成された一对の基板の間に封入される液晶媒体であって、当該液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる低分子極性化合物を含有し、基板に対して自発的にホモジニアス配向する液晶媒体に関する。すなわ

ち、本発明は、基板に対して自発的にホモジニアス配向する液晶または液晶性のもの、例えば基板に対して自発的にホモジニアス配向する液晶性化合物、液晶組成物、高分子液晶等に関する。以下、本発明を構成する各要素について詳細に説明する。

[0031] 1. 低分子極性化合物

本発明の極性化合物は、液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる極性化合物であり、低分子である。ここで液晶セルは液晶媒体を配向させるための配向処理または配向膜を施していない2枚の基板（少なくとも一方の基板には透明電極が形成されている）とその間に挟持された液晶媒体とから構成され、液晶媒体に添加された極性化合物により当該液晶媒体は当該基板に対してホモジニアス配向する。ホモジニアス配向とは、液晶媒体が基板面と平行に配向することに加えて、基板面と平行な面内においても液晶媒体が配向していることを意味する。本発明の極性化合物の化学構造は好ましくは無極性基と極性基とから構成され、本発明は特定の原理に拘束されるわけではないが、当該極性基は基板や基板上に形成された電極と相互作用し、当該無極性基は液晶媒体と相互作用することで、液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させるものと考えられる。極性化合物は重合性基を有していてもよく、重合性基を有する極性化合物は液晶媒体を配向させると共に、紫外線照射等により重合および他の重合性化合物と共重合する。これによって、重合前の配向を安定化することができる。

[0032] 1. 1 低分子極性化合物の順相逆相C V積

順相逆相C V積とは、ある1つの分子内にどの程度の極性基および無極性基が存在しているかを数値化したものであり、より電氣的な偏りが大きい極性基およびより電氣的な偏りが小さい無極性基が共存した化学構造を有する化合物はこの値が大きくなり、分子全体が中性的な化学構造を有する化合物は低くなる。

[0033] 順相逆相C V積は、当該化合物を順相および逆相のTLCで展開し、それぞれのR_f値（試料の展開距離／移動層の展開距離）の逆数C V値（1／R

f) の積として測定される。順相の T L C で測定した際に R f 値が小さい化合物は極性基を有しており、逆相の T L C で測定した際に R f 値が小さい化合物は無極性基を有している。この 2 つの特性は 1 つの化合物で同時に満たされることもあり、どちらも満たさないこともある。標準の測定方法として、順相の T L C 測定では、メルク社製の T L C (シリカゲル 60 F 254) を用い、トルエンと酢酸エチルの混合溶媒 (容積比で 4 : 1) で展開させ、逆相の T L C 測定では、メルク社製の T L C (シリカゲル 60 R P - 18 F 254 s) を用い、メタノールで展開させる。

$$\text{順相逆相CV積} = 1 / R_f(p) \times 1 / R_f(n)$$

R f (p) : 順相での R f 値

R f (n) : 逆相での R f 値

[0034] 本発明の低分子極性化合物は 1.3 以上の順相逆相 C V 積を有することを特徴とし、好ましくは 1.3 ~ 50.0 の順相逆相 C V 積を有し、より好ましくは 1.4 ~ 15.0 の順相逆相 C V 積を有し、さらに好ましくは 1.5 ~ 6.0 の順相逆相 C V 積を有する。順相逆相 C V 積をこれらの範囲内にとすると、好ましい配向状態を得ることができ、添加量を抑制して液晶媒体の他の成分に由来する物性値に与える影響を小さくすることができ、またホモジニアス配向が得られる温度範囲等の条件範囲を広くすることができる。

[0035] 本発明の低分子極性化合物は、液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させることができればその構造は特に限定されないが、具体的な構造を以下に例示する。

[0036] 1.2 一般式 (1) で表される低分子極性化合物。

[化24]



上記式 (1) 中、M は炭素数 1 以上の無極性基であり、P は極性基である。

。

[0037] 上記一般式 (1) において、M は好ましくは炭素数 1 ~ 50 の無極性基で

あり、より好ましくは炭素数3～35の無極性基であり、さらに好ましくは炭素数4～25の無極性基であり、アルキル鎖、シクロヘキシレンおよびフェニレンなどを組み合わせた基であることが特に好ましい。

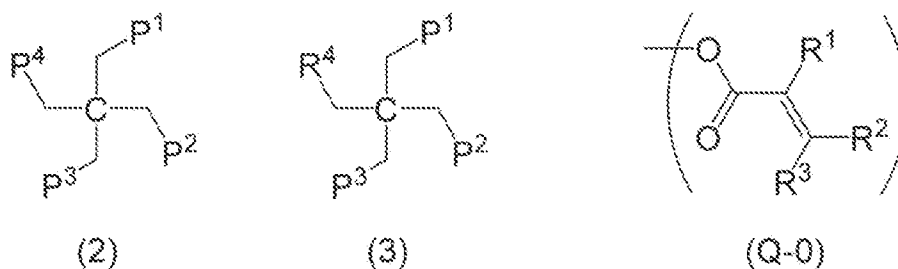
[0038] 上記一般式(1)において、Pは、好ましくは、独立して炭素数1～25の直鎖状、分岐状または環状のアルキルであり、このPにおいて、少なくとも1つの隣接していない $\text{—CH}_2\text{—}$ は、独立して、N、Oおよび／またはS原子が互いに直接連結しないようにして、 $\text{—N(—P}^0\text{)—}$ 、 —O— 、 —S— 、 —CO— 、 —CO—O— 、 —O—CO— または —O—CO—O— で置き換えられてもよく、少なくとも1つの第3級炭素(CH基)はNで置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素は独立してFまたはClで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $\text{—(CH}_2\text{)}_2\text{—}$ は独立して —CH=CH— または $\text{—C}\equiv\text{C—}$ で置き換えられてもよく、ただしPはN、Sおよび／またはOより選択される1個以上のヘテロ原子を含有する。Pは、より好ましくは、水酸基、アミノ基、カルボキシル基、スルホン基、エステル結合、アクリレート、メタクリレートなどである。

[0039] なお、「 $\text{—N(—P}^0\text{)—}$ 」における P^0 は、独立して炭素数1～25の直鎖状、分岐状または環状のアルキルであり、この P^0 において、少なくとも1つの隣接していない $\text{—CH}_2\text{—}$ は、独立して、N、Oおよび／またはS原子が互いに直接連結しないようにして、 $\text{—N(—P}^0\text{)—}$ 、 —O— 、 —S— 、 —CO— 、 —CO—O— 、 —O—CO— または —O—CO—O— で置き換えられてもよく、少なくとも1つの第3級炭素(CH基)はNで置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素は独立してFまたはClで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $\text{—(CH}_2\text{)}_2\text{—}$ は独立して —CH=CH— または $\text{—C}\equiv\text{C—}$ で置き換えられてもよく、ただし、 P^0 はN、Sおよび／またはOより選択される1個以上のヘテロ原子を含有する。

[0040] 1. 3 一般式(2)または(3)で表される低分子極性化合物

上記一般式(1)の極性化合物の中でも以下の一般式(2)または(3)の極性化合物が好ましい。

[化25]



[0041] 上記式(2)および式(3)中、

R^4 は水素、ハロゲンまたは炭素数1～20のアルキルであり、この R^4 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は独立して $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、

P^1 、 P^2 、 P^3 および P^4 は、独立して、上記一般式(Q-0)で表される基、または、炭素数1～25の直鎖状、分岐状または環状のアルキルであり、この P^1 、 P^2 、 P^3 および P^4 において、少なくとも1つの隣接していない $-CH_2-$ は、独立して、N、Oおよび／またはS原子が互いに直接連結しないようにして、 $-N(-P^0)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ または $-O-CO-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの第3級炭素(CH基)はNで置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素は独立してFまたはClで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、ただし、 P^1 、 P^2 、 P^3 および P^4 はN、Sおよび／またはOより選択される1個以上のヘテロ原子を含有し、

P^0 は、独立して炭素数1～25の直鎖状、分岐状または環状のアルキルであり、この P^0 において、少なくとも1つの隣接していない $-CH_2-$ は、独立して、N、Oおよび／またはS原子が互いに直接連結しないようにして、 $-N(-P^0)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ または $-O-CO-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの第3級

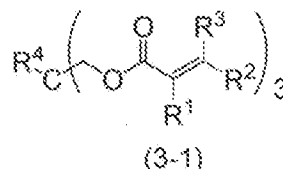
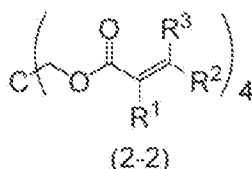
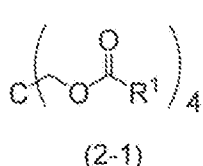
炭素（CH基）はNで置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素は独立してFまたはClで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、ただし、 P^0 はN、Sおよび／またはOより選択される1個以上のヘテロ原子を含有し、

上記式（Q-O）中、 R^1 、 R^2 および R^3 は、独立して、水素、ハロゲンまたは炭素数1～20のアルキルであり、この R^1 、 R^2 および R^3 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は独立して $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[0042] 上記式（2）における $P^1\sim P^4$ 、上記式（3）における $P^1\sim P^3$ は、好ましくは、アクリレートまたはメタクリレートであり、上記式（3）における R^1 は、好ましくはアルキル、炭素数1～30のアルキル、炭素数1～20のアルキル、炭素数2～10のアルキルである。

[0043] 上記式（2）または（3）の極性化合物の中でも以下の化学構造を有する極性化合物が好ましい。

[化26]



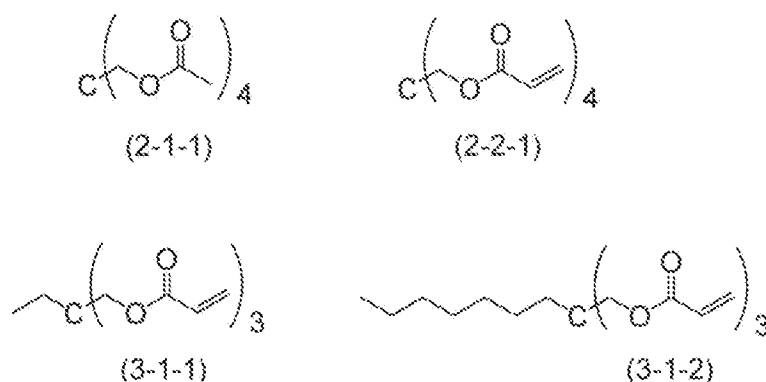
上記一般式（2-1）における R^1 は炭素数1～4の直鎖状または環状のアルキルであり；

上記一般式（2-2）および式（3-1）における R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は、独立して、水素、ハロゲンまたは炭素数1～20のアルキルであり、この R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は独立して $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$

$_2$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[0044] さらに好ましくは以下の化学構造を有する極性化合物である。

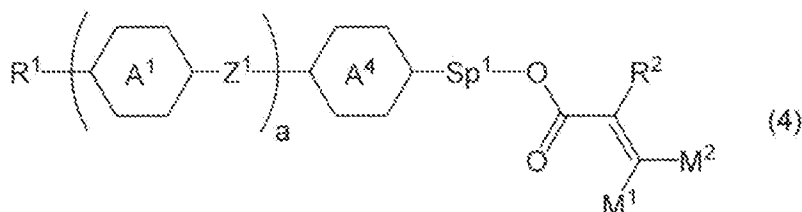
[化27]



[0045] 1. 4 一般式 (4) で表される低分子極性化合物

上記一般式 (1) の極性化合物の中でも以下の一般式 (4) の極性化合物が好ましい。

[化28]



[0046] 上記式 (4) 中、

R^1 は炭素数1～15のアルキルであり、この R^1 において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は独立して $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環 A^1 および環 A^4 は、独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフ

タレン-2, 6-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、フルオレン-2, 7-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、アントラセン-2, 6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、または2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、独立して、フッ素、塩素、炭素数1~12のアルキル、炭素数2~12のアルケニル、炭素数1~11のアルコキシ、または炭素数2~11のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z¹は単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、このZ¹において、少なくとも1つの-CH₂-は、独立して、-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は独立して-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

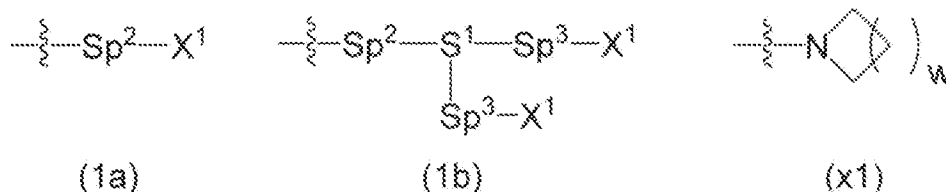
S p¹は単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、このS p¹において、少なくとも1つの-CH₂-は、独立して、-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は独立して-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

M¹およびM²は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1~5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1~5のアルキルであり；

aは0、1、2、3、または4であり；

R^2 は、下記一般式（1 a）または一般式（1 b）で表される基であり：

[化29]



上記式（1 a）および式（1 b）中、

Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも1つの $\text{---CH}_2\text{---}$ は、独立して、 ---O--- 、 ---NH--- 、 ---CO--- 、 ---COO--- 、 ---OCO--- 、または ---OOCO--- で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $\text{---(CH}_2)_2\text{---}$ は独立して ---CH=CH--- または $\text{---C}\equiv\text{C---}$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

S^1 は、 >CH--- または >N--- であり；

X^1 は、独立して、 ---OH 、 ---NH_2 、 ---OR^3 、 $\text{---N(R}^3)_2$ 、上記一般式（x1）で表される基、 ---COOH 、 ---SH 、 ---B(OH)_2 、または $\text{---Si(R}^3)_3$ で表される基であり、ここで R^3 は水素または炭素数1～10のアルキルであり、この R^3 において、少なくとも1つの $\text{---CH}_2\text{---}$ は ---O--- で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $\text{---(CH}_2)_2\text{---}$ は ---CH=CH--- で置き換えられてもよく、 X^1 において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、上記一般式（x1）中の w は1、2、3または4である。

[0047] 式（4）中、好ましい環 A^1 または環 A^4 は、1，4-シクロヘキシレン、1，4-フェニレン、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3，17-ジイル、または2，3，4，7，8，9，10，11，12，13，14，15，16，17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3，17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素はフッ素、または炭素数1から5のアルキルで置き換えられてもよい。さらに好ましい環 A^1 または環 A^4 は、1，4-シクロヘキシレン、1，4-フ

エニレン、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、例えば、1-メチル-1, 4-シクロヘキシレン、2-エチル-1, 4-シクロヘキシレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレンのように、少なくとも1つの水素はフッ素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。

[0048] 式(4)中、好ましい Z^1 は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ である。さらに好ましい Z^1 は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ である。特に好ましい Z^1 は、単結合である。

[0049] 式(4)中、好ましい Sp^1 は、単結合、炭素数1~5のアルキレン、または1つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数1~5のアルキレンである。さらに好ましい Sp^1 は、単結合、炭素数1~3のアルキレン、または1つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数1~3のアルキレンである。

[0050] 式(4)中、好ましい M^1 または M^2 は、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルである。さらに好ましい M^1 または M^2 は水素である。

[0051] 式(4)中、好ましい a は、0、1、2、または3である。さらに好ましい a は、0、1、または2である。

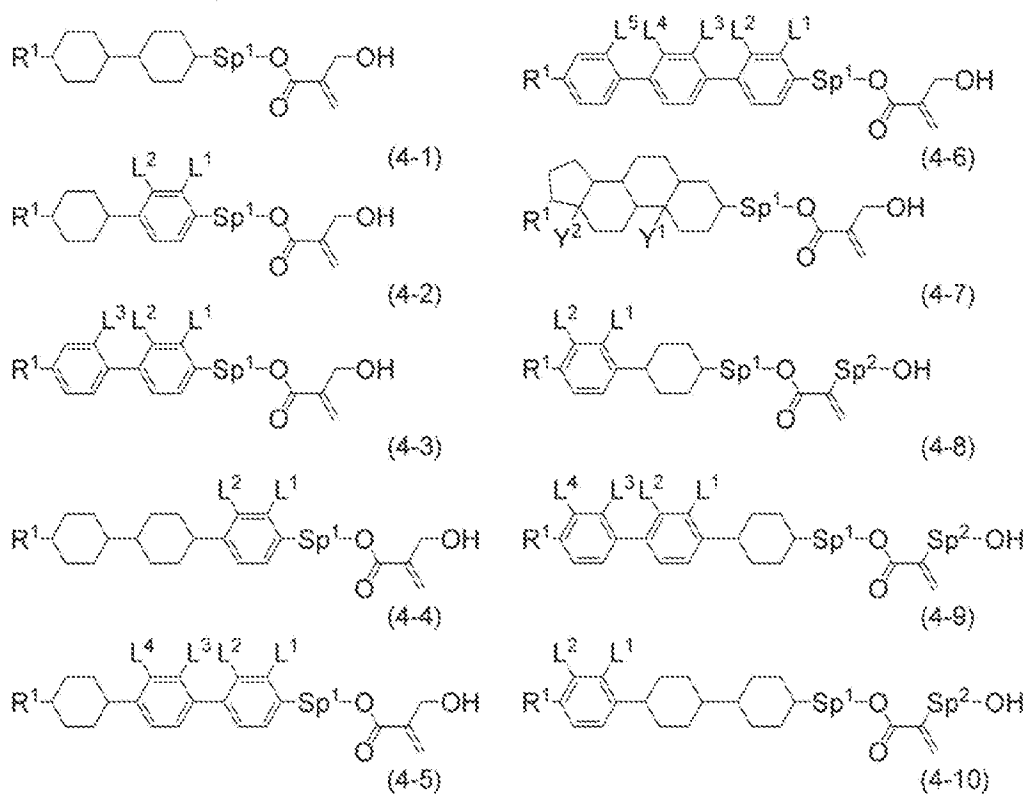
[0052] 式(1a)および式(1b)中、好ましい Sp^2 または Sp^3 は、炭素数1~7のアルキレン、または1つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数1~5のアルキレンである。さらに好ましい Sp^2 または Sp^3 は、炭素数1~5のアルキレン、または1つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数1~5のアルキレンである。特に好ましい Sp^2 または Sp^3 は、 $-CH_2-$ である。

[0053] 式(1a)および式(1b)中、好ましい X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、一般式(x1)で表される基、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は水素または炭素数1~5のアルキルであり

、この R^3 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく、上記一般式(×1)における w は1、2、3または4である。さらに好ましい X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ である。特に好ましい X^1 は $-OH$ である。

[0054] 一般式(4)のより具体的な極性化合物として以下が挙げられる。

[化30]



[0055] 式(4-1)～式(4-10)中、

R^1 は、炭素数1～10のアルキルであり；

Sp^1 は単結合または炭素数1～5のアルキレンであり、この Sp^1 において少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

Sp^2 は炭素数1～5のアルキレンであり、この Sp^2 において少なくとも

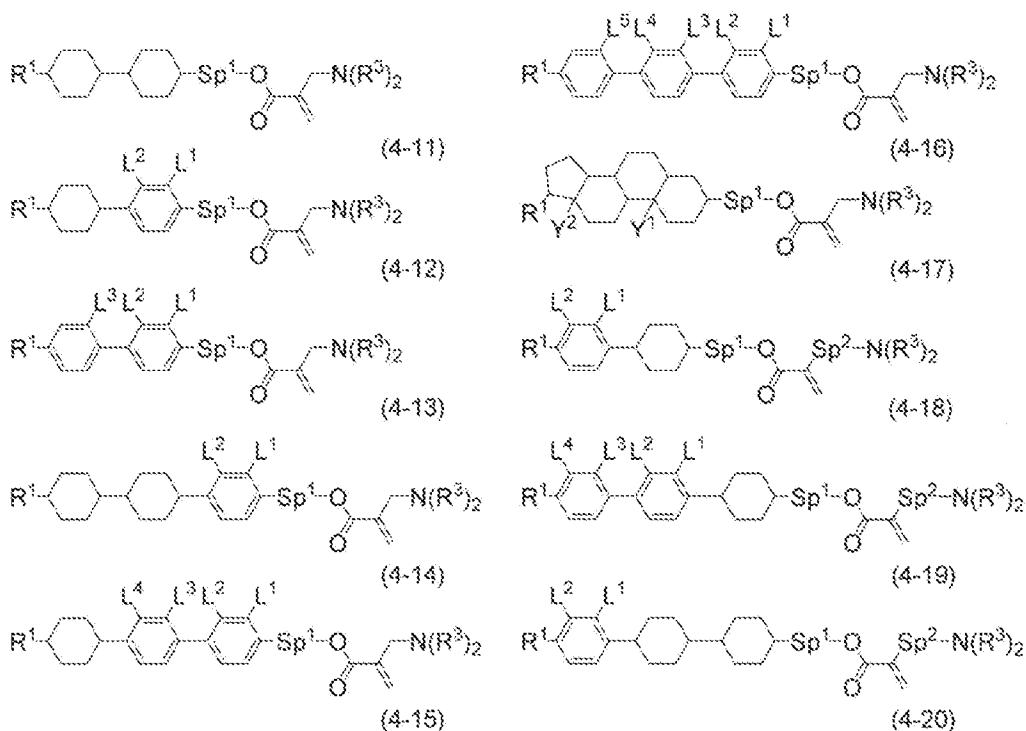
1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 および L^5 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Y^1 および Y^2 は独立して水素またはメチルである。

[0056] 一般式(4)のより具体的な極性化合物として以下が挙げられる。

[化31]



[0057] 式(4-11)～式(4-20)中、

R^1 は、炭素数1～10のアルキルであり；

Sp^1 は単結合または炭素数1～5のアルキレンであり、この Sp^1 において少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

Sp^2 は炭素数1～5のアルキレンであり、この Sp^2 において少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

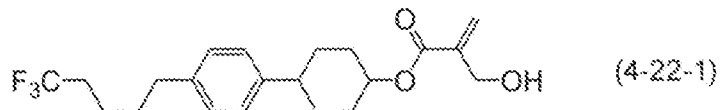
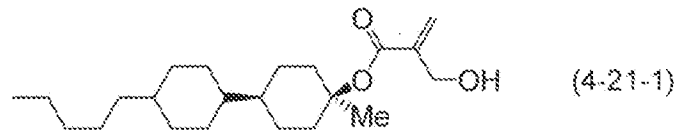
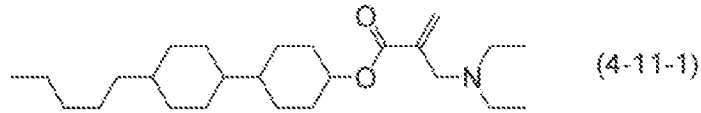
L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 および L^5 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Y^1 および Y^2 は独立して水素またはメチルであり；

R³は、水素、メチルまたはエチルである。

[0058] さらに好ましくは以下の化学構造を有する極性化合物である。

[化32]



[0059] 1. 5 低分子極性化合物の合成

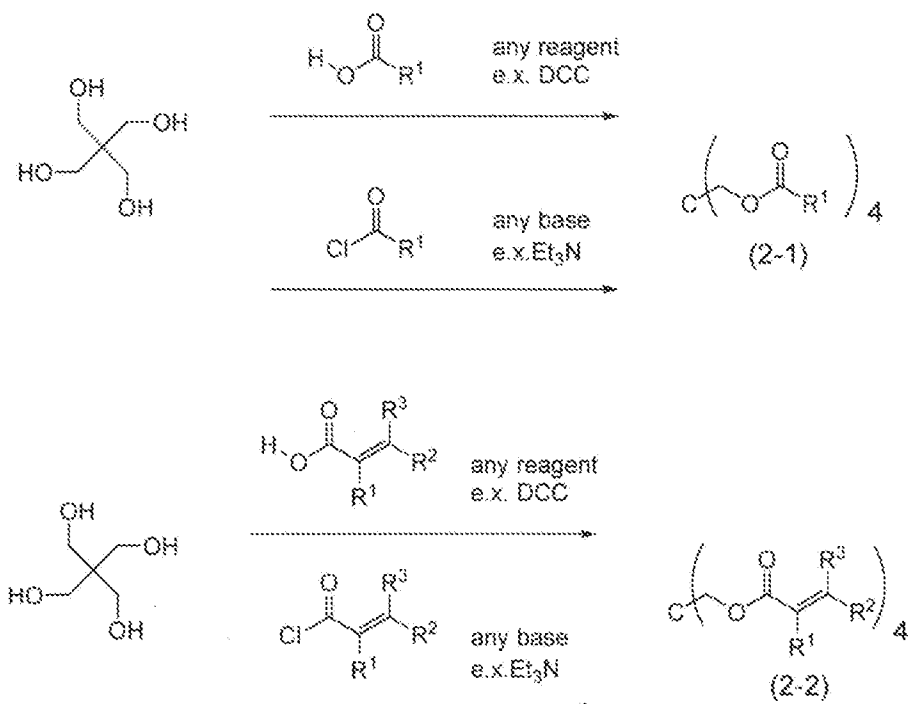
上記一般式（１）で表される極性化合物、一般式（２）および（３）で表される極性化合物は無極性基と極性基との結合体であり、当業者に公知の有機合成の知見を利用すれば容易に合成することができる。

