(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
2020年4月23日(23.04.2020)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2020/080120 A1

(51) 国際特許分類:

C07C 69/732 (2006.01)	*C09K 19/30* (2006.01)
C07C 69/734 (2006.01)	*C09K 19/32* (2006.01)
C07C 229/30 (2006.01)	*C09K 19/34* (2006.01)
C07C 321/18 (2006.01)	*C09K 19/38* (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01)	*C09K 19/54* (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01)	*C09K 19/56* (2006.01)
C09K 19/16 (2006.01)	*G02F 1/13* (2006.01)
C09K 19/18 (2006.01)	*G02F 1/1337* (2006.01)
C09K 19/20 (2006.01)	*G02F 1/139* (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2019/039073

(22) 国際出願日： 2019年10月3日(03.10.2019)

(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 2018-194445 2018年10月15日(15.10.2018) JP
特願 2019-006790 2019年1月18日(18