[0060] 一般式（２）の低分子極性化合物

一般式（２）の極性化合物に分類される例えば上記一般式（２－１）の極性化合物や上記一般式（２－２）の極性化合物を合成する方法としては、以下のように、ペンタエリトリールに任意のカルボン酸または酸クロライドをエステル化させることにより合成することができる。

[0061]

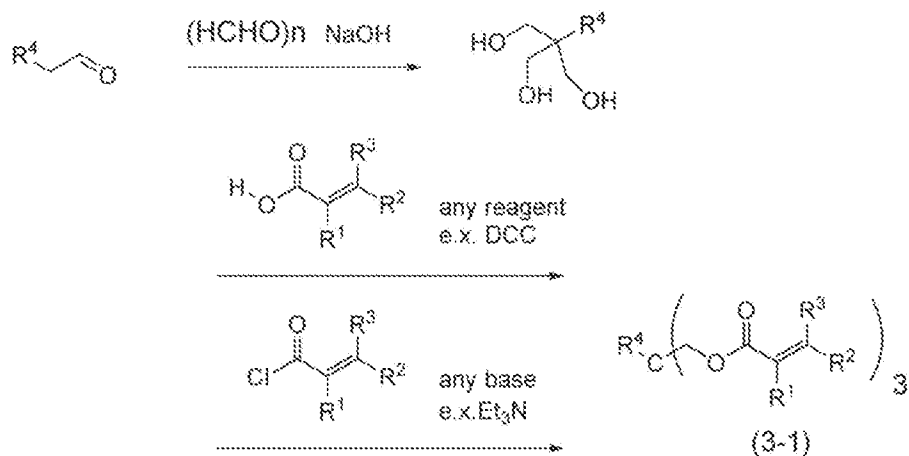
[化33]



[0062] 一般式 (3) の低分子極性化合物

また、一般式（３）の極性化合物に分類される例えば上記一般式（３－１）の極性化合物を合成する方法としては、以下のように、任意のアルデヒドにパラホルムアルデヒドを塩基性条件化で反応させトリオールを合成し、さらに任意のカルボン酸または酸クロライドをエステル化させることにより合成することができる。

[0063] [化34]



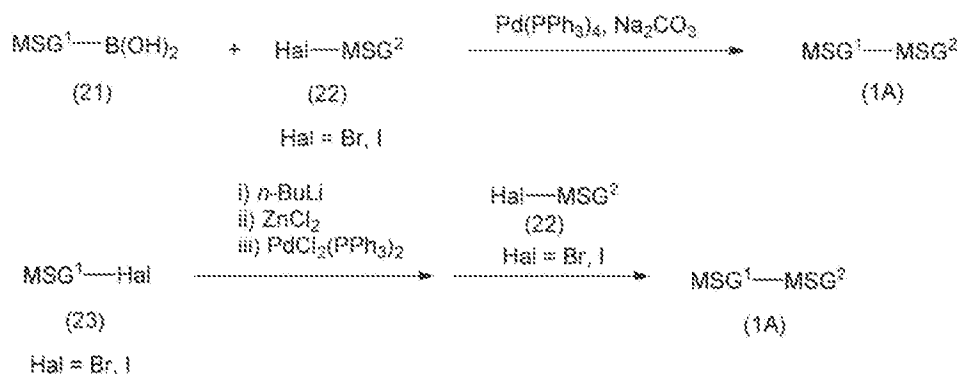
[0064] 一般式（４）の低分子極性化合物

上記一般式（４）で表される極性化合物も無極性基と極性基との結合体であり、当業者に公知の有機合成の知見を利用すれば容易に合成することができる。

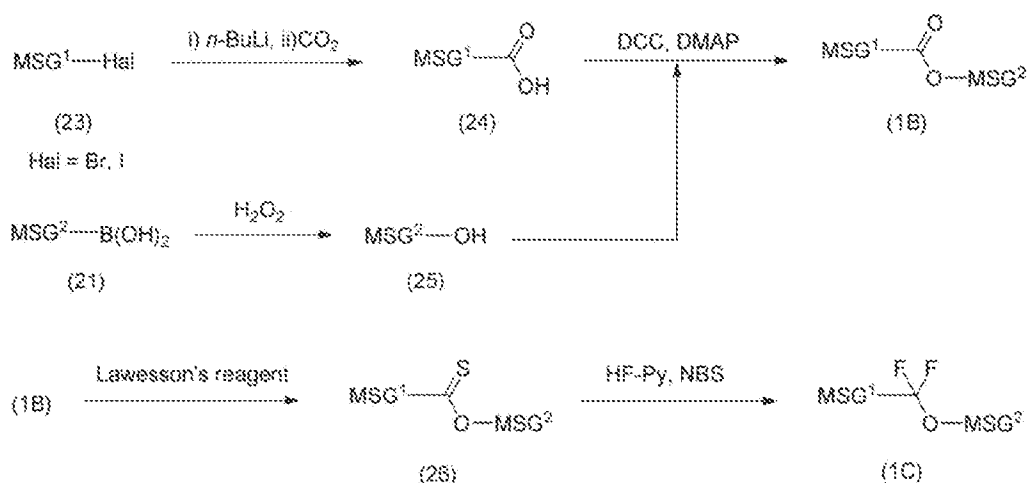
[0065] 結合基の生成

化合物（４）における結合基を生成する方法の例は、下記のスキームのとおりである。このスキームにおいて、MSG¹（またはMSG²）は、少なくとも１つの環を有する一価の有機基である。複数のMSG¹（またはMSG²）が表す一価の有機基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。化合物（１Ａ）から（１Ｇ）は、化合物（４）または化合物（４）の中間体に相当する。

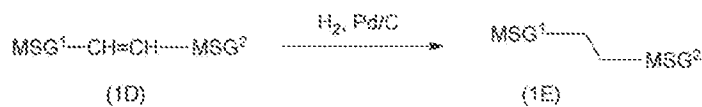
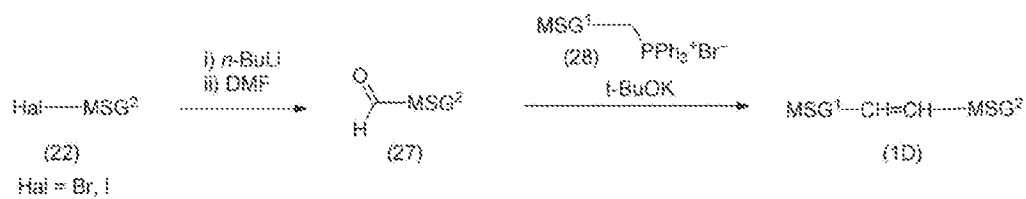
[0066] [化35]



[0067] [化36]



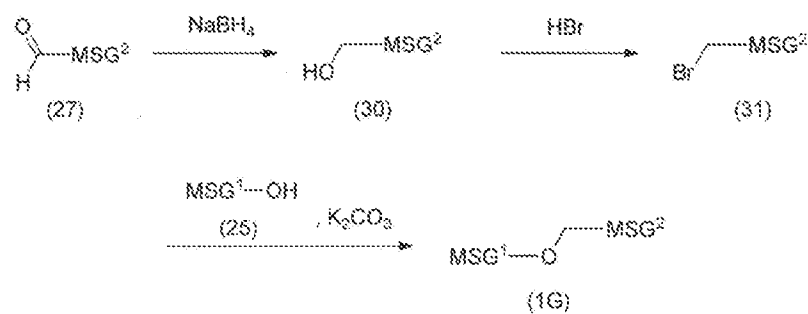
[0068] [化37]



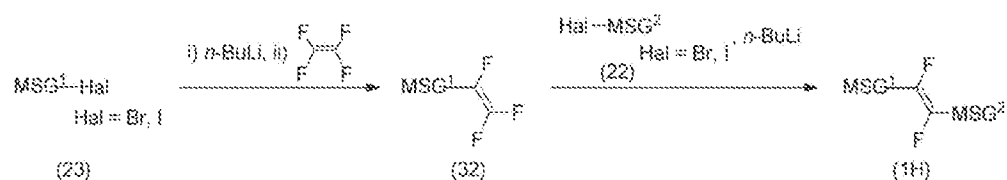
[0069] [化38]



[0070] [化39]



[0071] [化40]



[0072] (I) 単結合の生成

アリールホウ酸(21)と化合物(22)を、炭酸塩、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム触媒の存在下で反応させ、化合物(1A)

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

[0073] （ⅠⅠ）－ＣＯＯ－と－ＯＣＯ－の生成

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

[0074] （ⅠⅠⅠ）－ＣＦ₂Ｏ－と－ＯＣＦ₂－の生成

化合物（１Ｂ）をローソン試薬で硫黄化し、化合物（２６）を得る。化合物（２６）をフッ化水素ピリジン錯体とＮＢＳ（Ｎ－ブロモスクシンイミド）でフッ素化し、－ＣＦ₂Ｏ－を有する化合物（１Ｃ）を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827.を参照。化合物（１Ｃ）は化合物（２６）をＤＡＳＴ（（ジエチルアミノ）サルファートリフルオリド）でフッ素化しても合成される。W. H. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768.を参照。この方法によって－ＯＣＦ₂－を有する化合物も合成する。

[0075] （ⅠⅤ）－ＣＨ＝ＣＨ－の生成

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

[0076] （Ⅴ）－（ＣＨ₂）₂－の生成

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

[0077] (V I) $-\text{C}\equiv\text{C}-$ の生成

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

[0078] (V I I) $-\text{CH}_2\text{O}-$ と $-\text{OCH}_2-$ の生成

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

[0079] (V I I I) $-\text{CF}=\text{CF}-$ の生成

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

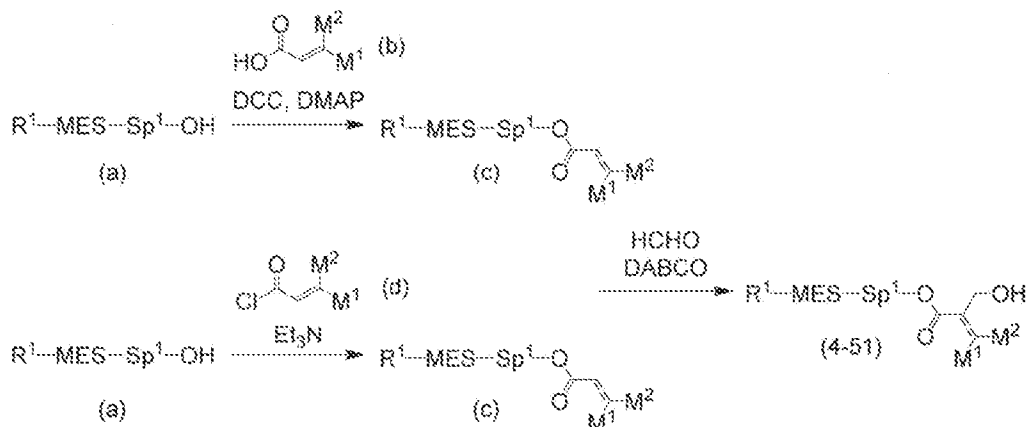
[0080] 環A¹および環A²の生成

1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、2-メチル-1, 4-フェニレン、2-エチル-1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3, 17-ジイル、2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3, 17-ジイルなどの環に関しては出発物が市販されているか、または合成法がよく知られている。

[0081] 一般式(4)の極性化合物に分類される具体的な化学構造を有する化合物を合成する他の方法は、次のとおりである。以下の合成方法の説明において、 R^1 、 M^1 および M^2 の定義は前記と同一である。なお「MES」は、一般式(4)中の A^1 、 Z^1 および A^4 から構成される部位を示す。

[0082] 一般式(4)中の R^2 が $-CH_2-OH$ である化合物(4-51)は、以下の方法で合成できる。化合物(a)と化合物(b)を、N,N'-ジシクロヘキシルカルボジイミド(DCC)およびN,N-ジメチル-4-アミノピリジン(DMAP)の存在下で反応させ、化合物(c)を得る。化合物(c)とHCHO(ホルムアルデヒド)を、DABCO(1,4-ジアザビスクロ[2.2.2]オクタン)の存在下で反応させる事によって、化合物(4-51)へと導く事ができる。なお、化合物(c)は、化合物(a)と化合物(d)をトリエチルアミンなどの塩基の存在下で反応させる事によっても合成できる。

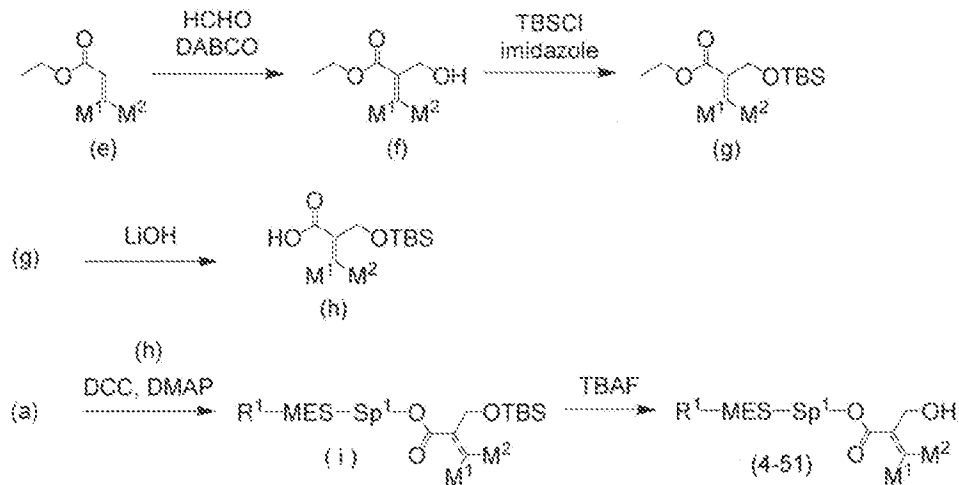
[0083] [化41]



[0084] 化合物(4-51)は、以下の方法でも合成できる。化合物(e)とホルムアルデヒドを、DABCOの存在下で反応させ、化合物(f)を得る。次にt-ブチルジメチルシリルクロリド(TBSCl)とイミダゾールを作用させて化合物(g)を得た後、水酸化リチウムなどの塩基で加水分解させて化合物(h)を得る。化合物(a)と化合物(h)をDCCおよびDMAPの存在下で反応させ、化合物(i)を得た後、TBAF(テトラブチルアン

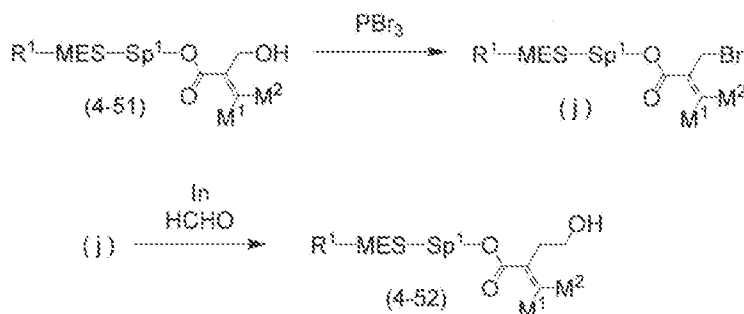
モニウムフルオリド)を用いて脱保護させる事により、化合物(4-51)へと導く事ができる。

[0085] [化42]



[0086] 一般式(4)中の R^2 が $-(CH_2)_2-OH$ である化合物(4-52)は、以下の方法で合成できる。化合物(4-51)に三臭化リンを作用させて、化合物(j)を得る。次に化合物(j)にインジウムを作用させた後、ホルムアルデヒドと反応させる事によって、化合物(4-52)へと導く事ができる。

[0087] [化43]



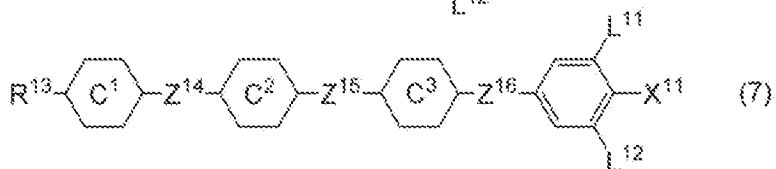
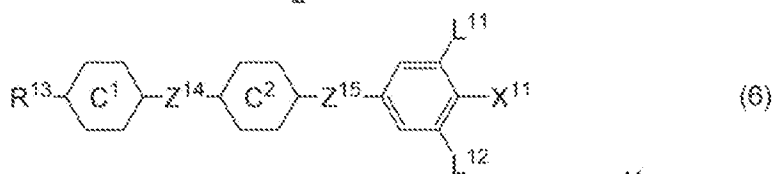
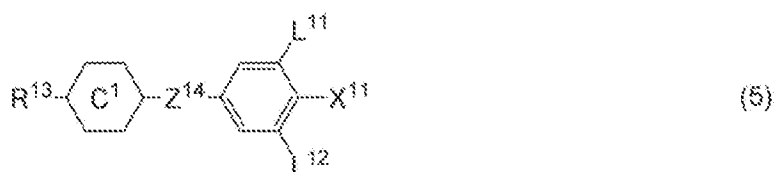
[0088] 2. 液晶性化合物

本発明で使用する好ましい一般式(5)~(8)、(16)~(18)のいずれかで表される液晶性化合物を以下に説明する。これらの化合物を適切に組み合わせることによって、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、

適切な光学異方性、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数などの特性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を調製することができる。必要に応じて、これらの化合物とは異なる液晶性化合物を添加してもよい。

[0089] 2. 1 下記一般式 (5) ~ (7) の液晶性化合物

[化44]



[0090] 上記式 (5) ~ 式 (7) 中、

R^{13} は炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり、この R^{13} において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{11} は、フッ素、塩素、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、または $-OCF_2CHF_2CF_3$ であり；

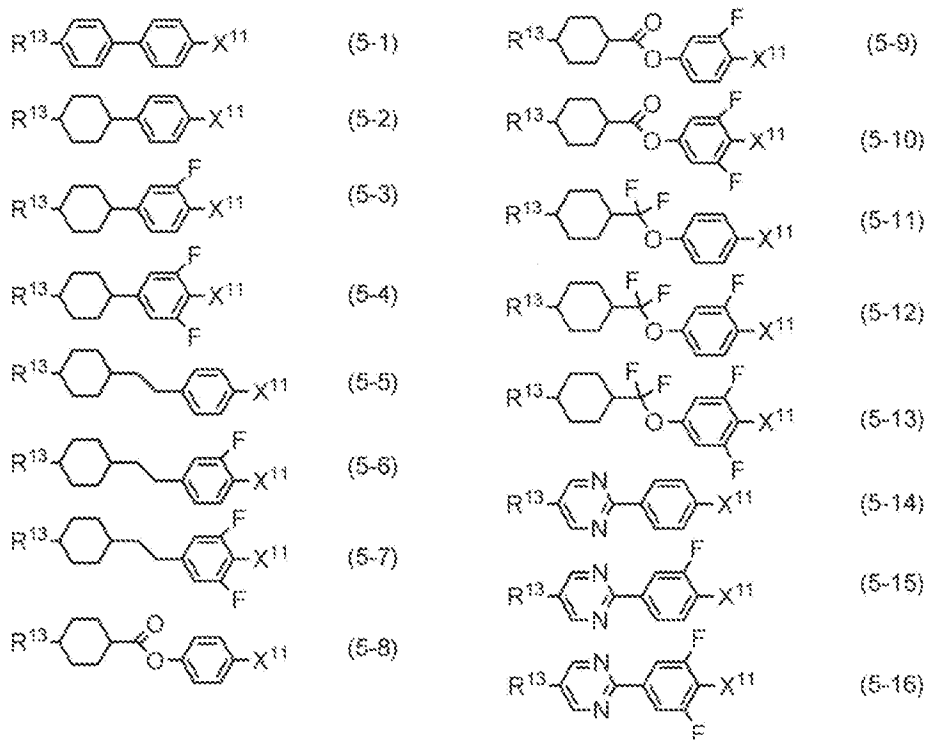
環 C^1 、環 C^2 および環 C^3 は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1, 4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、またはピリミジン-2, 5-ジイルであり；

Z^{14} 、 Z^{15} および Z^{16} は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、または $-(CH_2)_4-$ であり；

L¹¹およびL¹²は独立して水素またはフッ素である。

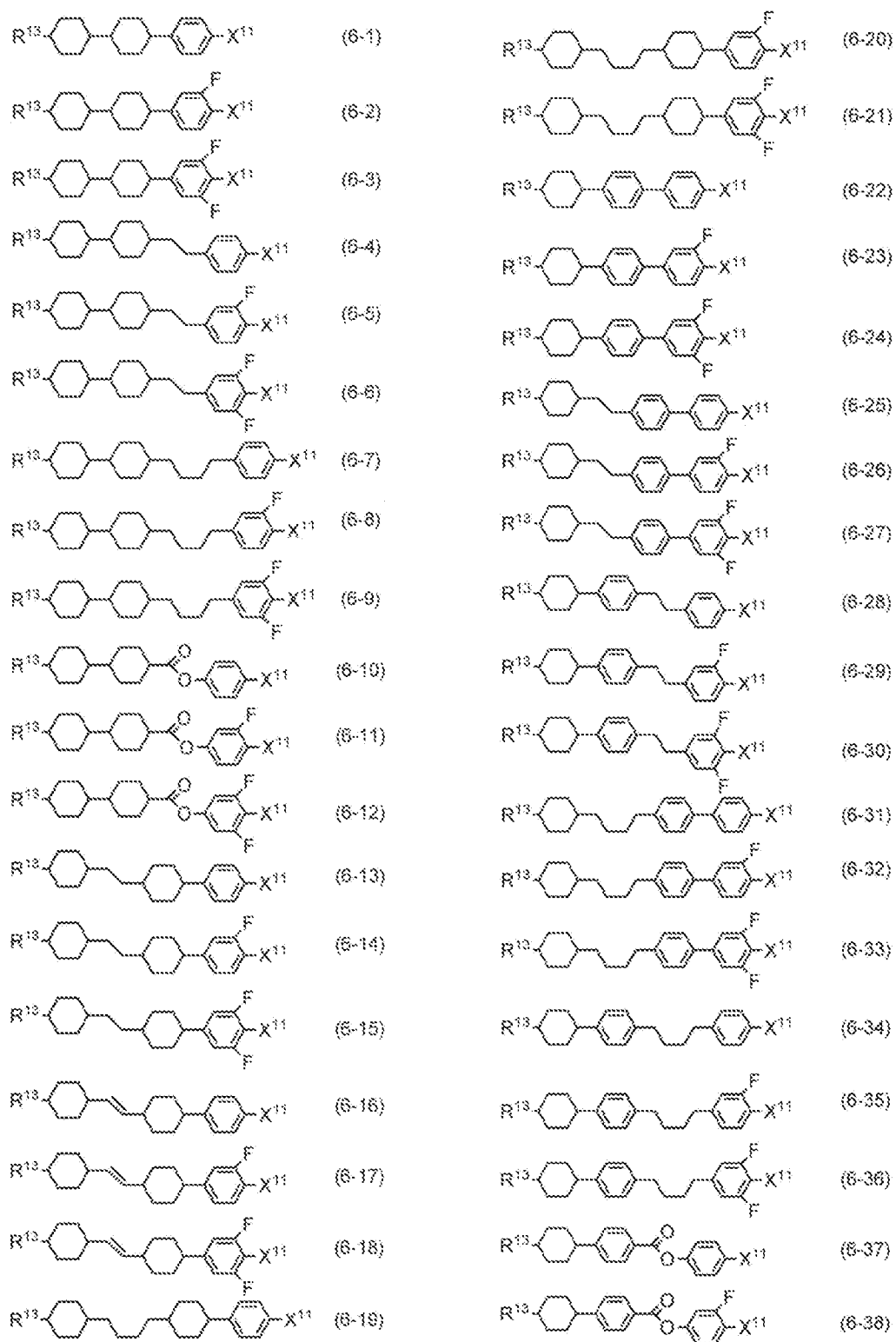
[0091] 式(5)～(7)の液晶性化合物は、右末端にハロゲンまたはフッ素含有基を有する化合物である。好ましい例として、化合物(5-1)～(5-16)、化合物(6-1)～(6-113)、化合物(7-1)～(7-57)を挙げることができる。これらの式において、R¹³およびX¹¹は式(5)～(7)と同一の定義である。

[0092] [化45]



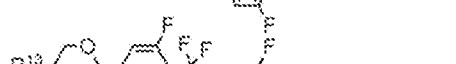
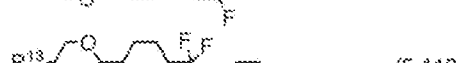
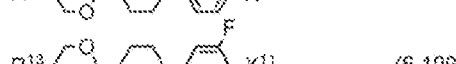
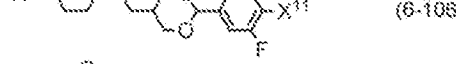
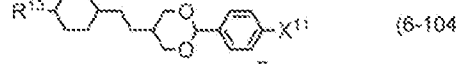
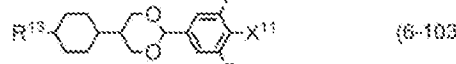
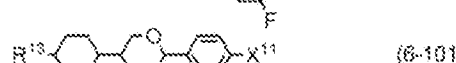
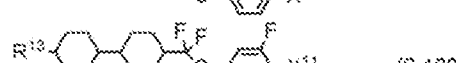
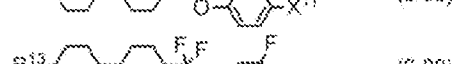
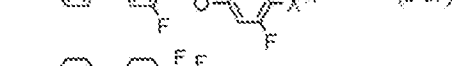
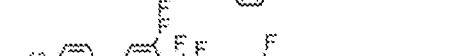
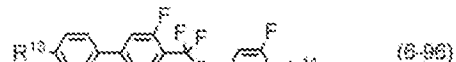
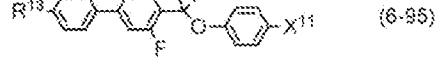
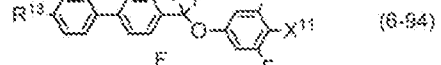
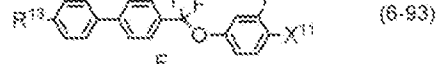
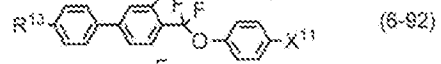
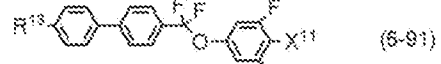
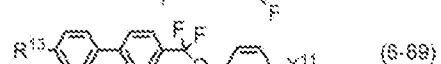
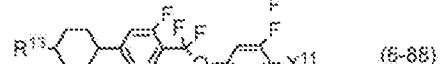
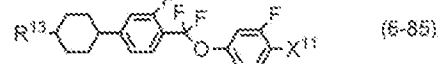
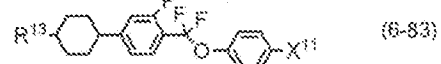
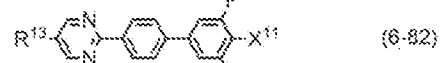
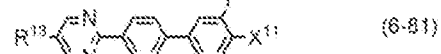
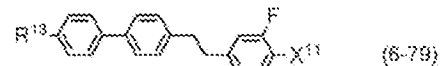
[0093]

[化46]



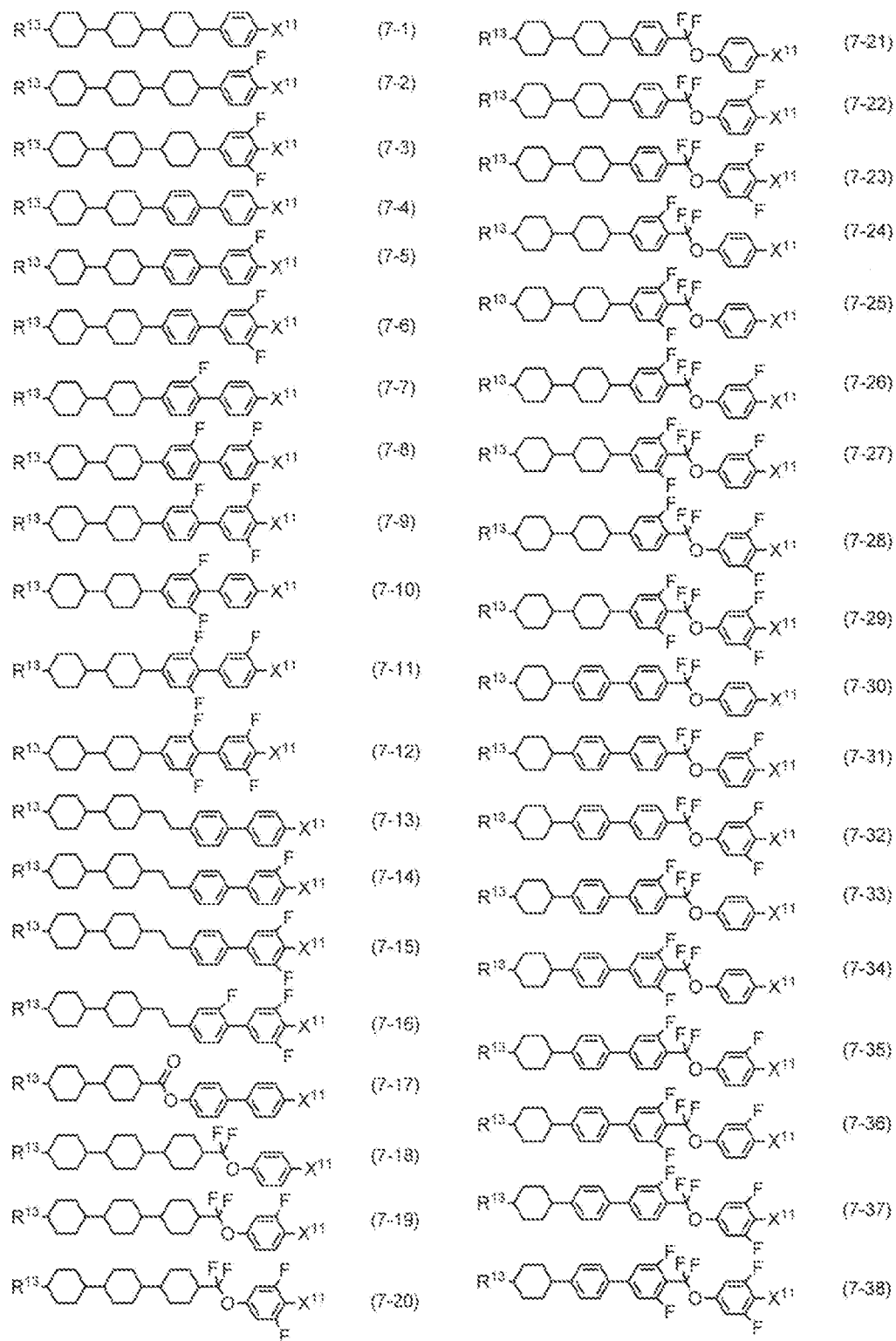
[0094]

[化48]



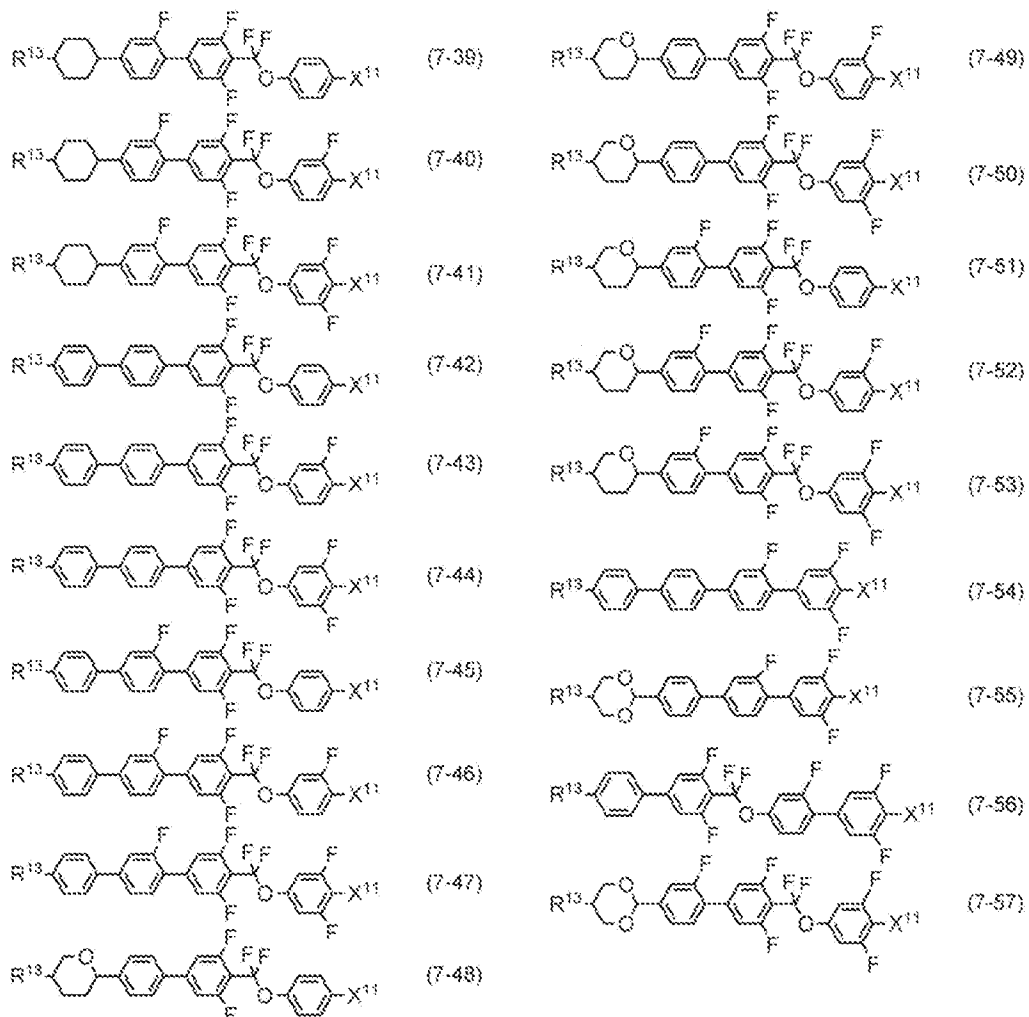
[0096]

[化49]



[0097]

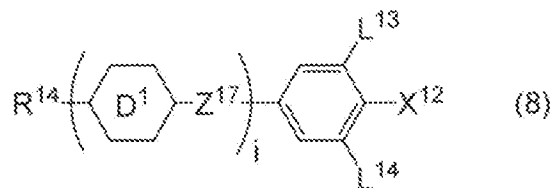
[化50]



[0098] 式(5)～(7)の液晶性化合物は、誘電率異方性が正であり、熱、光などに対する安定性が非常に優れているので、IPS、FFS、OCBなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。これらの化合物の含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1～99重量%の範囲が適しており、好ましくは10～97重量%の範囲、さらに好ましくは40～95重量%の範囲である。これらの化合物を誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、その含有量は液晶組成物の重量に基づいて30重量%以下が好ましい。これらの化合物を添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

[0099] 2. 2 下記一般式(8)で表される液晶性化合物

[化51]



[0100] 上記式(8)中、

R^{14} は炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、この R^{14} において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{12} は $-C \equiv N$ または $-C \equiv C - C \equiv N$ であり；

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

Z^{17} は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

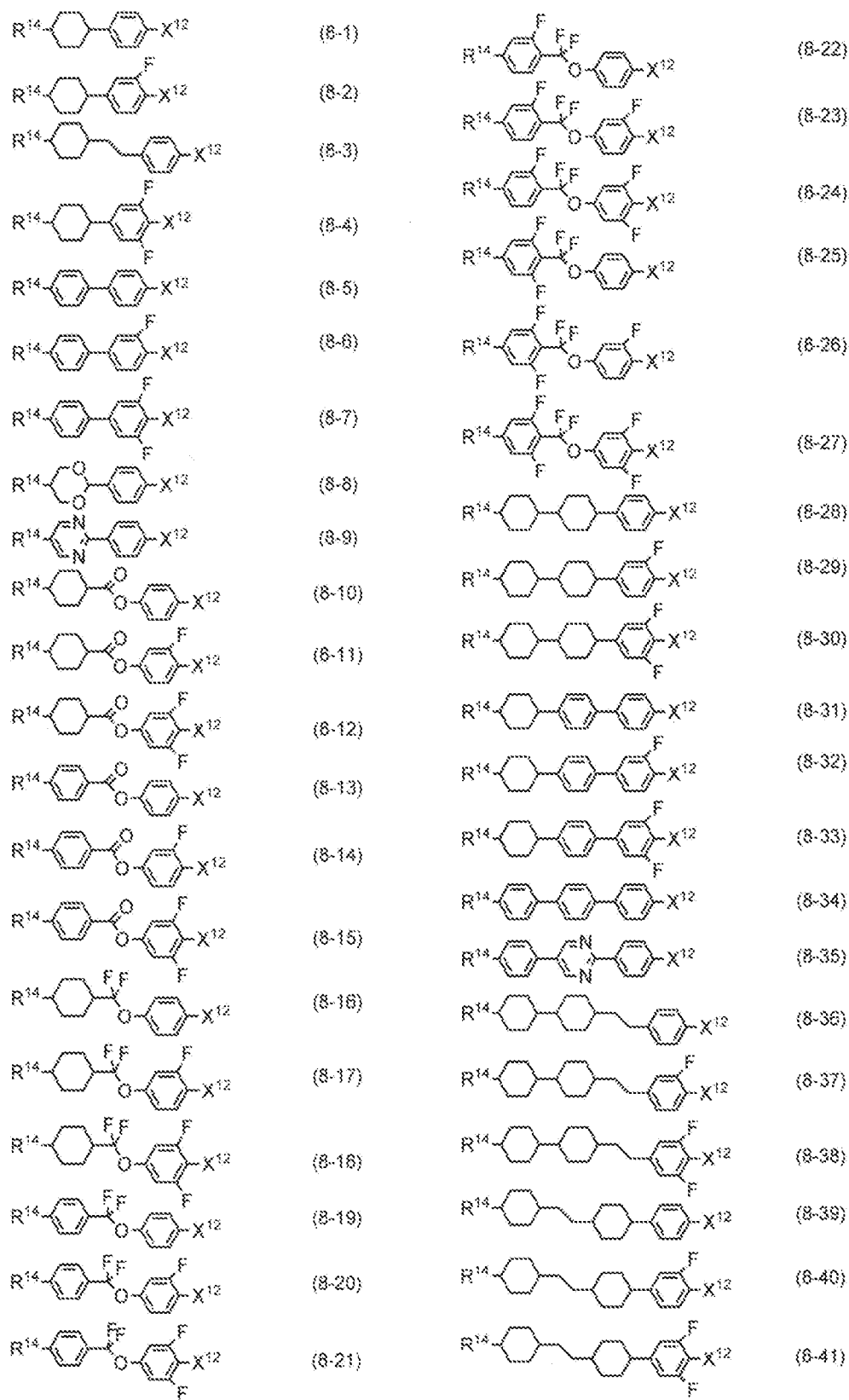
L^{13} および L^{14} は独立して水素またはフッ素であり；

i は、1、2、3、または4である。

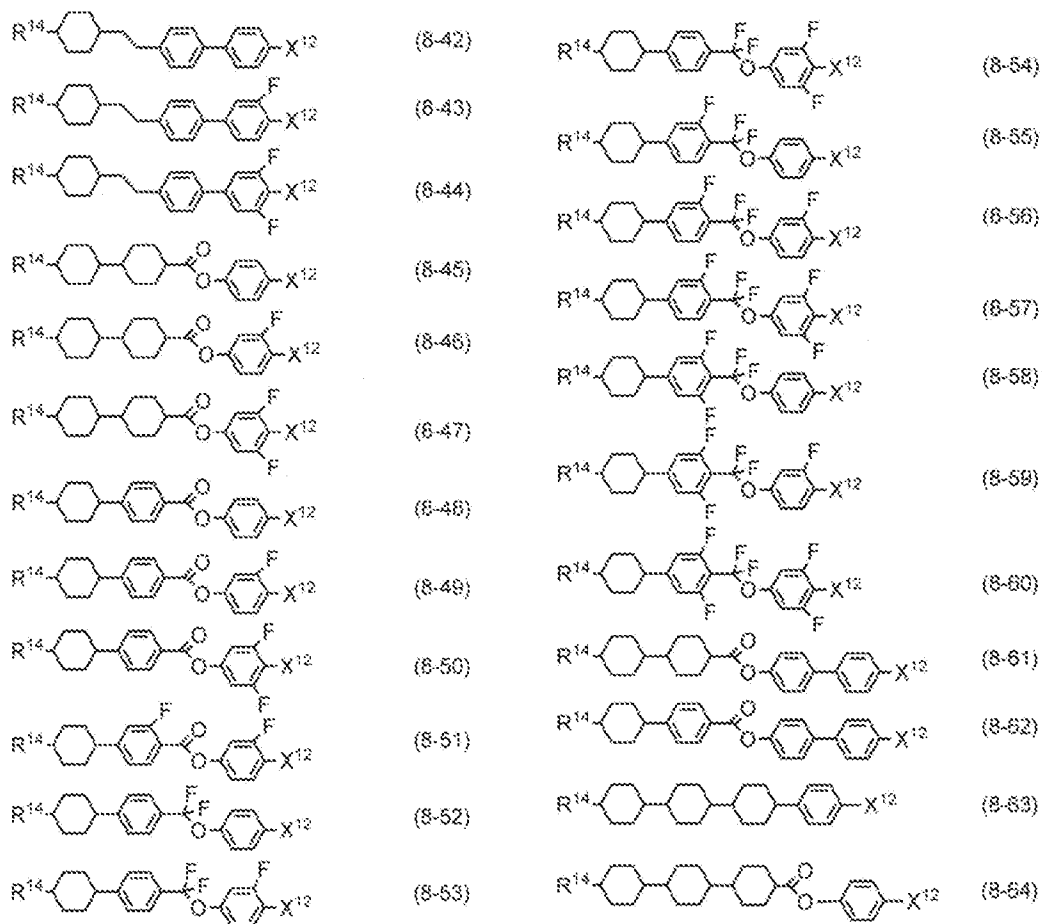
[0101] 式(8)で表される液晶性化合物は、右末端基が $-C \equiv N$ または $-C \equiv C - C \equiv N$ である化合物である。好ましい例として、化合物(8-1)～(8-64)を挙げることができる。これらの式において、 R^{14} および X^{12} は、式(8)と同一の定義である。

[0102]

[化52]



[0103] [化53]



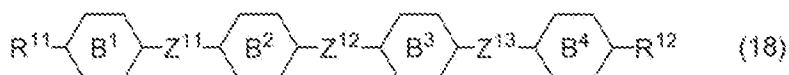
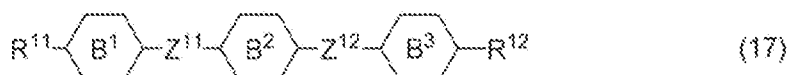
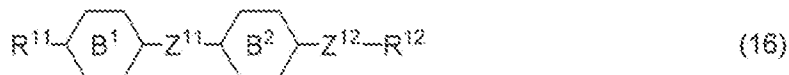
[0104] 式(8)で表される液晶性化合物は、誘電率異方性が正であり、その値が大きいので、TNなどのモード用の組成物を調製する場合に主として用いられる。この化合物を添加することにより、組成物の誘電率異方性を大きくすることができる。この化合物は、液晶相の温度範囲を広げる、粘度を調整する、または光学異方性を調整する、という効果がある。この化合物は、素子の電圧－透過率曲線の調整にも有用である。

[0105] TNなどのモード用の組成物を調製するには、式(8)で表される液晶性化合物の含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1～99重量%の範囲が適しており、好ましくは10～97重量%の範囲、さらに好ましくは40～95重量%の範囲である。この化合物を誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、その含有量は液晶組成物の重量に基づいて30重量%以下が

好ましい。この化合物を添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

[0106] 2. 3 下記一般式 (16) ～ (18) の液晶性化合物

[化54]



[0107] 上記式 (16) ～式 (18) 中、

R^{11} および R^{12} は独立して炭素数 1 ～ 10 のアルキル、炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ、炭素数 2 ～ 10 のアルコシアルキル、炭素数 2 ～ 10 のアルケニルまたはジフルオロビニルであり、この R^{11} および R^{12} において、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

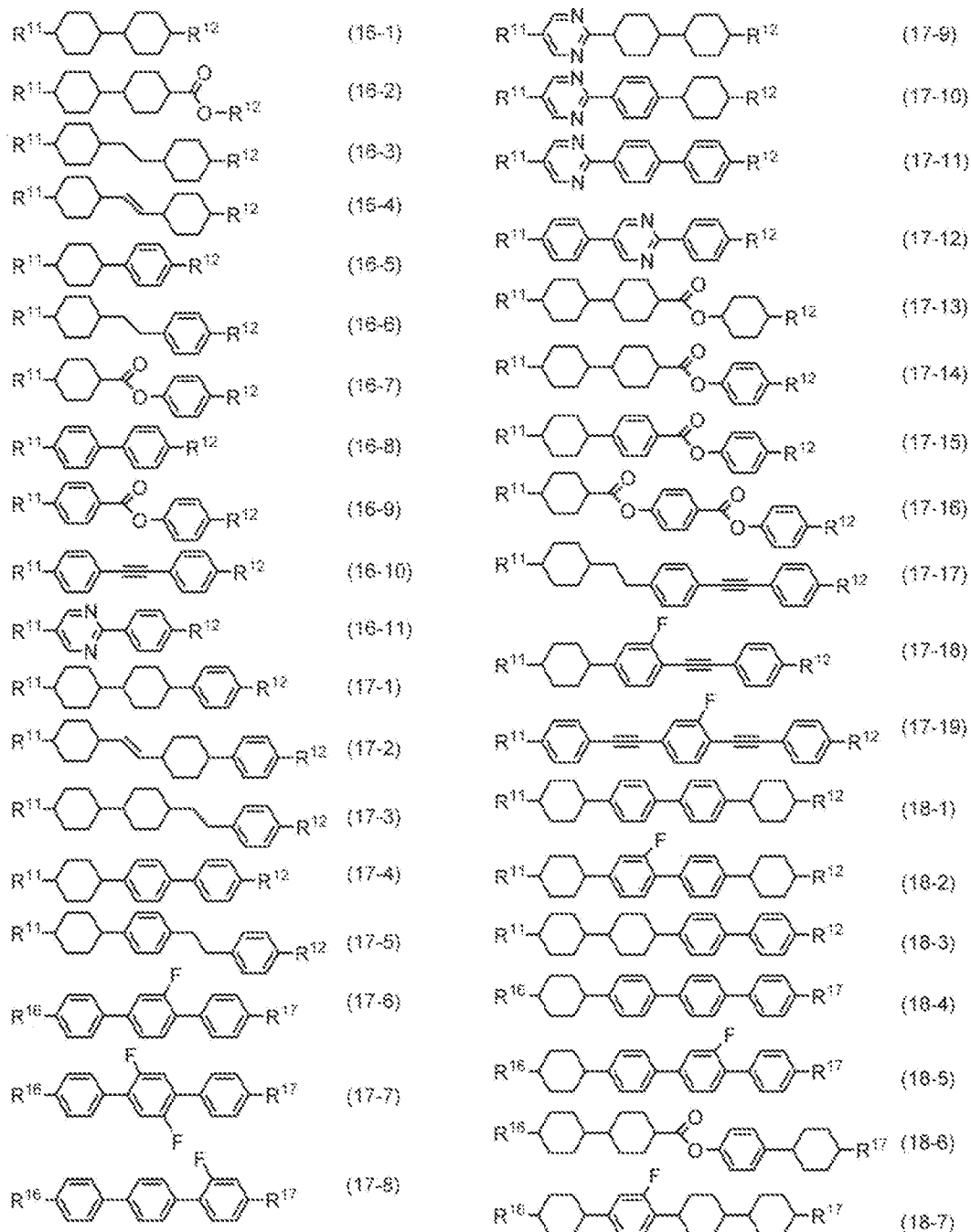
環 B^1 、環 B^2 、環 B^3 および環 B^4 は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 5-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、またはピリミジン-2, 5-ジイルであり；

Z^{11} 、 Z^{12} および Z^{13} は独立して、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、または $-\text{COO}-$ である。

[0108] 式 (16) ～ (18) の液晶性化合物は、2 つの末端基がアルキルなどである化合物である。好ましい例として、化合物 (16-1) ～ (16-11)、化合物 (17-1) ～ (17-19)、および化合物 (18-1) ～ (18-7) を挙げることができる。これらの式において、 R^{11} および R^{12} は、式 (16) ～ (18) と同一の定義である。

[0109]

[化55]



[0110] 式(16)～(18)の液晶性化合物は、誘電率異方性の絶対値が小さいので、中性に近い化合物である。式(16)の化合物は、主として粘度の減少または光学異方性の調整に効果がある。式(17)の化合物および式(18)の化合物は、上限温度を高くすることによってネマチック相の温度範囲を広げる効果、または光学異方性の調整に効果がある。

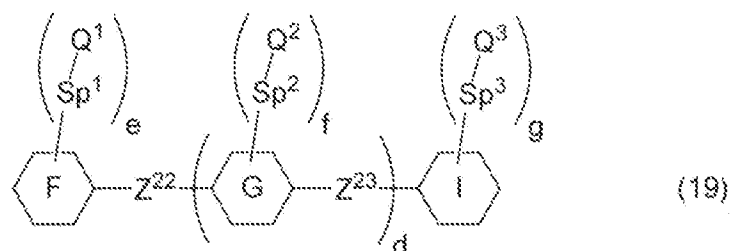
[0111] 式(16)～(18)の液晶性化合物の含有量を増加させるにつれて組成物の誘電率異方性が小さくなるが粘度は小さくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量が多い方が好ましい。IPSなどのモード用の組成物を調製する場合には、式(16)～(18)の液晶性化合物の含有量は、液晶組成物の重量に基づいて、好ましくは30重量%以上、さらに好ましくは40重量%以上である。

[0112] 3. 重合性化合物

重合性化合物は、液晶組成物中に重合体を生成させる目的で添加される。電極間に電圧を印加した状態で紫外線を照射して、重合性化合物を重合させることによって、液晶組成物の中に重合体を生成させる。この方法によって、配向の初期状態を安定化させることができるので、応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善された液晶表示素子を得られる。重合性化合物の好ましい例は、アクリレート、メタクリレート、ビニル化合物、ビニルオキシ化合物、プロペニルエーテル、エポキシ化合物（オキシラン、オキセタン）、およびビニルケトンである。さらに好ましい例は、少なくとも1つのアクリロイルオキシを有する化合物および少なくとも1つのメタクリロイルオキシを有する化合物である。さらに好ましい例には、アクリロイルオキシとメタクリロイルオキシの両方を有する化合物も含まれる。具体的な重合性化合物を以下に例示する。

[0113] 3. 1 一般式(19)の重合性化合物

[化56]



[0114] 上記式(19)中、

環Fおよび環Iは独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニ

ル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1, 3-ジオキサソ-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、独立して、ハロゲン、炭素数1~12のアルキル、炭素数1~12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1~12のアルキルで置き換えられてもよく；

環Gは、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-1, 2-ジイル、ナフタレン-1, 3-ジイル、ナフタレン-1, 4-ジイル、ナフタレン-1, 5-ジイル、ナフタレン-1, 6-ジイル、ナフタレン-1, 7-ジイル、ナフタレン-1, 8-ジイル、ナフタレン-2, 3-ジイル、ナフタレン-2, 6-ジイル、ナフタレン-2, 7-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、またはピリジン-2, 5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、独立して、ハロゲン、炭素数1~12のアルキル、炭素数1~12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1~12のアルキルで置き換えられてもよく；

Z^{22} および Z^{23} は独立して単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、この Z^{22} および Z^{23} において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、独立して、 $-CH=CH-$ 、 $-C(CH_3)=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)-$ 、または $-C(CH_3)=C(CH_3)-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Q^1 、 Q^2 および Q^3 は独立して重合性基であり；

Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、この Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$

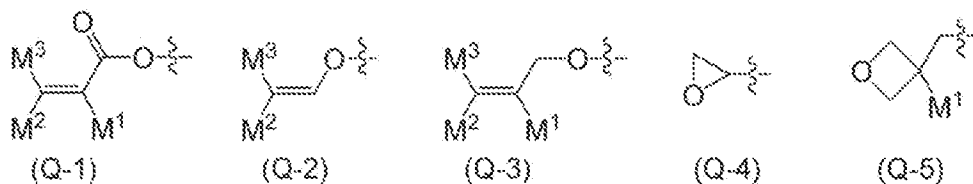
で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、独立して、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

dは0、1、または2であり；

e、f、およびgは独立して0、1、2、3、または4であり、そしてe、f、およびgの和は1以上である。

[0115] 上記一般式(19)において、 Q^1 、 Q^2 および Q^3 が独立して下記一般式(Q-1)～(Q-5)のいずれかで表される重合性基であることが好ましい。

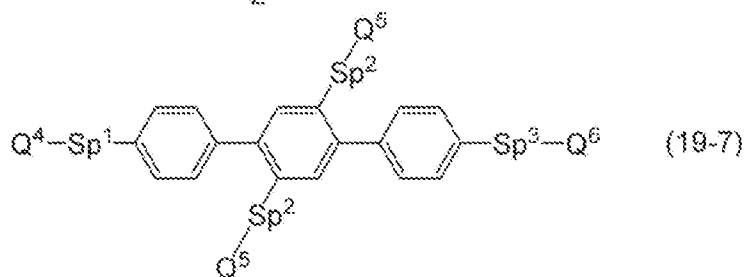
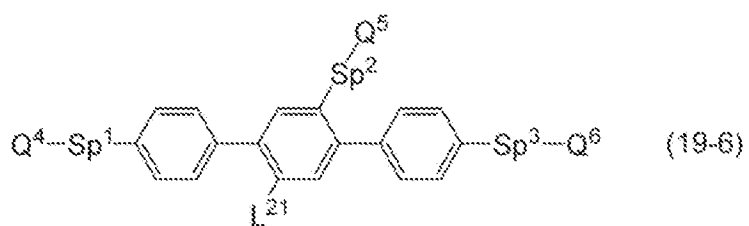
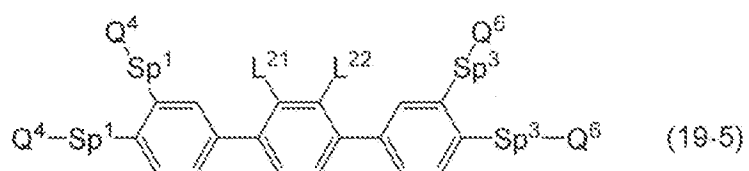
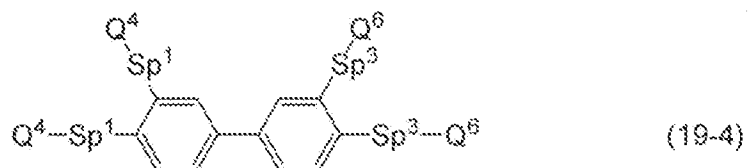
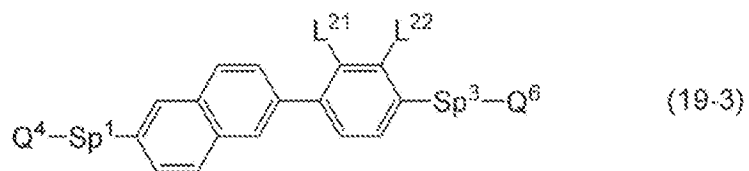
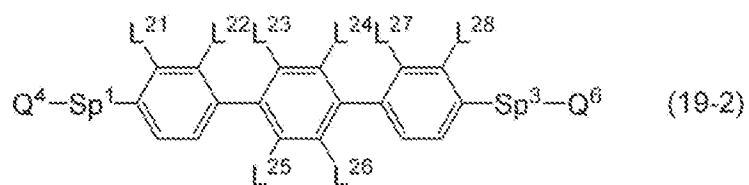
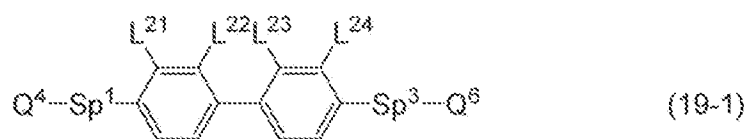
[化57]



上記式(Q-1)～式(Q-5)において、 M^1 、 M^2 および M^3 は独立して、水素、フッ素、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルである。

[0116] 一般式(19)の重合性化合物の好ましい例は、以下の重合性化合物(19-1)～(19-7)である。

[化58]



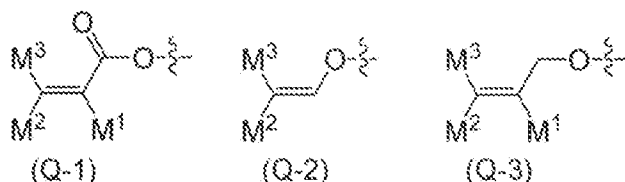
[0117] 上記式(19-1)～式(19-7)中、

L^{21} 、 L^{22} 、 L^{23} 、 L^{24} 、 L^{25} 、 L^{26} 、 L^{27} および L^{28} は独立して、水素、フッ素、またはメチルであり；

Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Q^4 、 Q^5 および Q^6 は独立して、下記一般式（Q-1）～式（Q-3）のいずれかで表される重合性基であり、ここで M^1 、 M^2 および M^3 は独立して、水素、フッ素、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルである。

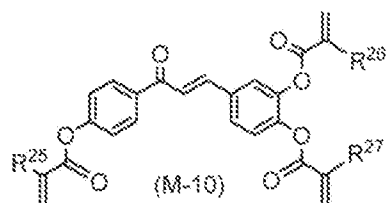
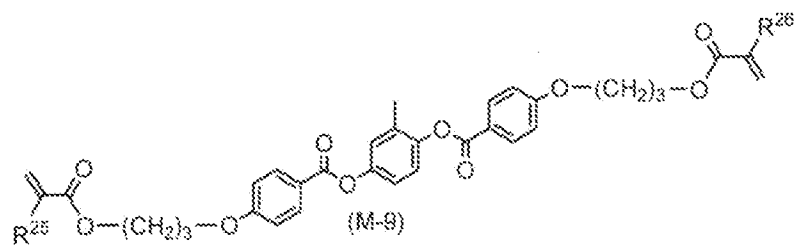
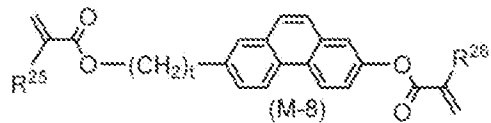
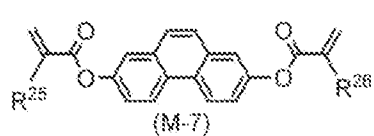
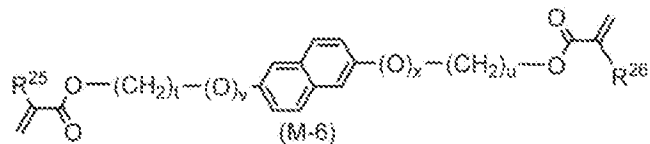
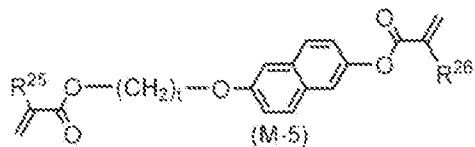
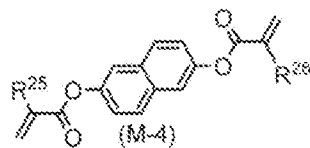
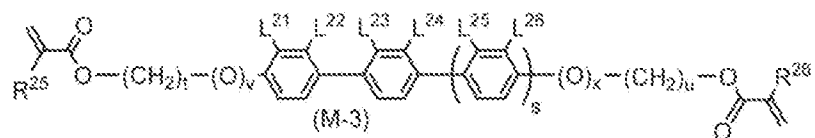
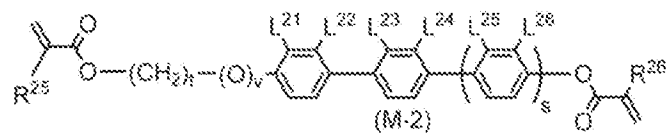
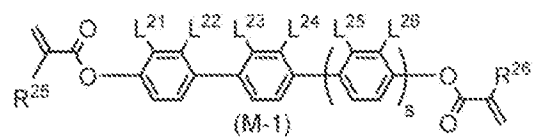
[化59]



[0118] 一般式（19）の重合性化合物のさらに好ましい例は、以下の重合性化合物（M-1）～（M-17）である。これらの化合物において、 R^{25} から R^{31} は独立して水素またはメチルであり； v および x は独立して0または1であり； t および u は独立して1～10の整数であり； s は0または1であり； L^{21} から L^{26} は独立して水素またはフッ素であり、 L^{27} および L^{28} は独立して、水素、フッ素、またはメチルである。

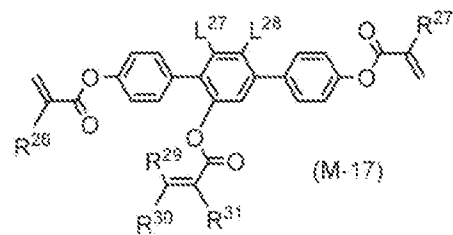
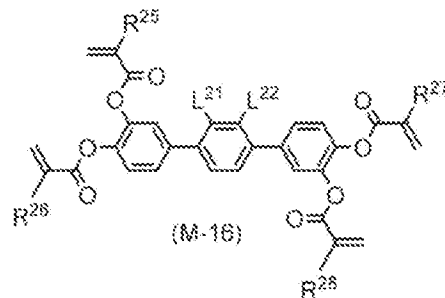
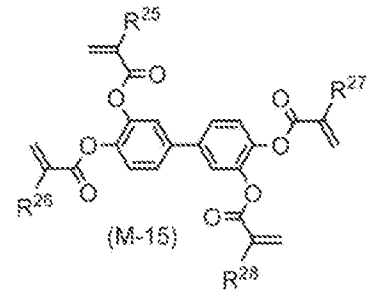
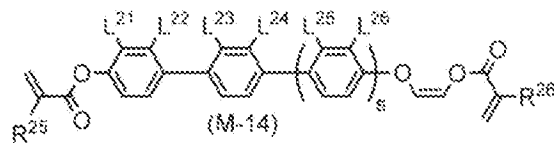
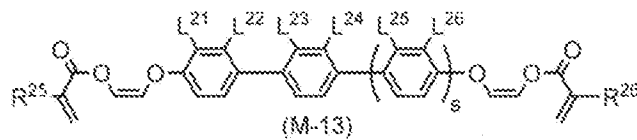
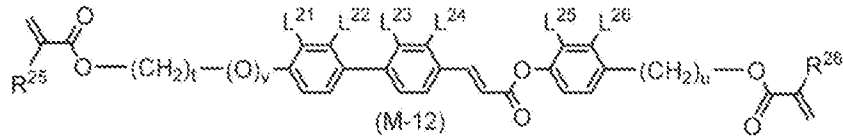
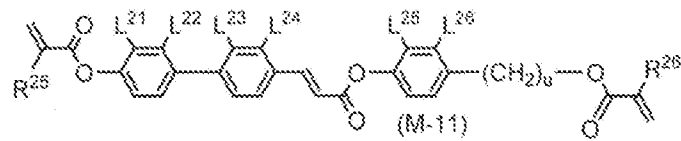
[0119]

[化60]



[0120]

[化61]



[0121] 4. 添加剤

4. 1 重合開始剤

重合性化合物は、重合開始剤を添加することによって、速やかに重合させることができる。反応温度を最適化することによって、残存する重合性化合物の量を減少させることができる。光ラジカル重合開始剤の例は、BASF社のダロキュアシリーズからTPO、1173、および4265であり、イルガキュアシリーズから184、369、500、651、784、819、907、1300、1700、1800、1850、および2959である。

[0122] 光ラジカル重合開始剤のさらなる例は、4-メトキシフェニル-2,4-

ビス（トリクロロメチル）トリアジン、2-（4-ブトキシスチリル）-5-トリクロロメチル-1,3,4-オキサジアゾール、9-フェニルアクリジン、9,10-ベンズフェナジン、ベンゾフェノン／ミヒラーズケトン混合物、ヘキサアリールビイミダゾール／メルカプトベンズイミダゾール混合物、1-（4-イソプロピルフェニル）-2-ヒドロキシ-2-メチルプロパン-1-オン、ベンジルジメチルケタール、2-メチル-1-〔4-（メチルチオ）フェニル〕-2-モルホリノプロパン-1-オン、2,4-ジエチルキサントン／p-ジメチルアミノ安息香酸メチル混合物、ベンゾフェノン／メチルトリエタノールアミン混合物である。

[0123] 液晶組成物に光ラジカル重合開始剤を添加したあと、電場を印加した状態で紫外線を照射することによって重合を行うことができる。しかし、未反応の重合開始剤または重合開始剤の分解生成物は、素子に画像の焼き付きなどの表示不良を引き起こすかもしれない。これを防ぐために重合開始剤を添加しないまま光重合を行ってもよい。照射する光の好ましい波長は150～500 nmの範囲である。さらに好ましい波長は250～450 nmの範囲であり、最も好ましい波長は300～400 nmの範囲である。

[0124] 4. 2 重合禁止剤

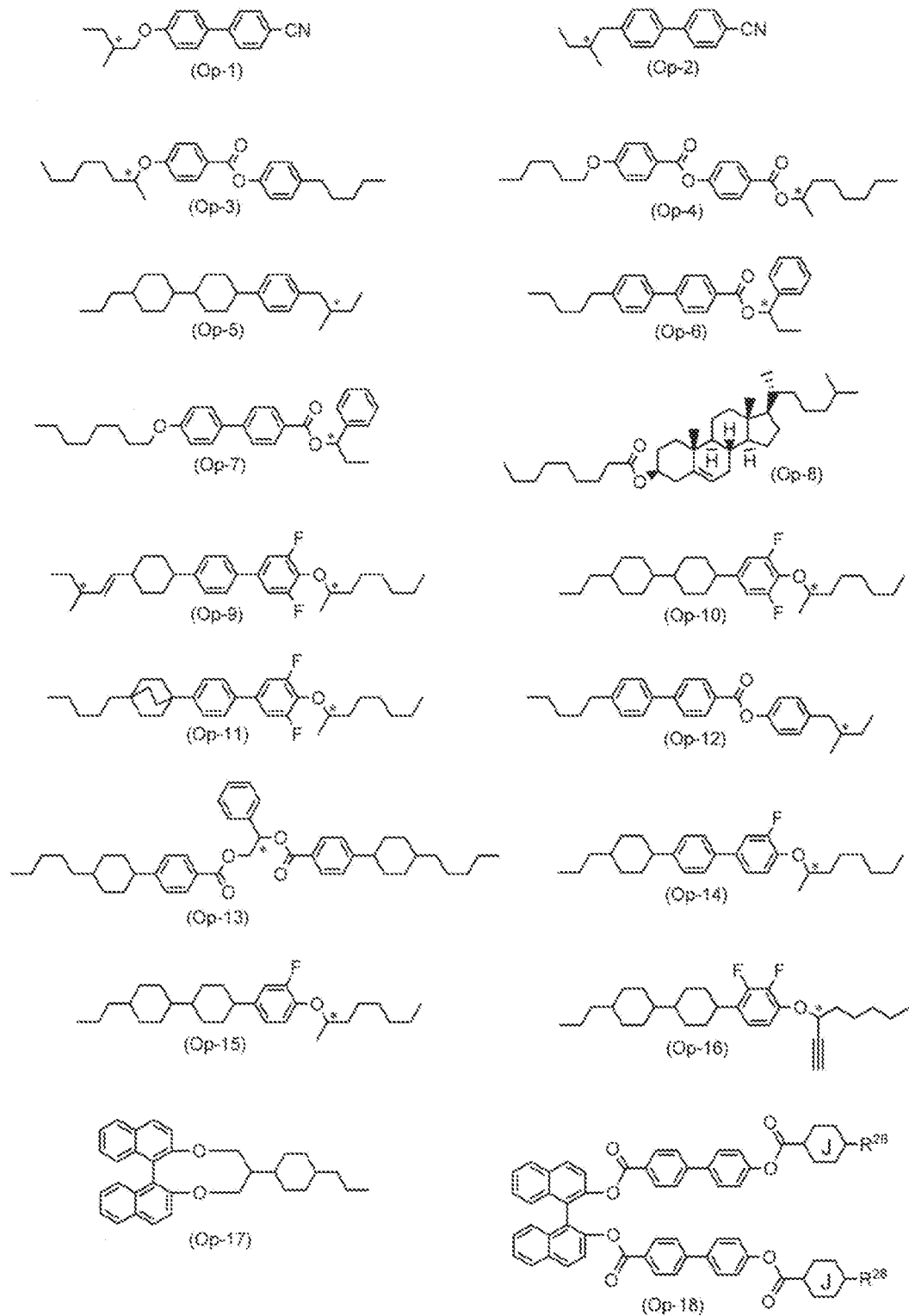
重合性化合物を保管するとき、重合を防止するために重合禁止剤を添加してもよい。重合性化合物は、通常は重合禁止剤を除去しないまま組成物に添加される。重合禁止剤の例は、ヒドロキノン、メチルヒドロキノンのようなヒドロキノン誘導体、4-tert-ブチルカテコール、4-メトキシフェノール、フェノチアジンなどである。

[0125] 4. 3 光学活性化合物

光学活性化合物は、液晶分子にらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与えることによって逆ねじれを防ぐ、という効果を有する。光学活性化合物を添加することによって、らせんピッチを調整することができる。らせんピッチの温度依存性を調整する目的で2つ以上の光学活性化合物を添加してもよい。光学活性化合物の好ましい例として、下記の化合物（Op-1）～（Op-10）

p-18)を挙げることができる。化合物(Op-18)において、環Jは1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、R²⁸は炭素数1~10のアルキルである。

[0126] [化62]



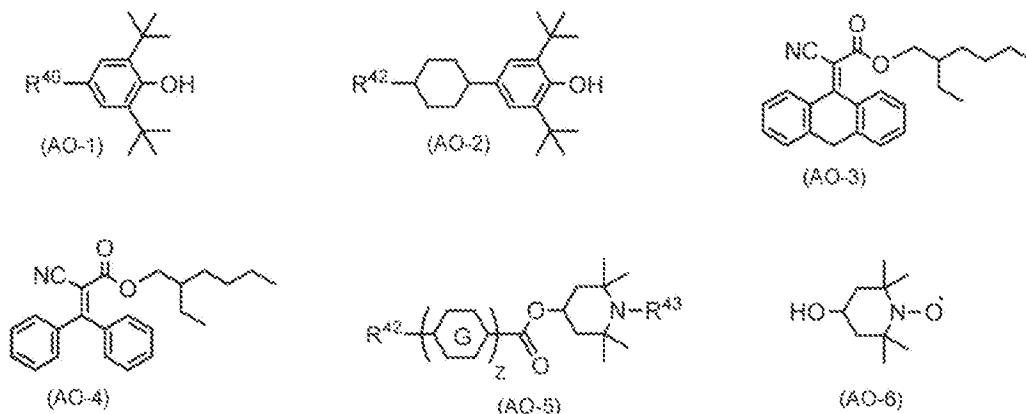
[0127] 4. 4 酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤

酸化防止剤は、大きな電圧保持率を維持するために有効である。酸化防止剤の好ましい例として、下記の化合物（A O - 1）および（A O - 2）； I R G A N O X 4 1 5、I R G A N O X 5 6 5、I R G A N O X 1 0 1 0、I R G A N O X 1 0 3 5、I R G A N O X 3 1 1 4、および I R G A N O X 1 0 9 8（商品名：B A S F 社）を挙げることができる。紫外線吸収剤は、上限温度の低下を防ぐために有効である。紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。具体例として下記の化合物（A O - 3）および（A O - 4）； T I N U V I N 3 2 9、T I N U V I N P、T I N U V I N 3 2 6、T I N U V I N 2 3 4、T I N U V I N 2 1 3、T I N U V I N 4 0 0、T I N U V I N 3 2 8、および T I N U V I N 9 9 - 2（商品名：B A S F 社）；および 1, 4 - ジアザビシクロ [2. 2. 2] オクタン（D A B C O）を挙げることができる。

[0128] 立体障害のあるアミンのような光安定剤は、大きな電圧保持率を維持するために好ましい。光安定剤の好ましい例として、下記の化合物（A O - 5）および（A O - 6）； T I N U V I N 1 4 4、T I N U V I N 7 6 5、および T I N U V I N 7 7 0 D F（商品名：B A S F 社）を挙げることができる。熱安定剤も大きな電圧保持率を維持するために有効であり、好ましい例として I R G A F O S 1 6 8（商品名：B A S F 社）を挙げることができる。消泡剤は、泡立ちを防ぐために有効である。消泡剤の好ましい例は、ジメチルシリコンオイル、メチルフェニルシリコンオイルなどである。

[0129]

[化63]



[0130] 化合物(AO-1)において、 R^{40} は炭素数1～20のアルキル、炭素数1～20のアルコキシ、 $-COOR^{41}$ 、または $-CH_2CH_2COOR^{41}$ であり、ここで R^{41} は炭素数1～20のアルキルである。化合物(AO-2)および(AO-5)において、 R^{42} は炭素数1～20のアルキルである。化合物(AO-5)において、 R^{43} は水素、メチル、または $O\cdot$ (酸素ラジカル)であり、環Gは1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、 z は1、2、または3である。

[0131] 5. 液晶組成物

本発明の液晶組成物は、少なくとも(1)低分子極性化合物と(2)液晶性化合物とを含む。また、(3)重合性化合物、(4)重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤などの添加剤を含んでもよい。液晶組成物は公知の方法によって調製される。例えば、成分化合物を混合し、そして加熱によって互いに溶解させる。

[0132] 本発明の液晶組成物を調製するときには、正または負の誘電率異方性の大きさなどを考慮して液晶性化合物の種類を選択することが好ましい。成分を適切に選択した組成物は、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性(すなわち、大きな光学異方性または小さな光学異方性)、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、熱または紫外線に対する安

定性、および適切な弾性定数（すなわち、大きな弾性定数または小さな弾性定数）を有する。

[0133] 液晶組成物中の（１）極性化合物の含有量は０．０１～２０重量％であり、好ましくは０．１～１５重量％、より好ましくは０．３～１０重量％、さらに好ましくは０．５～７重量％である。

[0134] ただし、極性化合物の含有量はその順相逆相ＣＶ積を考慮して決定することが好ましい。すなわち、極性化合物の順相逆相ＣＶ積とその含有量との積である総順相逆相ＣＶ積（順相逆相ＣＶ積×含有量／１００）が０．０１以上となるように含有量を調整することが好ましい。総順相逆相ＣＶ積とは、液晶組成物中に複数種の極性化合物が含まれる場合は各極性化合物についての総順相逆相ＣＶ積の総和であり、液晶組成物中に存在する極性化合物の順相逆相ＣＶ積の総和を意味する。

[0135] 本発明の液晶組成物における極性化合物の総順相逆相ＣＶ積は０．０１以上が好ましく、０．０５～２０がより好ましく、０．１～１０がさらに好ましく、１．０～６．０が特に好ましい。

[0136] ６．液晶表示素子

液晶組成物は、ＰＣ（phase change）、ＴＮ（twisted nematic）、ＳＴＮ（super twisted nematic）、ＥＣＢ（electrically controlled birefringence）、ＯＣＢ（optically compensated bend）、ＩＰＳ（in-plane switching）、ＦＦＳ（fringe field switching）、ＦＰＡ（field-induced photo-reactive alignment）などのモードの、アクティブマトリックス方式で駆動する液晶表示素子に使用できる。この組成物は、ＰＣ、ＴＮ、ＳＴＮ、ＥＣＢ、ＯＣＢ、ＩＰＳ、ＦＦＳ、ＦＰＡなどの動作モードの、パッシブマトリックス方式で駆動する液晶表示素子にも使用することができる。これらの素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。

[0137] この組成物は、ネマチック液晶をマイクロカプセル化して作製したＮＣＡＰ（nematic curvilinear aligned phase）素子、液晶中に三次元網目状高分子を形成して作製したポリマー分散型液晶表示素子（ＰＤＬＣＤ）、そして

ポリマーネットワーク液晶表示素子（PNLCD）にも使用できる。重合性化合物の添加量が液晶組成物の重量に基づいて約10重量%以下であるとき、PSモードの液晶表示素子が作製される。好ましい割合は約0.1～約2重量%の範囲である。さらに好ましい割合は、約0.2～約1.0重量%の範囲である。PSモードの素子は、アクティブマトリックス、パッシブマトリックスのような駆動方式で駆動させることができる。このような素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。重合性化合物の添加量を増やすことによって、高分子分散（polymer dispersed）モードの素子も作製することができる。

[0138] 高分子支持（PS；polymer sustained）型の液晶表示素子では、重合体を含有する液晶組成物が用いられる。まず、少量の重合性化合物を添加した組成物を素子に注入する。次に、組成物に紫外線を照射する。重合性化合物は重合して、組成物中に重合体の網目構造を生成する。この組成物では、重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。本発明の極性化合物は、液晶分子が配列するのを促す。すなわち、本発明の極性化合物は、配向処理の代わりに用いることができる。このような素子を製造する方法の一例は、次のとおりである。配向処理または液晶媒体を配向させるための配向膜を施していない一対の透明基板を有する素子を用意する。この基板の少なくとも1つは、電極層を有する。液晶性化合物を混合して液晶組成物を調製する。この組成物に重合性化合物および極性化合物を添加する。必要に応じて添加物をさらに添加してもよい。この組成物を素子に注入する。この素子に光照射する。紫外線が好ましい。光照射によって重合性化合物を重合させる。この重合によって、重合体を含む組成物が生成し、高分子支持配向型を有する素子が作製される。

[0139] この手順において、極性化合物は、極性基が基板表面と相互作用するので、基板上に偏在する。この極性化合物が、液晶分子を配向させる。この配向に従って重合性化合物も配向する。この状態で重合性化合物が紫外線によっ

て重合するので、この配向を維持した重合体が生成する。この重合体の効果によって、液晶分子の配向が追加的に安定化するので、素子の応答時間が短縮される。画像の焼き付きは、液晶分子の動作不良であるから、この重合体の効果によって焼き付きも同時に改善されることになる。特に本発明の極性化合物が重合性基を有している場合、液晶分子を配向させると共に、他の重合性化合物と共重合する。これによって極性化合物が液晶組成物中に漏れ出す事が無くなるため、電圧保持率の大きな液晶表示素子が得られる。

[0140] 6. 1 液晶表示素子に使用する基板

液晶表示素子に使用する基板は、ガラス、ITOその他の透明基板を用いることができ、そこに絶縁膜（例えばポリイミド）などが形成されていてもよい。用いる一对の基板の少なくともどちらか一方には、透明電極を形成しておく必要がある。本発明の極性化合物がその効果を十分に発揮するためには、基板には所定の凹凸構造があると好ましく、その構造パターンに沿って液晶性化合物が配向する。凹凸構造のパターン間隔は1～20 μm が好ましく、1～10 μm がより好ましく、5 μm 程度が特に好ましい。

[0141] 基板上の凹凸構造は電極によって形成されていてもよく、使用する電極はITOなどの透明電極が好ましい。

[0142] 本発明の極性化合物により液晶性化合物が配向する原理は、本発明は特にこれに限定されるわけではないが、液晶組成物を液晶セルに注入した際に極性化合物が有する極性基により基板表面に極性化合物が偏在し、液晶性化合物に作用する基板側の表面張力を操作することによるものと考えられる。

[0143] 6. 2 総順相逆相CV積と表面自由エネルギーとの比

本発明の極性化合物は、液晶組成物中で上述した総順相逆相CV積が定義され、さらにこの液晶組成物を液晶セルに注入した際に当該セルを構成する基板との関係で、極性化合物の総順相逆相CV積と基板の表面自由エネルギーとの比（総順相逆相CV積／表面自由エネルギー）が0.025～1であると好ましい。この比は0.03～0.80がより好ましく、0.05～0.5がさらに好ましい。

[0144] 6. 3 液晶表示素子中の液晶媒体の配向状態

本発明での液晶表示素子中の液晶媒体は、ホモジニアス配向している。ホモジニアス配向している状態とは、液晶媒体が基板面と平行に配向することに加えて、基板面と平行な面内においても液晶媒体が配向している状態である。面内配向の向きは、以下に限定されるわけではないが、電極等によって形成される凹凸構造に沿って配向する。

実施例

[0145] 実施例により、本発明をさらに詳しく説明する。本発明はこれらの実施例によっては制限されない。合成した化合物は、NMR分析などの方法により同定した。化合物および組成物の物性値は、下記に記載した方法により測定した。

[0146] NMR分析

測定装置は、DRX-500（ブルカーバイオスピン（株）社製）を用いた。 ^1H -NMRの測定では、試料を CDCl_3 などの重水素化溶媒に溶解させ、室温で、500MHz、積算回数16回の条件で行った。テトラメチルシランを内部標準として用いた。 ^{19}F -NMRの測定では、 CFCl_3 を内部標準として用い、積算回数24回で行った。核磁気共鳴スペクトルの説明において、sはシングレット、dはダブルット、tはトリプレット、qはカルテット、quinはクインテット、sexはセクステット、mはマルチプレット、brはブロードであることを意味する。

[0147] 測定試料

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

[0148] 測定方法

物性の測定は下記の方法で行った。これらの多くは、社団法人電子情報技術産業協会（Japan Electronics and Information Technology Industries A

ssociation ; 以下、J E I T A と略す) で審議制定される J E I T A 規格 (J E I T A ・ E D - 2 5 2 1 B) に記載された方法、またはこれを修飾した方法であった。測定に用いた T N 素子には、T F T を取り付けなかった。

[0149] (1) 相構造

偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレート (メトラー社 F P - 5 2 型ホットステージ) に試料を置き、 $3^{\circ}\text{C}/\text{分}$ の速度で加熱しながら相状態とその変化を偏光顕微鏡で観察し、相の種類を特定した。

[0150] (2) 転移温度 ($^{\circ}\text{C}$)

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

[0151] 結晶は C と表した。結晶の種類の区別がつく場合は、それぞれ C_1 または C_2 と表した。スメクチック相は S、ネマチック相は N と表した。スメクチック相の中で、スメクチック A 相、スメクチック B 相、スメクチック C 相、またはスメクチック F 相の区別がつく場合は、それぞれ S_A 、 S_B 、 S_C 、または S_F と表した。液体 (アイソトロピック) は I と表した。転移温度は、例えば、「C 50.0 N 100.0 I」のように表記した。これは、結晶からネマチック相への転移温度が 50.0°C であり、ネマチック相から液体への転移温度が 100.0°C であることを示す。

[0152] (3) 低温相溶性

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

[0153] (4) ネマチック相の上限温度 (T_{NI} または NI ; °C)

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

[0154] (5) ネマチック相の下限温度 (T_C ; °C)

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

[0155] (6) 粘度 (バルク粘度; η ; 20 °C で測定; mPa·s)

E 型回転粘度計を用いて測定した。

[0156] (7) 粘度 (回転粘度; γ_1 ; 25 °C で測定; mPa·s)

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

[0157] (8) 光学的異方性 (屈折率異方性; 25 °C で測定; Δn)

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

[0158] (9) 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$; 25 °C で測定)

2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 9 μm であり、そしてツイスト角が 80 度である TN 素子に試料を入れた。この素子にサイン波 (10 V、1 kHz) を印加し、2 秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率 ($\epsilon_{//}$) を測定した。この素子にサイン波 (0.5 V、1 kHz) を印加し、2 秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率 ($\epsilon_{\perp}$) を測定した。誘電率異方性の値は、 $\Delta \epsilon = \epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}$ 、の式から計算した。

[0159] (10) 弾性定数 (K; 25 °C で測定; pN)

測定には横河・ヒューレットパッカード株式会社製の HP4284A 型 LC メータを用いた。2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 20 μm である水平配向素子に試料を入れた。この素子に 0 V から 20 V の電荷を印加し、静電容量 (C) と印加電圧 (V) を測定した。これらの測定値を「液晶デバイスハンドブック」(日刊工業新聞社)、75 頁にある等式 (2.98)、等式 (2.101) を用いてフィッティングし、等式 (2.99) から K11 および K33 の値を得た。次に 171 頁にある等式 (3.18) に、先ほど求めた K11 および K33 の値を用いて K22 を算出した。弾性定数 K は、このようにして求めた K11、K22、および K33 の平均値で表した。

[0160] (11) しきい値電圧 (V_{th} ; 25 °C で測定; V)

測定には大塚電子株式会社製の LCD5100 型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 0.45 / Δn (μm) であり、ツイスト角が 80 度であるノーマリーホワイトモ

ード (normally white mode) の T N 素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧 (32 Hz、矩形波) は 0 V から 10 V まで 0.02 V ずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率 100% であり、この光量が最小であったときが透過率 0% である電圧-透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が 90% になったときの電圧で表した。

[0161] (12) 電圧保持率 (VHR-1; 25℃で測定; %)

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

[0162] (13) 電圧保持率 (VHR-2; 80℃で測定; %)

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

[0163] 原料: ソルミックス A-11 (登録商標) は、エタノール (85.5 重量%)、メタノール (13.4 重量%) とイソプロパノール (1.1 重量%) の混合物であり、日本アルコール販売 (株) から入手した。

[0164] <極性化合物 (2-1-1) の合成例>

[化64]



[0165] 極性化合物（２－１－１）は東京化成工業株式会社より入手した。

[0166] <極性化合物（２－２－１）の合成例>

[化65]



[0167] 極性化合物（２－２－１）は東京化成工業株式会社より入手した。

[0168] <極性化合物（３－１－１）の合成例>

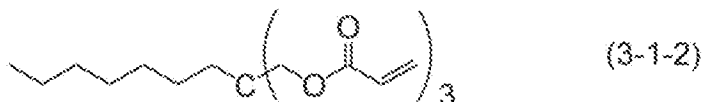
[化66]



[0169] 極性化合物（３－１－１）は東京化成工業株式会社より入手した。

[0170] <極性化合物（３－１－２）の合成例>

[化67]



[0171] 第１工程

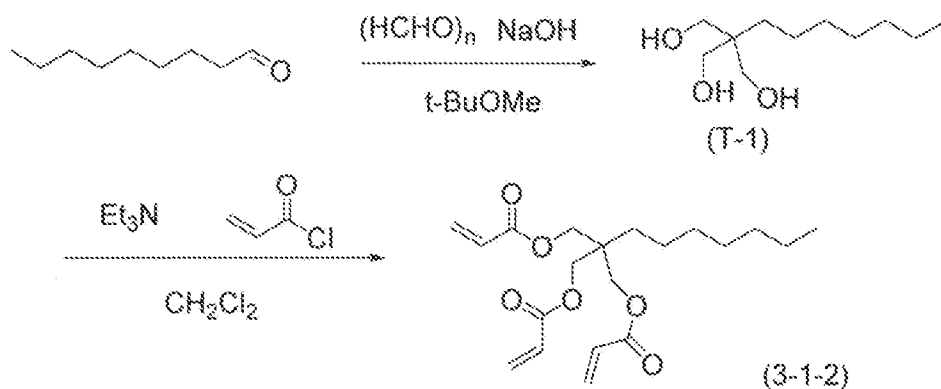
パラホルムアルデヒド（１２ｇ）および２－メチル２－メトキシプロパン（*t*-BuOMe、３１ｇ）を反応器にとり、系内を４０℃程度に維持しながら、水（６ｇ）、NaOH（８ｇ）およびノナール（１０．５ｇ）の水溶液を滴下した。その後、水（２ｇ）およびNaOH（２ｇ）の水溶液を添加し、１時間還流した。系内をギ酸で中和し、それを水に注いでトルエンで抽出した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム（溶媒：酢

酸エチル)を通して精製することで、中間化合物(T-1)(10g)を得た。

[0172] 第2工程

中間化合物(T-1)(3.5g)、トリエチルアミン(6.1g)およびジクロロメタン(30ml)を反応器に入れ、0℃まで冷却した。そこにアクリル酸クロライド(6.2g)のジクロロメタン溶液(10ml)を滴下し、室温まで昇温しながら1時間攪拌した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム(溶媒:トルエン/酢酸エチル=20/1(容量比))を通して精製することで、油状の極性化合物(3-1-2)(5g)を得た。

[0173] [化68]

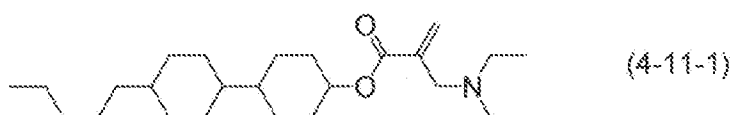


[0174] 得られた極性化合物(3-1-2)のNMR分析値は以下のとおりである。

$^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm; CDCl_3): 6.40 (d, 3H)、6.11 (dd, 3H)、5.86 (d, 3H)、4.67 (s, 6H)、1.52–1.19 (m, 12H) 0.87 (t, 3H)。

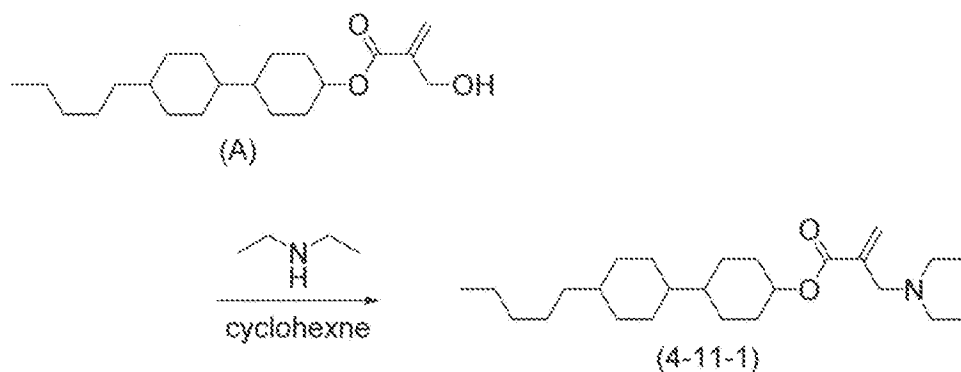
[0175] <極性化合物(4-11-1)の合成例>

[化69]



[0176] 後述する化合物 (A) (3.00 g)、ジエチルアミン (1.30 g)、およびシクロヘキサン (100 ml) を反応器に入れ、75℃で12時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム (溶媒：トルエン／酢酸エチル＝1／1 (容量比)) を通して精製することで、極性化合物 (4-11-1) (0.52 g、収率15%) を得た。

[0177] [化70]



[0178] 得られた極性化合物 (4-11-1) のNMR分析値は以下のとおりである。

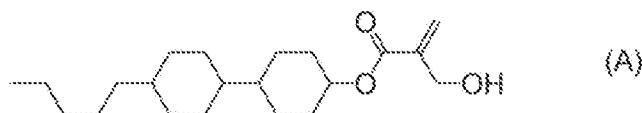
^1H -NMR : 化学シフト δ (ppm; CDCl_3) : 6.18 (s, 1H)、5.74 (s, 1H)、4.74-4.67 (m, 1H)、3.23 (s, 2H)、2.50 (q, $J=7.1\text{ Hz}$, 4H)、2.03-2.01 (m, 2H)、1.78-1.68 (m, 6H)、1.37-0.80 (m, 28H)。

[0179] 極性化合物 (4-11-1) の物性は以下のとおりであった。

転移温度 : $C_{14.1}$ S_A 58.9 $^{\circ}\text{C}$ 。

[0180] なお、化合物 (A) は以下のようにして合成した。

[化71]



[0181] 第1工程

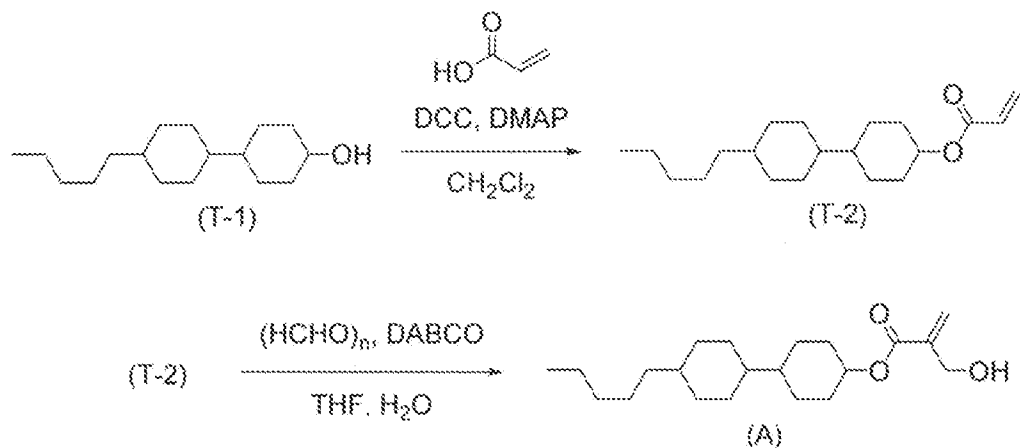
化合物 (T-1) (25.0 g)、アクリル酸 (7.14 g)、N, N-ジメチル-4-アミノピリジン (DMAP、1.21 g)、およびジクロロメタン (300 ml) を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへN, N'-ジクロヘキシルカルボジイミド (DCC、24.5 g) のジクロロメタン (125 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム (溶媒: ヘプタン/トルエン=2/1 (容量比)) を通して精製した。さらにソルミックス (登録商標) A-11からの再結晶により精製することで、中間化合物 (T-2) (11.6 g、収率38%) を得た。

[0182] 第2工程

パラホルムアルデヒド (2.75 g)、1, 4-ジアザビシクロ [2.2.2] オクタン (DABCO、4.62 g) および水 (40 ml) を反応器に入れ、室温で15分間攪拌した。そこへ中間化合物 (T-2) (6.31 g) のTHF (90 ml) 溶液を滴下し、室温で72時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム (溶媒: トルエン/酢酸エチル=5/1 (容量比)) で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒 (1:1 (容量比)) からの再結晶により精製することで、化合物 (A) (1.97 g、収率29%) を得た。

[0183]

[化72]



[0184] 得られた化合物 (A) のNMR分析値は以下のとおりである。

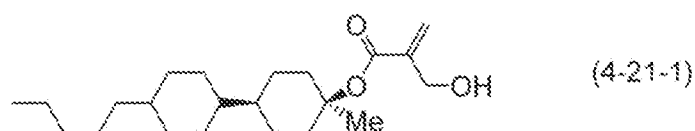
$^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm; CDCl_3) : 6.23 (s, 1H)、5.79 (d, $J=1.2\text{ Hz}$, 1H)、4.79–4.70 (m, 1H)、4.32 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、2.29 (t, $J=6.7\text{ Hz}$, 1H)、2.07–2.00 (m, 2H)、1.83–1.67 (m, 6H)、1.42–1.18 (m, 8H)、1.18–0.91 (m, 9H)、0.91–0.79 (m, 5H)。

[0185] 化合物 (A) の物性は以下のとおりであった。

転移温度 : $C_{40.8}$ S_A 109 I。

[0186] <極性化合物 (4-21-1) の合成例>

[化73]



[0187] 第1工程

化合物 (T-64) (10.0 g) および THF (200 ml) を反応器に入れ、0℃まで冷却した。メチルマグネシウムブロミド (MeMgBr 、1.00 M、THF 溶液、48 ml) をゆっくりと加え、室温に戻しつつ6時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢

酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム（溶媒：トルエン／酢酸エチル＝9／1（容量比））を通して精製することで、中間化合物（T-65）（4.58 g、収率43%）を得た。

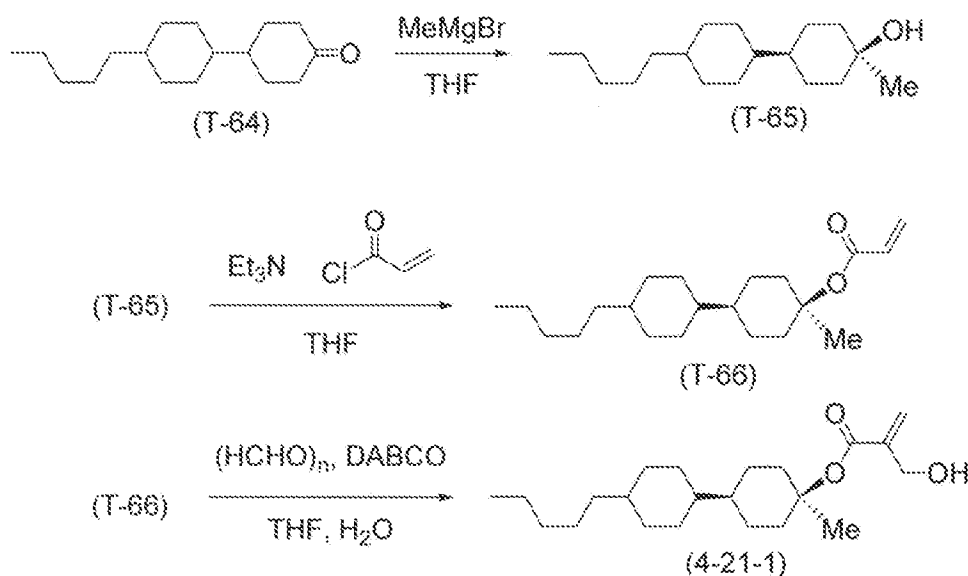
[0188] 第2工程

中間化合物（T-65）（4.58 g）、トリエチルアミン（2.87 ml）およびTHF（200 ml）を反応器に入れ、0℃まで冷却した。アクリル酸クロライド（1.68 ml）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ5時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム（溶媒：トルエン／ヘプタン＝3／2（容量比））を通して精製することで、中間化合物（T-66）（3.20 g、収率58%）を得た。

[0189] 第3工程

中間化合物（T-66）（3.20 g）を原料として用い、化合物（A）の合成方法における第2工程と同様の手法により、極性化合物（4-21-1）（1.12 g、収率32%）を得た。

[0190] [化74]



[0191] 得られた極性化合物（４－２１－１）のNMR分析値は以下のとおりである。

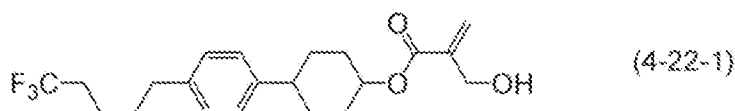
$^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm; CDCl_3) : 6.15 (s, 1H)、5.73 (d, $J=1.2\text{ Hz}$, 1H)、4.28 (d, $J=6.6\text{ Hz}$, 2H)、2.34–2.32 (m, 1H)、2.13–2.11 (m, 2H)、1.76–1.67 (m, 8H)、1.54 (s, 3H)、1.32–1.03 (m, 13H)、0.97–0.80 (m, 7H)。

[0192] 極性化合物（４－２１－１）の物性は以下のとおりであった。

転移温度 : $\text{C } 66.5 \text{ } ^\circ\text{S}_A \text{ } 81.1 \text{ } ^\circ\text{I}$ 。

[0193] <極性化合物（４－２２－１）の合成例>

[化75]



[0194] 第1工程

化合物（Ｔ－４９）（１５．０ｇ）およびトリフェニルホスフィン（ PPh_3 、２４．８ｇ）を反応器に入れて、 100°C にて６時間攪拌した。氷冷したヘプタンで濾過洗浄し、中間化合物（Ｔ－５０）（１６．４ｇ、収率５２％）を得た。

[0195] 第2工程

化合物（Ｔ－５１）（１０．０ｇ）およびTHF（２００ｍｌ）を反応器に入れ、 -70°C まで冷却した。 n -ブチルリチウム（１．６３Ｍ、ヘキサン溶液、２５ｍｌ）をゆっくりと加え、１時間攪拌した。DMF（４．０ｍｌ）をゆっくり加え、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム（溶媒：トルエン／酢酸エチル＝９／１（容量比））を通して精製することで、中間化合物（Ｔ－５２）（６．３７ｇ

、収率 77%) を得た。

[0196] 第 3 工程

中間化合物 (T-50) (14.3 g) および THF (200 ml) を反応器に入れ、-30℃まで冷却した。そこへカリウム t-ブトキシド (3.21 g) をゆっくりと加え、-30℃で 1 時間攪拌した。中間化合物 (T-52) (6.37 g) の THF (100 ml) 溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ 4 時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム (溶媒: トルエン) を通して精製することで、中間化合物 (T-53) (7.50 g、収率 85%) を得た。

[0197] 第 4 工程

中間化合物 (T-53) (7.50 g)、Pd/C (0.11 g)、IPA (200 ml) およびトルエン (200 ml) を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で 12 時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム (溶媒: トルエン) を通して精製することで、中間化合物 (T-54) (7.21 g、収率 95%) を得た。

[0198] 第 5 工程

中間化合物 (T-54) (7.21 g)、ギ酸 (9.70 g) およびトルエン (200 ml) を反応器に入れて、100℃にて 4 時間攪拌した。不溶物を濾別した後、炭酸水素ナトリウム水溶液で中和し、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム (溶媒: トルエン) を通して精製することで、中間化合物 (T-55) (5.65 g、収率 90%) を得た。

[0199] 第 6 工程

水素化アルミニウムリチウム（L A H、0.43 g）およびT H F（100 m l）を反応器に入れて氷冷した。中間化合物（T-55）（5.65 g）のT H F（100 m l）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ2時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム（溶媒：トルエン／酢酸エチル＝9／1（容量比））を通して精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製することで、中間化合物（T-56）（4.83 g、収率85%）を得た。

[0200] 第7工程

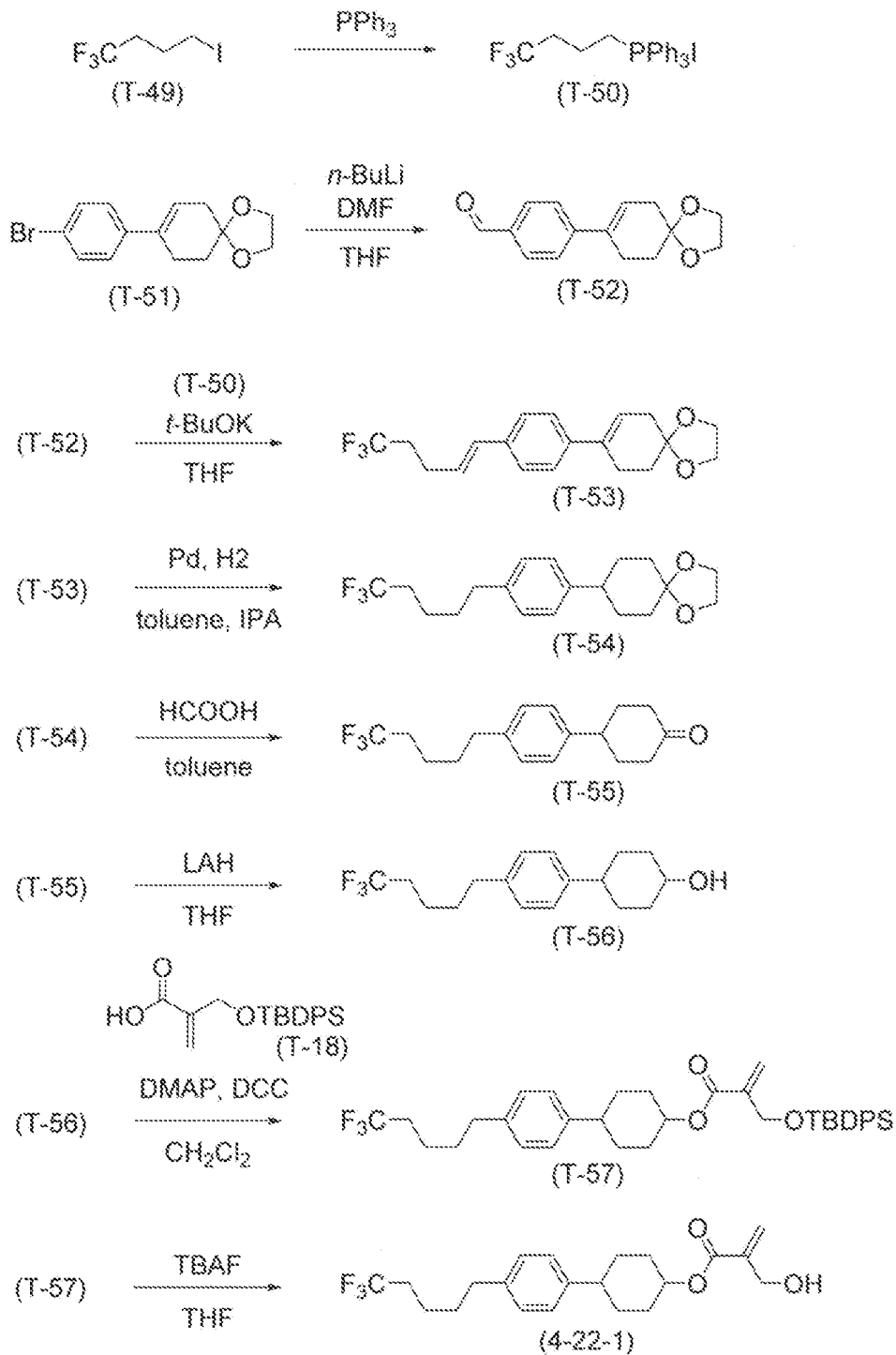
中間化合物（T-56）（4.83 g）、化合物（T-18）、N,N-ジメチルー4-アミノピリジン（D M A P）およびジクロロメタンを反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへN,N'-ジシクロヘキシルカルボジイミド（D C C）のジクロロメタン溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム（溶媒：ヘプタン／トルエン＝1／1（容量比））を通して精製することで、中間化合物（T-57）（8.41 g、収率84%）を得た。なお、合成スキーム中の「O T B D P S」はt-ブチルジフェニルシリルオキシ基である。

[0201] 第8工程

中間化合物（T-57）（8.41 g）およびT H Fを反応器に入れて、0℃に冷却した。そこへテトラブチルアンモニウムフルオリド（T B A F、1.00 M、T H F溶液）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ1時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルカラム（溶媒：トルエン／酢酸エチル＝9

／ 1（容量比））を通して精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製することで、極性化合物（4-22-1）（3.22g、収率62%）を得た。

[0202] [化76]



[0203] 得られた極性化合物（4-22-1）のNMR分析値は以下のとおりである。

^1H -NMR：化学シフト δ （ppm； CDCl_3 ）：7.13（d， $J=8.2\text{ Hz}$ ，2H）、7.10（d， $J=8.2\text{ Hz}$ ，2H）、6.26（s，1H）、5.82（d， $J=1.1\text{ Hz}$ ，1H）、4.92-4.87（m，1H）、4.34（d， $J=6.7\text{ Hz}$ ，2H）、2.60（t， $J=7.3\text{ Hz}$ ，2H）、2.54-2.49（m，1H）、2.31（t， $J=6.5\text{ Hz}$ ，1H）、2.15-2.04（m，4H）、1.98-1.96（m，2H）、1.66-1.52（m，8H）。

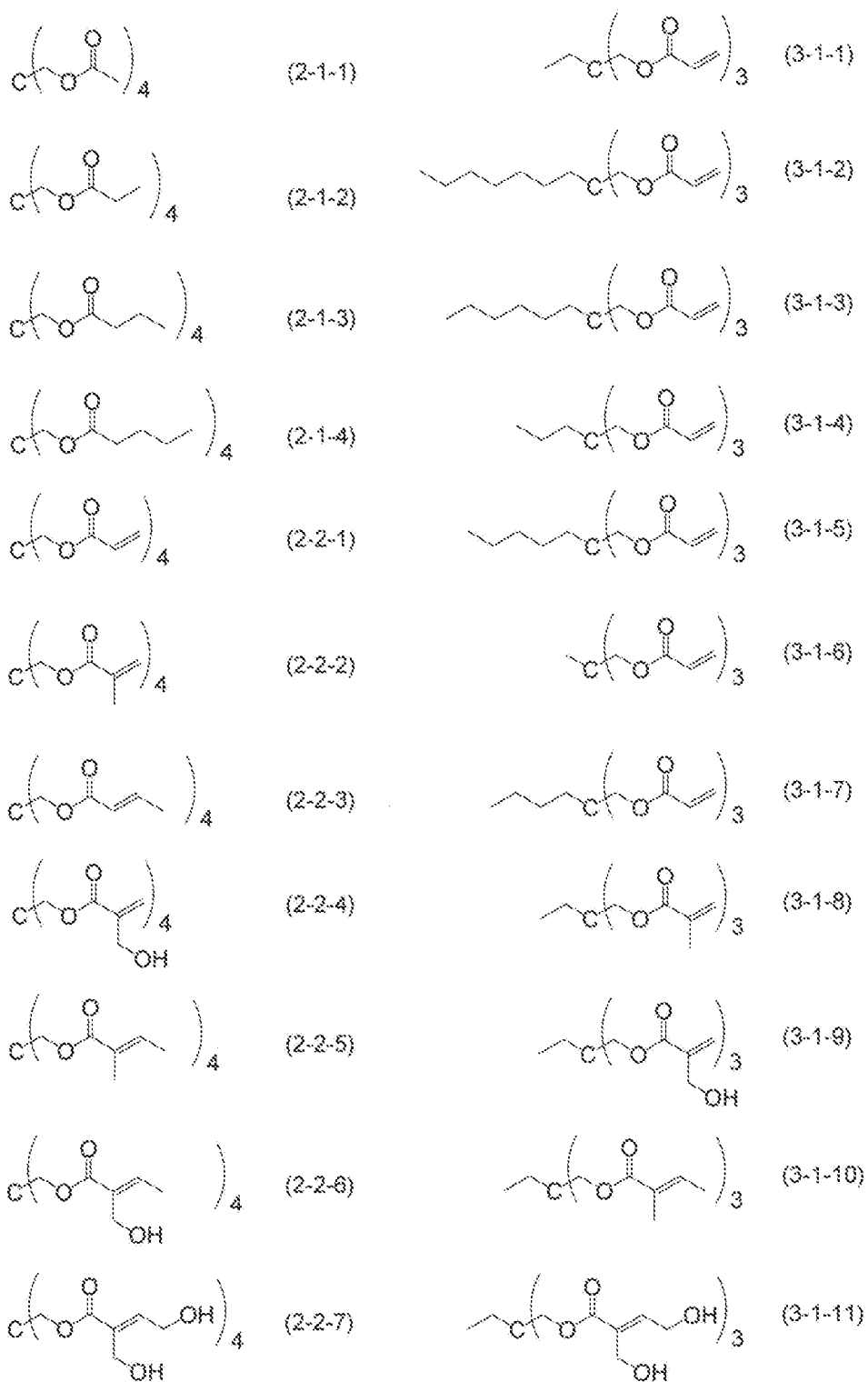
[0204] 極性化合物（4-22-1）の物性は以下のとおりであった。

転移温度： $C\ 62.0\ ^\circ\text{C}$ 。

[0205] 上述した合成例に記載された合成方法に準じて、以下に示す化合物（2-1-1）～（2-1-4）、化合物（2-2-1）～（2-2-7）および化合物（3-1-1）～（3-1-11）を合成することができる。

[0206]

[化77]



[0207] <低分子極性化合物の順相逆相C V 積>

順相逆相C V 積とは、ある1つの分子内にどの程度の極性基および無極性

基が存在しているかを数値化したものであり、強い極性基および強い無極性基が共存した化学構造を有する化合物はこの値が大きくなり、分子全体が中性的な化学構造を有する化合物は低くなる。

[0208] 順相逆相C V積は、当該化合物を順相および逆相のT L Cで展開し、それぞれのR f 値（試料の展開距離／移動層の展開距離）の逆数C V値（1／R f）の積として測定される。順相のT L Cで測定した際にR f 値が小さい化合物は極性基を有しており、逆相のT L Cで測定した際にR f 値が小さい化合物は無極性基を有している。この2つの特性は1つの化合物で同時に満たされることもあり、どちらも満たさないこともある。標準の測定方法として、順相のT L C測定では、メルク社製のT L C（シリカゲル 60 F 2 5 4）を用い、トルエンと酢酸エチルの混合溶媒（容積比で4：1）で展開させ、逆相のT L C測定では、メルク社製のT L C（シリカゲル 60 R P - 1 8 F 2 5 4 s）を用い、メタノールで展開させた。

$$\text{順相逆相C V積} = 1 / R_f(p) \times 1 / R_f(n)$$

R f（p）：順相でのR f 値

R f（n）：逆相でのR f 値

[0209] なお、トルエンと酢酸エチルの混合溶媒やメタノールで展開させることが難しい極性化合物の場合は、上記方法で展開できる比較的極性の近い極性化合物をリファレンスとして、上記溶媒では展開できない化合物と同時に、他の展開しやすい溶媒で展開させて、その際のR f 値の比から換算することにより上記溶媒で展開できない極性化合物であってもR f 値を求めることができる。例えば、上記溶媒では展開できない化合物の展開幅がリファレンス化合物の2倍であった場合は、リファレンス化合物を本来の方法で測定したR f 値の2倍が上記溶媒では展開できない化合物のR f 値となる。

[0210]

[表1]

低分子 極性化合物	Rf(p)	Rf(n)	1/Rf(p)	1/Rf(n)	順相逆相CV値
2-1-1	0.26	0.65	3.83	1.18	4.52
2-2-1	0.56	0.90	1.78	1.11	1.98
3-1-1	0.68	0.82	1.48	1.22	1.81
3-1-2	0.73	0.70	1.37	1.43	1.86
4-11-1	0.81	0.40	1.24	2.52	3.12
4-21-1	0.60	0.46	1.68	2.18	3.66
4-22-1	0.46	0.71	2.17	1.41	3.06

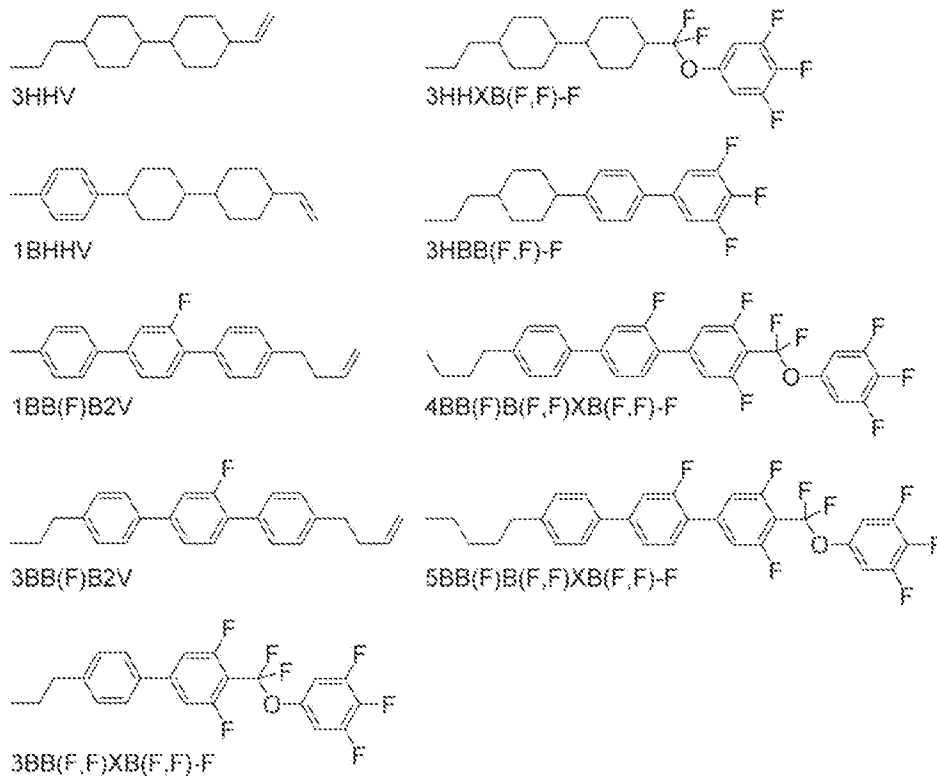
[0211] <液晶組成物 (i) の調製>

液晶組成物 (i) を以下の成分割合で混合することにより調製した。

- ・ 3 H H V 2 3 重量%
- ・ 1 B H H V 5 重量%
- ・ 1 B B (F) B 2 V 6 重量%
- ・ 3 B B (F) B 2 V 5 重量%
- ・ 3 B B (F, F) X B (F, F) - F 1 2 重量%
- ・ 3 H H X B (F, F) - F 2 4 重量%
- ・ 3 H B B (F, F) - F 1 1 重量%
- ・ 4 B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F 7 重量%
- ・ 5 B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F 7 重量%

[0212]

[化78]



[0213] <実施例 1>

極性化合物（3-1-2）が3重量%となるように液晶組成物（i）に溶解させ、本発明の液晶組成物（1）を得た。

$N I = 80.6^{\circ}C$; $\eta = 18.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.123$; $\Delta \varepsilon = 10.3$.

[0214] 得られた液晶組成物（1）をセル（上面：ベアガラス、下面：ITOパターンニングガラス、セルギャップ $5 \mu\text{m}$ 、電極間距離 $5 \mu\text{m}$ かつ電極幅 $5 \mu\text{m}$ の櫛歯状電極）に毛管力で注入した。なお、セルのガラス基板は配向処理を施していない。このセルをクロスニコルにした2枚の偏光板に挟み、セルを回転させながら目視および偏光顕微鏡で観察した。その結果、45度周期で明暗を繰り返すことからホモニアス配向であることを確認した。

[0215] このセルをノーマリーブラックになるように偏光板で挟んで素子を作製し、0Vから11Vまで電圧（60Hz、矩形波）をかけた。この際に素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量の変化を測定して、電圧一透

過率曲線（図 1）を得た。

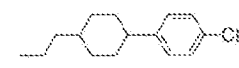
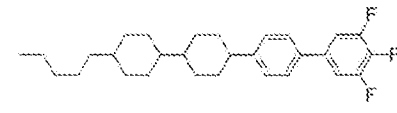
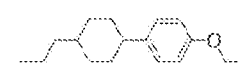
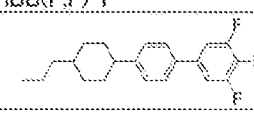
[0216] <実施例 2 ～ 8>

極性化合物（3-1-2）を他の極性化合物に変更した以外は実施例 1 に準じて、本発明の液晶組成物（2）～（8）を調製した。各液晶組成物について、実施例 1 と同様に偏光顕微鏡で観察した結果、ホモジニアス配向であることを確認した。また、作製した素子から電圧と透過率を測定して透過光量が大きく変化することを確認した。

[0217] さらに、実施例 1 に準じて、本発明の液晶組成物（9）～（19）を調製した。各液晶組成物について、実施例 1 と同様に偏光顕微鏡で観察した結果、ホモジニアス配向であることを確認した。また、作製した素子から電圧と透過率を測定して透過光量が大きく変化することを確認した。液晶組成物（9）～（19）における化合物は、下記の表 2 の定義に基づいて記号により表した。表 2 において、1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。液晶性化合物の割合（百分率）は、液晶組成物の全重量に基づいた重量百分率（重量％）である。最後に、組成物の物性値をまとめた。物性は、先に記載した方法にしたがって測定し、測定値を外挿することなくそのまま記載した。

[0218]

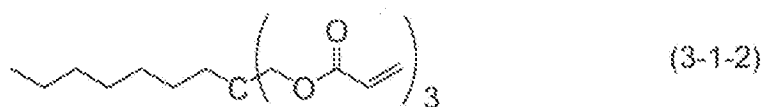
[表2]

表2 記号を用いた化合物の表記法 $R-(A_1)-Z_1-\cdots-Z_n-(A_n)-R'$			
1) 左末端基 $R-$	記号	4) 環構造 $-A_n-$	記号
$C_nH_{2n+1}-$	$n-$		H
$C_nH_{2n+1}O-$	$nO-$		B
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}-$	$mOn-$		B(F)
$CH_2=CH-$	$V-$		B(2F)
$C_nH_{2n+1}-CH=CH-$	$nV-$		B(F,F)
$CH_2=CH-C_nH_{2n}-$	$Vn-$		B(2F,5F)
$C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-$	$mVn-$		B(2F,3F)
$CF_2=CH-$	$VFF-$		Py
$CF_2=CH-C_nH_{2n}-$	$VFFn-$		G
2) 右末端基 $-R'$	記号		ch
$-C_nH_{2n+1}$	$-n$		
$-OC_nH_{2n+1}$	$-On$		
$-COOCH_3$	$-EMe$		
$-CH=CH_2$	$-V$		
$-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	$-Vn$		
$-C_nH_{2n}-CH=CH_2$	$-nV$		
$-C_mH_{2m}-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	$-mVn$		
$-CH=CF_2$	$-VFF$		
$-F$	$-F$		
$-Cl$	$-Cl$		
$-OCF_3$	$-OCF_3$		
$-OCF_2H$	$-OCF_2H$		
$-CF_3$	$-CF_3$		
$-OCH=CH-CF_3$	$-OVCF_3$		
$-C\equiv N$	$-C$		
3) 結合基 $-Z_n-$	記号		
$-C_nH_{2n}-$	n		
$-COO-$	E		
$-CH=CH-$	V		
$-CH_2O-$	IO		
$-OCH_2-$	OI		
$-CF_2O-$	X		
$-C\equiv C-$	T		
5) 表記例			
例1 2-HB-Cl		例2 5-HHBB(F,F)-F	
			
例3 3-HB-O2		例4 3-HBB(F,F)-F	
			

2-HB-C	7%
3-HB-C	5%
3-HB-O2	12%
2-BTB-1	6%
3-HHB-F	5%
3-HHB-1	7%
3-HHB-O1	7%
3-HHB-3	13%
3-HHEB-F	5%
5-HHEB-F	5%
2-HHB(F)-F	7%
3-HHB(F)-F	7%
5-HHB(F)-F	7%
3-HHB(F, F)-F	7%

上記の組成物に下記の化合物（3-1-2）を3重量%の割合で添加した。

[化79]



$N_I = 105.7^\circ\text{C}$; $\eta = 19.4 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.104$; $\Delta \epsilon = 4.4$.

[0220] [液晶組成物10]

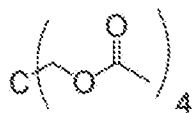
3-HB-CL	15%
3-HB-O2	12%
3-HHB(F, F)-F	6%
3-HBB(F, F)-F	30%
5-HBB(F, F)-F	25%

5-HBB (F) B-2 6%

5-HBB (F) B-3 6%

上記の組成物に下記の化合物 (2-1-1) を 2 重量%の割合で添加した。
。

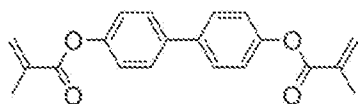
[化80]



(2-1-1)

さらに下記の化合物 (RM-1) を 0.3 重量%の割合で添加した。

[化81]



(RM-1)

$n_D = 1.5070$; $\eta = 22.3 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.125$; $\Delta \varepsilon = 6.1$.

[0221] [液晶組成物 11]

7-HB (F, F) -F 5%

3-HB-O2 8%

2-HHB (F) -F 10%

3-HHB (F) -F 10%

5-HHB (F) -F 11%

2-HBB (F) -F 7%

3-HBB (F) -F 8%

5-HBB (F) -F 14%

2-HBB-F 4%

3-HBB-F 4%

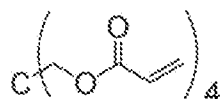
5-HBB-F 3%

3-HBB (F, F) -F 8%

5-HBB (F, F) - F 8%

上記の組成物に下記の化合物 (2-2-1) を 2 重量%の割合で添加した。
。

[化82]



(2-2-1)

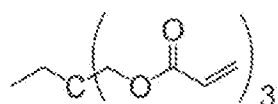
$n_I = 81.9^\circ\text{C}$; $\eta = 23.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.111$; $\Delta \varepsilon = 5.4$.

[0222] [液晶組成物 1 2]

5-HB-CL	18%
3-HHB-F	10%
3-HHB-CL	5%
4-HHB-CL	4%
3-HHB (F) - F	12%
4-HHB (F) - F	9%
5-HHB (F) - F	9%
7-HHB (F) - F	8%
5-HBB (F) - F	4%
1O1-HBBH-5	3%
3-HHBB (F, F) - F	4%
4-HHBB (F, F) - F	3%
5-HHBB (F, F) - F	4%
3-HH2BB (F, F) - F	4%
4-HH2BB (F, F) - F	3%

上記の組成物に下記の化合物 (3-1-1) を 3 重量%の割合で添加した。
。

[化83]



(3-1-1)

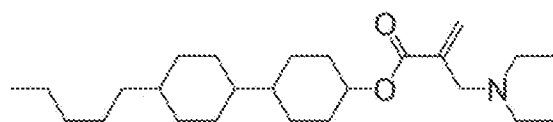
$n_D = 1.25$, 20°C ; $\eta = 26.4 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.104$; $\Delta \epsilon = 4.9$.

[0223] [液晶組成物 13]

3-HHB (F, F) - F	8%
3-H ₂ HB (F, F) - F	8%
4-H ₂ HB (F, F) - F	8%
5-H ₂ HB (F, F) - F	9%
3-HBB (F, F) - F	17%
5-HBB (F, F) - F	19%
3-H ₂ BB (F, F) - F	12%
5-HHBB (F, F) - F	5%
5-HHEBB - F	2%
3-HH ₂ BB (F, F) - F	4%
1O1-HBBH-4	4%
1O1-HBBH-5	4%

上記の組成物に下記の化合物 (4-11-1) を 1 重量%の割合で添加した。

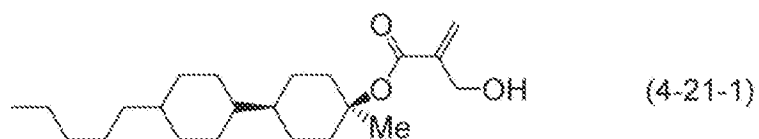
[化84]



(4-11-1)

さらに下記の化合物 (4-21-1) を 2 重量%の割合で添加した。

[化85]



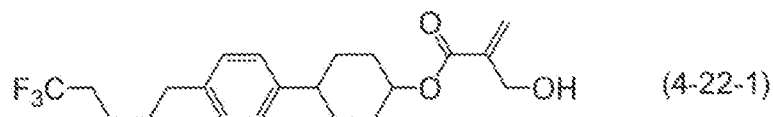
$N_I = 102.2^\circ\text{C}$; $\eta = 36.2 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.117$; $\Delta \varepsilon = 8.9$.

[0224] [液晶組成物14]

5-HB-F	12%
6-HB-F	9%
7-HB-F	7%
2-HHB-OCF ₃	9%
3-HHB-OCF ₃	5%
4-HHB-OCF ₃	7%
5-HHB-OCF ₃	7%
3-HH ₂ B-OCF ₃	5%
5-HH ₂ B-OCF ₃	4%
3-HHB(F, F)-OCF ₂ H	5%
3-HHB(F, F)-OCF ₃	3%
3-HH ₂ B(F)-F	3%
3-HBB(F)-F	8%
5-HBB(F)-F	8%
5-HBBH-3	5%
3-HB(F)BH-3	3%

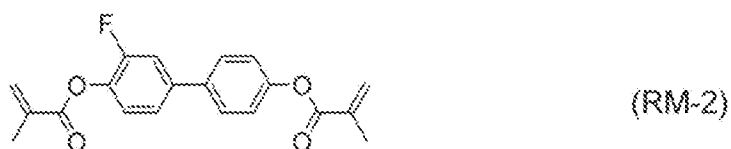
上記の組成物に下記の化合物(4-22-1)を1重量%の割合で添加した。

[化86]



さらに下記の化合物（RM-2）を0.3重量%の割合で添加した。

[化87]



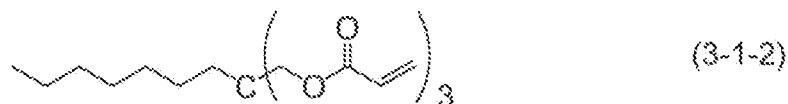
$N I = 89.3^{\circ}C$; $\eta = 14.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.092$; $\Delta \varepsilon = 4.2$.

[0225] [液晶組成物15]

5-HB-CL	13%
3-HHB-1	7%
3-HHB (F, F) - F	8%
3-HBB (F, F) - F	20%
5-HBB (F, F) - F	16%
3-HHEB (F, F) - F	12%
4-HHEB (F, F) - F	5%
5-HHEB (F, F) - F	4%
2-HBEB (F, F) - F	4%
3-HBEB (F, F) - F	3%
5-HBEB (F, F) - F	3%
3-HHBB (F, F) - F	5%

上記の組成物に下記の化合物（3-1-2）を2重量%の割合で添加した。

[化88]



$N_I = 80.5^\circ\text{C}$; $\eta = 25.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.106$; $\Delta \varepsilon = 9.2$.

[0226] [液晶組成物 16]

3-HB-CL	3%
5-HB-CL	5%
3-HHB-OCF ₃	6%
3-H ₂ HB-OCF ₃	5%
5-H ₄ HB-OCF ₃	15%
V-HHB(F)-F	6%
3-HHB(F)-F	5%
5-HHB(F)-F	6%
3-H ₄ HB(F, F)-CF ₃	8%
5-H ₄ HB(F, F)-CF ₃	10%
5-H ₂ HB(F, F)-F	3%
5-H ₄ HB(F, F)-F	7%
2-H ₂ BB(F)-F	5%
3-H ₂ BB(F)-F	10%
3-HBEB(F, F)-F	6%

上記の組成物に下記の化合物(2-1-1)を2重量%の割合で添加した。

[化89]



$N I = 72.8^{\circ}\text{C}$; $\eta = 26.1 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.098$; $\Delta \varepsilon = 8.5$.

[0227] [液晶組成物 17]

5-HB-CL	19%
7-HB(F, F)-F	5%
3-HB-O2	17%
3-HHB-1	12%
3-HHB-O1	8%
2-HHB(F)-F	6%
3-HHB(F)-F	7%
5-HHB(F)-F	7%
3-HHB(F, F)-F	8%
3-H ₂ HB(F, F)-F	6%
4-H ₂ HB(F, F)-F	5%

上記の組成物に下記の化合物(2-2-1)を1重量%の割合で添加した。

[化90]



さらに下記の化合物(3-1-1)を1重量%の割合で添加した。

[化91]



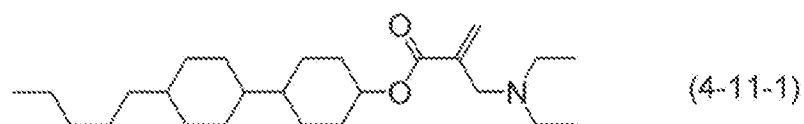
$N I = 73.0^{\circ}\text{C}$; $\eta = 17.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.081$; $\Delta \varepsilon = 3.5$.

[0228] [液晶組成物 18]

5-HB-CL	5%
7-HB(F)-F	7%
3-HB-O2	16%
3-HHEB-F	10%
5-HHEB-F	10%
3-HHEB(F, F)-F	12%
4-HHEB(F, F)-F	7%
3-GHB(F, F)-F	6%
4-GHB(F, F)-F	8%
5-GHB(F, F)-F	8%
2-HHB(F, F)-F	5%
3-HHB(F, F)-F	6%

上記の組成物に下記の化合物（4-11-1）を1重量%の割合で添加した。

[化92]



$n_D = 1.470$; 4°C ; $\eta = 26.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.074$; $\Delta \varepsilon = 7.8$.

[0229] [液晶組成物19]

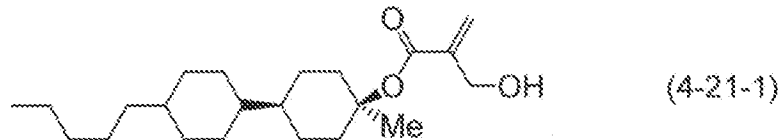
1V2-BEB(F, F)-C	15%
3-HB-C	20%
2-BTB-1	13%
3-HHB-1	7%
VFF-HHB-1	10%
VFF2-HHB-1	14%
3-H2BTB-2	8%

3-H2BTB-3 7%

3-H2BTB-4 6%

上記の組成物に下記の化合物（4-21-1）を2重量%の割合で添加した。

[化93]



$N_I = 94.1^\circ\text{C}$; $\eta = 23.0 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta n = 0.168$; $\Delta \varepsilon = 13.6$.

[0230] [液晶組成物20]

3-HH-V 36%

3-HH-V1 9%

3-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F 2%

4-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F 10%

5-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F 9%

V2-HHB-1 11%

3-HBBXB(F,F)-F 7%

4-GB(F)B(F,F)XB(F,F)-F 6%

5-GB(F)B(F,F)XB(F,F)-F 5%

3-GB(F,F)XB(F,F)-F 5%

上記の組成物に下記の化合物（2-2-1）を2重量%の割合で添加した。

[化94]



$N_I = 86.7^\circ\text{C}$; $\eta = 13.1 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta n = 0.108$; $\Delta \varepsilon =$

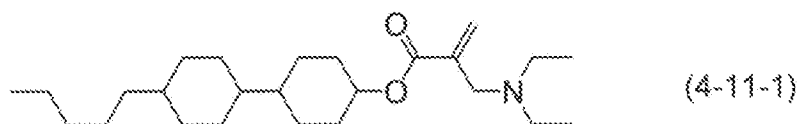
1 1 . 9 .

[0231] [液晶組成物 2 1]

3-HH-V	23%
3-HH-V1	5%
2-HH-3	7%
3-HB-O2	5%
3-GB(F, F)XB(F, F)-F	4%
3-BB(F, F)XB(F, F)-F	9%
2-HHB-1	3%
3-HHB-1	6%
2-BB(F)B-3	4%
3-HHB-O1	2%
3-HHBB(F, F)-F	4%
4-HHBB(F, F)-F	3%
4-GB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	2%
3-BB(F, F)XB(F)B(F, F)-F	5%
V-HHB-1	14%
V2-HHB-1	4%

上記の組成物に下記の化合物(4-11-1)を1重量%の割合で添加した。

[化95]



$$N_I = 91.2^\circ\text{C}; \Delta n = 0.099; \Delta \varepsilon = 4.8.$$

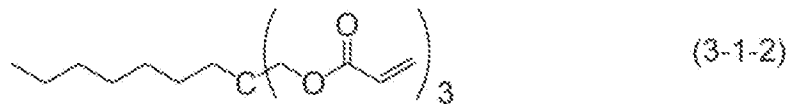
[0232] [液晶組成物 2 2]

3-HH-V	35%
3-HH-V1	5%

1 V 2 - H H - 3	4 %
3 - B B (F , F) X B (F , F) - F	1 2 %
V - H H B - 1	1 4 %
V 2 - H H B - 1	1 0 %
2 - B B (F) B - 3	4 %
4 - G B (F) B (F , F) X B (F , F) - F	2 %
3 - H B B (F , F) X B (F , F) - F	5 %
3 - H B B X B (F , F) - F	9 %

上記の組成物に下記の化合物（3-1-2）を3重量%の割合で添加した。

[化96]



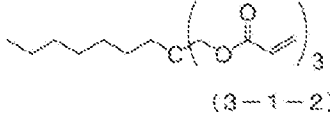
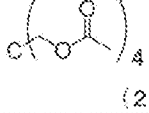
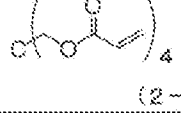
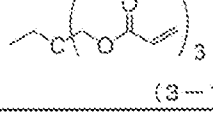
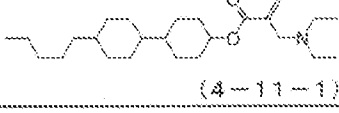
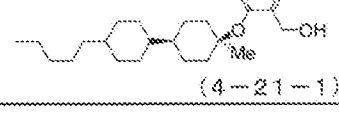
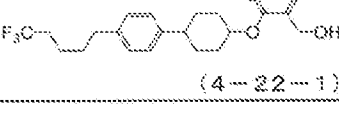
$N I = 90.5^{\circ}C ; \eta = 11.0 \text{ mPa} \cdot \text{s} ; \Delta n = 0.100 ; \Delta \varepsilon = 4.6.$

[0233] <比較例1>

極性化合物を添加しないで液晶組成物（i）自体を比較の液晶組成物（C1）とした。この液晶組成物について、実施例1と同様に偏光顕微鏡で観察したところ、ホモジニアス配向は確認できなかった。

[0234] 以下に、液晶組成物（1）～（8）について、使用した極性化合物、その順相逆相C V積、液晶組成物中の含有量（重量%）、総順相逆相C V積、および総順相逆相C V積を基板の表面自由エネルギーで割った値を示す。

[表3]

液晶組成物	極性化合物	順相逆相CV積	含有量	総順相逆相CV積	総順相逆相CV積／表面自由エネルギー	
					ベアガラス	ITO ガラス
1	 (3-1-2)	1.96	3	0.059	0.173	0.167
2	 (2-1-1)	4.52	2	0.090	0.268	0.257
3	 (2-2-1)	1.98	2	0.040	0.116	0.112
4	 (3-1-1)	1.81	3	0.054	0.159	0.154
5	 (4-11-1)	3.12	1	0.031	0.092	0.089
7	 (4-21-1)	3.66	3	0.110	0.323	0.312
8	 (4-22-1)	3.06	1	0.031	0.090	0.087

[0235] 総順相逆相C V積とは、極性化合物の順相逆相C V積と液晶組成物中の極性化合物の含有量（重量％）との積（順相逆相C V積×含有量／100）であり、液晶組成物中に複数種の極性化合物が含まれる場合は各極性化合物についての総順相逆相C V積の総和であり、液晶組成物中に存在する極性化合物の順相逆相C V積の総和を意味する。また、使用したベアガラスおよびITOパターニングガラスの表面自由エネルギーはそれぞれ0.340 N/mおよび0.352 N/mであるため、上記表ではそれぞれの値を用いて計算した。実施例1～8で用いた液晶組成物を挟み込む両基板の表面自由エネルギーはほぼ同じであるため、総順相逆相C V積と基板の表面自由エネルギーとの比（総順相逆相C V積／表面自由エネルギー）は表3に示すように狭い

特定の範囲で規定される。

[0236] 基板の表面自由エネルギーは、通常用いられている Owens-Wendt の方法により、基板に対する液体の接触角から算出することができる。通常、形成する液滴の接触角を用いた表面自由エネルギーの測定では、通常少なくとも 2 種の液体を用い、該二種の液体としては、極性の高い液体と、極性の低い液体とを用いることが好ましいことが既に知られており、該極性の高い液体としては水が、極性の低い液体としては、ジヨードメタンが使用される。内径 0.05 ~ 0.3 mm、外径 0.2 ~ 0.6 mm のパイプを用いて、液体を基板に静かに滴下し、液滴を形成させ、これをビデオに収録し、その時の前進時の接触角（液滴の形成時の接触角）と後退時の接触角（液滴の消滅時の接触角）を計測し、次の式に基づいて、算出する。

[0237] 液体 1 を滴下した場合、接触角 θ が 90 度以下の場合には、液滴の高さを h 、液滴の接地円の直径を ϕ 、又、 $x = \phi / 2$ とすれば、この液体の θ_1 は以下の式（1-1）で算出される。

$$\theta = 2 \tan^{-1} (h / x) \cdots \cdots \text{式 (1-1)}$$

[0238] 液体 1 を滴下した場合、接触角 θ が 90 度以上の場合には、この液体の θ_1 は以下の式（1-2）で算出される。

$$\theta = 90 + \cos^{-1} (\phi h / h^2 + x^2) \cdots \cdots \text{式 (1-2)}$$

[0239] この様に測定する θ において、前進時の θ_a と後退時の θ_r より、その液体のその固体表面に対する θ_1 を次式によって求める。

$$\theta_1 = \cos^{-1} ((\cos \theta_a + \cos \theta_r) / 2)$$

[0240] 液体 2 についても、同様に θ_2 を算出し、接着仕事を表す次の式（2-1）に代入して、 γ_{sd} （固体の表面自由エネルギーの分散力成分）と γ_{sp} （固体の表面自由エネルギーの極性力成分）を未知数とする 2 つの方程式を作成し、この連立方程式を解くことにより、この γ_{sd} と γ_{sp} が得られる。ここで、 γ （液体）、 γ （液体） s 、 γ （液体） p は液体の固有値であり、既知の値である。

$$\gamma \text{ (液体)} (1 + \cos \theta) = 2 (\gamma_{sd} \cdot \gamma \text{ (液体)} d)^{1/2} + 2 (\gamma \text{ (液体)} p \cdot \gamma \text{ (液体)} s)^{1/2}$$

$$\gamma_{sp} \cdot \gamma_{(液体)p} / 2 \cdots \cdots \text{式 (2-1)}$$

[0241] γ 、 γ_{sd} 、 γ_{sp} には次の式(2-2)の関係が存するので、求められた γ_{sd} と γ_{sp} の和を求めることにより、固体の表面自由エネルギーを算出することができる。

$$\gamma = \gamma_{sd} + \gamma_{sp} \cdots \cdots \text{式 (2-2)}$$

[0242] このようにして、前記の2種の液体を用いて、接触角を計測し、基板表面の表面自由エネルギーを測定すると、部位差が少なく、且つ、再現性良く、表面自由エネルギーを計測することができる。

[0243] また、表面自由エネルギーが非常に大きい基板の場合はOwens-Wendtの方法を用いることが難しい場合があるので、その場合はDietzelの式により表面張力を算出して、それを表面自由エネルギーとすることができる。Dietzelの式を以下に示す。

$$\gamma = M_1 F_1 + M_2 F_2 + \cdots + M_i F_i$$

γ : 表面張力

M_i : i 成分のモル%、 F_i : 表面張力係数

なお、表面張力係数は各成分物質の固有値であり、既知の値である。

[0244] 実施例1～8で用いた各基板の表面自由エネルギー γ をDietzelの式を用いて計算した。

$$\text{ベアガラスの } \gamma = 0.340 \text{ N/m}$$

$$\text{ITOパターニングガラスの } \gamma = 0.352 \text{ N/m}$$

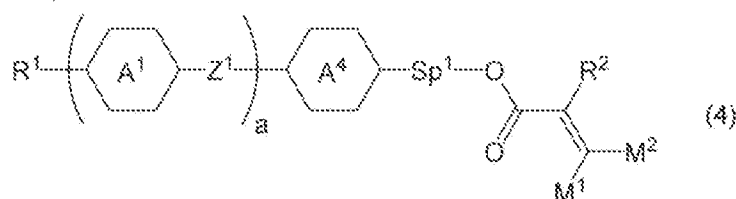
産業上の利用可能性

[0245] 添加剤により液晶媒体をホモジニアス配向させることができる技術はこれまでになく、本願発明の好ましい態様によれば特定の低分子極性化合物を添加するだけで液晶媒体をホモジニアス配向させることができ、従来の配向膜や配向処理を不要とすることができる。この結果、例えばFFSなどの横電界を用いるモードのポリイミドレス化が可能となる。

請求の範囲

[請求項1] 配向処理または配向膜を施されておらず、かつ少なくとも一方に透明電極が形成された一対の基板の間に封入される液晶媒体であって、当該液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる下記一般式（4）で表される低分子極性化合物を含有し、基板に対して自発的にホモジニアス配向する、液晶媒体。

[化1]



上記式（4）中、

R^1 は炭素数1～15のアルキルであり、この R^1 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は独立して $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環 A^1 および環 A^4 は、独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、アントラセン-2,6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイル、または2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイルであり、これらの環において、少

なくとも1つの水素は、独立して、フッ素、塩素、炭素数1～12のアルキル、炭素数2～12のアルケニル、炭素数1～11のアルコキシ、または炭素数2～11のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z^1 は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Z^1 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

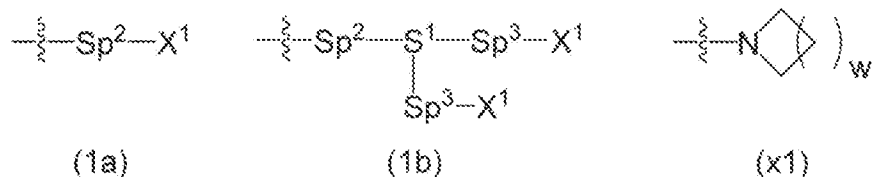
Sp^1 は単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Sp^1 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

M^1 および M^2 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルであり；

a は0、1、2、3、または4であり；

R^2 は、下記一般式(1a)または一般式(1b)で表される基であり：

[化2]



上記式 (1 a) および式 (1 b) 中、

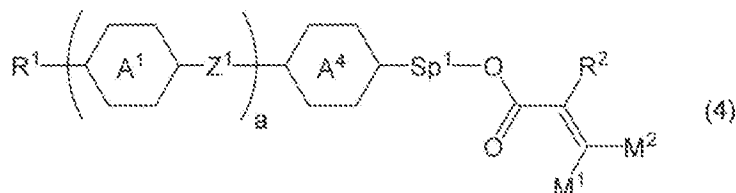
Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数 1 ～ 10 のアルキレンであり、この Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも 1 つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

S^1 は、 $>CH-$ または $>N-$ であり；

X^1 は、独立して、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、上記一般式 (x 1) で表される基、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで R^3 は水素または炭素数 1 ～ 10 のアルキルであり、この R^3 において、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、 X^1 において少なくとも 1 つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、上記一般式 (x 1) 中の w は 1、2、3 または 4 である。

[請求項2] 液晶媒体を基板に対してホモジニアス配向させる、下記一般式 (4) で表されることを特徴とする、低分子極性化合物。

[化3]



上記式 (4) 中、

R^1 は炭素数 1 ～ 15 のアルキルであり、この R^1 において、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は独立して $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=$

CH—または—C≡C—で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

環A¹および環A⁴は、独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、フルオレン-2, 7-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、アントラセン-2, 6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、または2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、独立して、フッ素、塩素、炭素数1~12のアルキル、炭素数2~12のアルケニル、炭素数1~11のアルコキシ、または炭素数2~11のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z¹は独立して単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、このZ¹において、少なくとも1つの—CH₂—は、独立して、—O—、—CO—、—COO—、—OCO—、または—OCOO—で置き換えられてもよく、少なくとも1つの—(CH₂)₂—は独立して—CH=CH—または—C≡C—で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Sp¹は単結合または炭素数1~10のアルキレンであり、このSp¹において、少なくとも1つの—CH₂—は、独立して、—O—、—CO—、—COO—、—OCO—、または—OCOO—で置き換えられてもよく、少なくとも1つの—(CH₂)₂—は独立して—CH

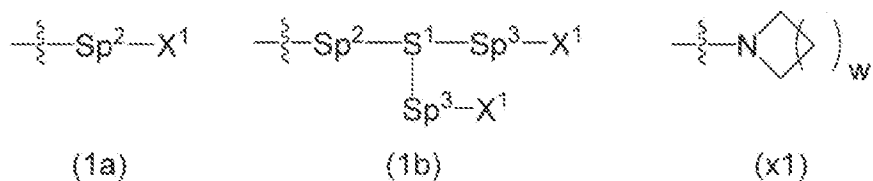
=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

M¹およびM²は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルであり；

aは0、1、2、3、または4であり；

R²は、下記一般式(1a)または一般式(1b)で表される基であり：

[化4]



上記式(1a)および式(1b)中、

Sp²およびSp³は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、このSp²およびSp³において、少なくとも1つの-CH₂-は、独立して、-O-、-NH-、-CO-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は独立して-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

S¹は、>CH-または>N-であり；

X¹は、独立して、-OH、-NH₂、-OR³、-N(R³)₂、上記一般式(x1)で表される基、-COOH、-SH、-B(OH)₂、または-Si(R³)₃で表される基であり、ここでR³は水素または炭素数1～10のアルキルであり、このR³において、少なくとも1つの-CH₂-は-O-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は-CH=CH-で置き換えられてもよく、X¹

において少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、
上記一般式 (× 1) 中のwは1、2、3または4である。

[請求項3] 1. 3以上の順相逆相C V積を有することを特徴とする、請求項2
に記載の低分子極性化合物。

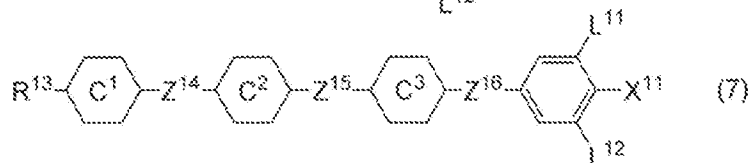
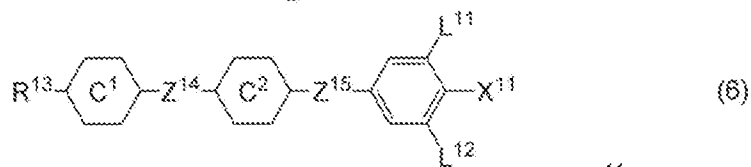
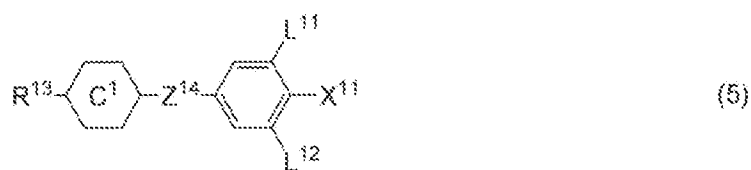
[請求項4] 請求項2または3に記載の低分子極性化合物の少なくとも1つを含有
することを特徴とする、液晶組成物。

[請求項5] 前記低分子極性化合物の順相逆相C V積とその含有量との積である
総順相逆相C V積が0.01以上であることを特徴とする、請求項4
に記載の液晶組成物。

[請求項6] 前記総順相逆相C V積と前記基板の表面自由エネルギーとの比（総
順相逆相C V積／表面自由エネルギー（N/m））が0.025～1
であることを特徴とする、請求項5に記載の液晶組成物。

[請求項7] さらに下記一般式 (5) ～ (7) のいずれかで表される液晶性化合物
の少なくとも1つを含有する、請求項4～6のいずれかに記載の液
晶組成物。

[化5]



上記式 (5) ～式 (7) 中、

R¹³は炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケ
ニルであり、このR¹³において、少なくとも1つの—CH₂—は—O

ーで置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

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

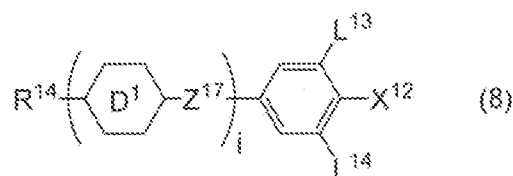
環 C^1 、環 C^2 および環 C^3 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

Z^{14} 、 Z^{15} および Z^{16} は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、または $-(CH_2)_4-$ であり；

L^{11} および L^{12} は独立して水素またはフッ素である。

[請求項8] さらに下記一般式(8)で表される液晶性化合物を含有する、請求項4～7のいずれかに記載の液晶組成物。

[化6]



上記式(8)中、

R^{14} は炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり、この R^{14} において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{12} は $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ であり；

環 D^1 は、1,4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレン、テトラヒドロピラ

ン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサ-2, 5-ジイル、または
ピリミジン-2, 5-ジイルであり；

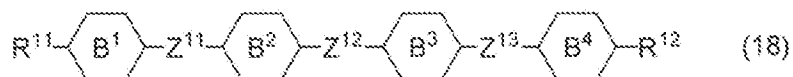
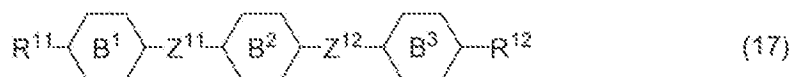
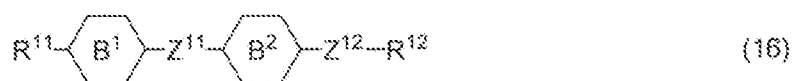
Z^{17} は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

L^{13} および L^{14} は独立して水素またはフッ素であり；

i は、1、2、3、または4である。

[請求項9] さらに下記一般式(16)～(18)のいずれかで表される液晶性化合物の少なくとも1つを含有する、請求項4～8のいずれかに記載の液晶組成物。

[化7]



上記式(16)～式(18)中、

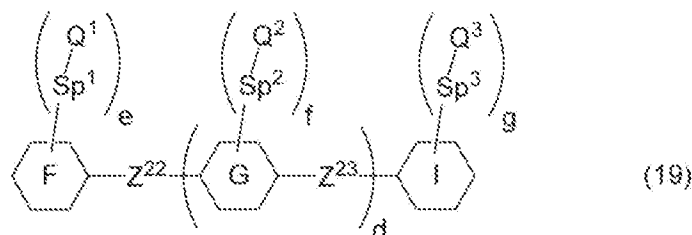
R^{11} および R^{12} は独立して炭素数1～10のアルキル、炭素数1～10のアルコキシ、炭素数2～10のアルコシアルキル、炭素数2～10のアルケニルまたはジフルオロビニルであり；

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

Z^{11} 、 Z^{12} および Z^{13} は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、または $-COO-$ である。

[請求項10] さらに下記一般式(19)で表される重合性化合物を含有する、請求項4～9のいずれかに記載の液晶組成物。

[化8]



上記式（１９）中、

環Fおよび環Iは独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、１－ナフチル、２－ナフチル、テトラヒドロピラン－２－イル、１，３－ジオキササン－２－イル、ピリミジン－２－イル、またはピリジン－２－イルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、独立して、ハロゲン、炭素数１～１２のアルキル、炭素数１～１２のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１～１２のアルキルで置き換えられてもよく；

環Gは、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－１，２－ジイル、ナフタレン－１，３－ジイル、ナフタレン－１，４－ジイル、ナフタレン－１，５－ジイル、ナフタレン－１，６－ジイル、ナフタレン－１，７－ジイル、ナフタレン－１，８－ジイル、ナフタレン－２，３－ジイル、ナフタレン－２，６－ジイル、ナフタレン－２，７－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキササン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、独立して、ハロゲン、炭素数１～１２のアルキル、炭素数１～１２のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１～１２のアルキルで置き換えられてもよく；

Z^{22} および Z^{23} は独立して単結合または炭素数１～１０のアルキレンであり、この Z^{22} および Z^{23} において、少なくとも１つの－C

H₂—は、独立して、—O—、—CO—、または—COO—で置き換えられてもよく、少なくとも1つの—CH₂CH₂—は、独立して、—CH=CH—、—C(CH₃)=CH—、または—C(CH₃)=C(CH₃)—で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Q¹、Q²およびQ³は独立して重合性基であり；

S p¹、S p²およびS p³は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、このS p¹、S p²およびS p³において、少なくとも1つの—CH₂—は、独立して、—O—、—COO—、—OCO—、または—OCOO—で置き換えられてもよく、少なくとも1つの—CH₂CH₂—は、独立して、—CH=CH—または—C≡C—で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

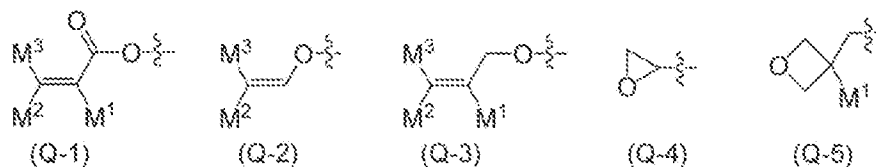
dは0、1、または2であり；

e、f、およびgは独立して0、1、2、3、または4であり、そしてe、f、およびgの和は1以上である。

[請求項11]

上記一般式(19)において、Q¹、Q²およびQ³が独立して下記一般式(Q-1)～(Q-5)のいずれかで表される重合性基である、請求項10に記載の液晶組成物。

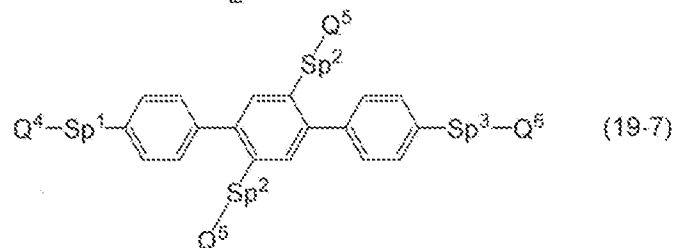
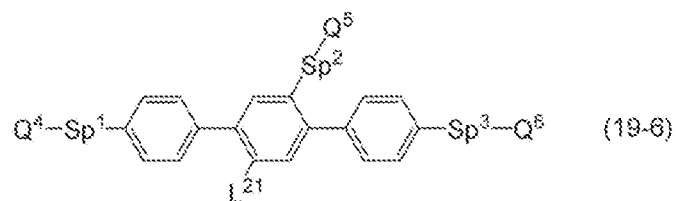
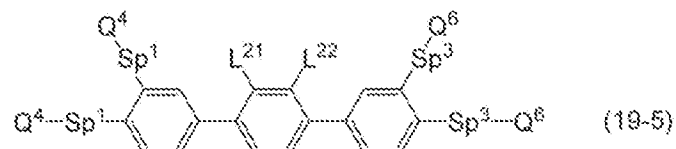
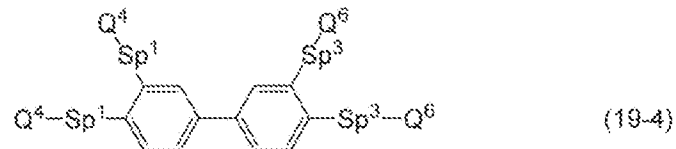
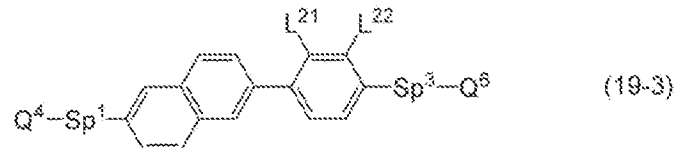
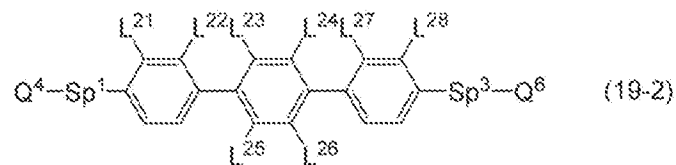
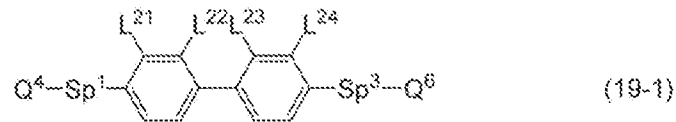
[化9]



上記式(Q-1)～式(Q-5)において、M¹、M²およびM³は独立して、水素、フッ素、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルである。

[請求項12] 前記一般式(19)で表される重合性化合物が、下記一般式(19-1)～(19-7)のいずれかで表される重合性化合物である、請求項10に記載の液晶組成物。

[化10]

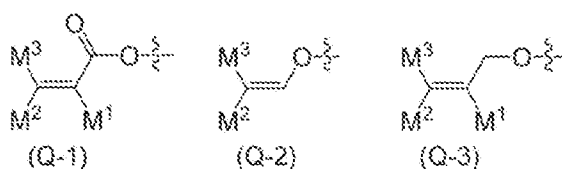


上記式(19-1)～式(19-7)中、
 L^{21} 、 L^{22} 、 L^{23} 、 L^{24} 、 L^{25} 、 L^{26} 、 L^{27} および L^{28} は独立して、水素、フッ素、またはメチルであり；

Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 は独立して単結合または炭素数1～10のアルキレンであり、この Sp^1 、 Sp^2 および Sp^3 において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、独立して、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は独立して $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において少なくとも1つの水素は独立してフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Q^4 、 Q^5 および Q^6 は独立して、下記一般式（Q-1）～式（Q-3）のいずれかで表される重合性基であり、ここで M^1 、 M^2 および M^3 は独立して、水素、フッ素、炭素数1～5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1～5のアルキルである。

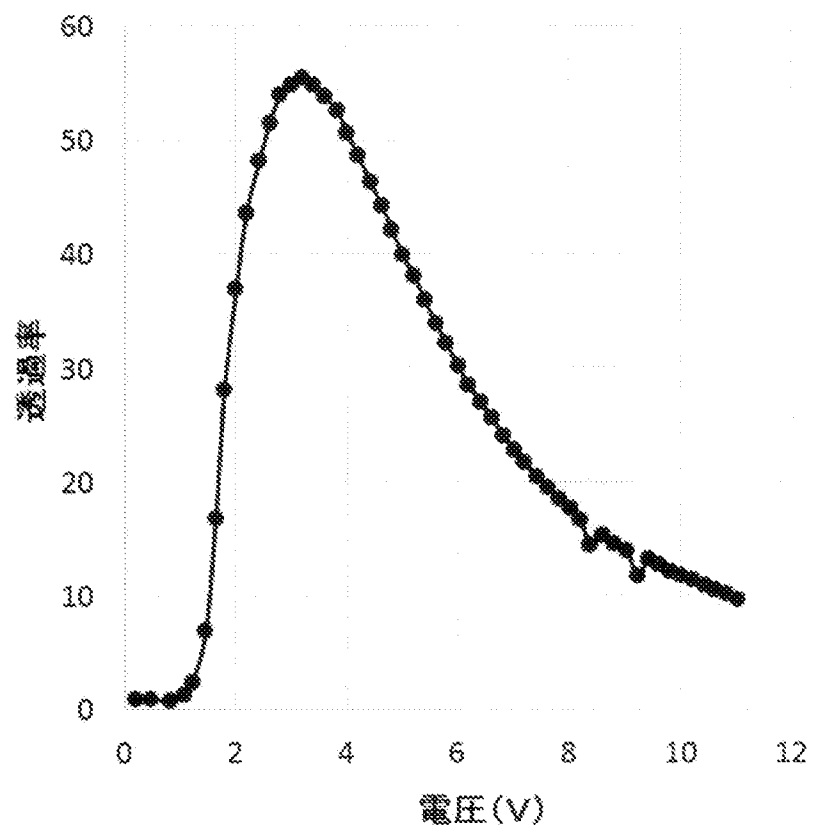
[化11]



[請求項13]

さらに、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤および消泡剤から選択される少なくとも1つを含有する、請求項4～12のいずれかに記載の液晶組成物。

[図1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/007042

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

See extra sheet.

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07C69/21, C07C69/54, C07C69/732, C07C229/30, C09K19/02, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/56, G02F1/13, G02F1/1337

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2017
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2017 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2017

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamIII) Keyword: EKISHO, HOMOJINIASU HAIKO, HAIKO SEIGYO (in Japanese) and related terms, CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	JP 2005-128201 A (NOF Corp.), 19 May 2005 (19.05.2005), claims; paragraph [0002]; paragraph [0076], examples 6 to 10 (Family: none)	1-6, 13 7-12
Y	WO 2014/174929 A1 (JNC Corp.), 30 October 2014 (30.10.2014), paragraphs [0028] to [0030], [0236] to [0250] & US 2016/0075950 A1 paragraphs [0077] to [0093], [0303] & EP 2990424 A1	7-12
A	WO 2014/192657 A1 (DIC Corp.), 04 December 2014 (04.12.2014), paragraph [0045] & TW 201510186 A	1-13

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
12 April 2017 (12.04.17)

Date of mailing of the international search report
25 April 2017 (25.04.17)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/007042

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2014-37366 A (Fujifilm Corp.), 27 February 2014 (27.02.2014), paragraphs [0066] to [0075] (Family: none)	1-13
A	JP 2003-287755 A (Fujitsu Display Technologies Corp.), 10 October 2003 (10.10.2003), paragraph [0006] (Family: none)	1-13
A	JP 7-507083 A (Kent State University), 03 August 1995 (03.08.1995), claims; page 8, upper left column, line 1 to upper right column, line 9; example 4; fig. 4 & US 5384067 A1 claims; column 9, lines 26 to 47; example 4; fig. 2 & WO 1992/019695 A2	1-13
A	JP 2015-125151 A (LG Display Co., Ltd.), 06 July 2015 (06.07.2015), claims; paragraphs [0005] to [0007], [0035] to [0067]; examples 2 to 3 (Family: none)	1-13
A	JP 2014-196434 A (Dainippon Printing Co., Ltd.), 16 October 2014 (16.10.2014), claims (Family: none)	1-13

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/007042

Continuation of A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

(International Patent Classification (IPC))

*C07C69/21(2006.01)i, C07C69/54(2006.01)i, C07C69/732(2006.01)i,
C07C229/30(2006.01)i, C09K19/02(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i,
C09K19/14(2006.01)i, C09K19/18(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i,
C09K19/30(2006.01)i, C09K19/32(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i,
C09K19/56(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i*

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

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. 特別ページ参照

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. C07C69/21, C07C69/54, C07C69/732, C07C229/30, C09K19/02, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/56, G02F1/13, G02F1/1337

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2017年
日本国実用新案登録公報	1996-2017年
日本国登録実用新案公報	1994-2017年

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

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamIII) キーワード：液晶、ホモジニアス配向、配向制御 及びそれに類する用語
CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X Y	JP 2005-128201 A（日本油脂株式会社） 2005.05.19, 特許請求の範囲, [0002], [0076] 実施例 6-10 (ファミリーなし)	1-6, 13 7-12
Y	WO 2014/174929 A1（JNC株式会社） 2014.10.30, [0028]-[0030], [0236]-[0250] & US 2016/0075950 A1 [0077]-[0093], [0303] & EP 2990424 A1	7-12

C欄の続きにも文献が列挙されている。

パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

12.04.2017

国際調査報告の発送日

25.04.2017

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁（ISA/J P）

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官（権限のある職員）

磯貝 香苗

4 V

6119

電話番号 03-3581-1101 内線 3483

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	WO 2014/192657 A1 (D I C株式会社) 2014. 12. 04, [0045] & TW 201510186 A	1-13
A	JP 2014-37366 A (富士フイルム株式会社) 2014. 02. 27, [0066]-[0075] (ファミリーなし)	1-13
A	JP 2003-287755 A (富士通ディスプレイテクノロジー株式会社) 2003. 10. 10, [0006] (ファミリーなし)	1-13
A	JP 7-507083 A (ケント ステイト ユニバーシティ) 1995. 08. 03, 特許請求の範囲, 第 8 頁左上欄第 1 行-右上欄第 9 行, 例 4, 図 4 & US 5384067 A1 特許請求の範囲, 第 9 欄第 26-47 行, 例 4, 図 2 & WO 1992/019695 A2	1-13
A	JP 2015-125151 A (エルジー ディスプレイ カンパニー リミテ ッド) 2015. 07. 06, 特許請求の範囲, [0005]-[0007], [0035]-[0067], 実施 例 2-3 (ファミリーなし)	1-13
A	JP 2014-196434 A (大日本印刷株式会社) 2014. 10. 16, 特許請求の範囲 (ファミリーなし)	1-13

発明の属する分野の分類

C07C69/21(2006.01)i, C07C69/54(2006.01)i, C07C69/732(2006.01)i,
C07C229/30(2006.01)i, C09K19/02(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i,
C09K19/18(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/32(2006.01)i,
C09K19/34(2006.01)i, C09K19/56(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i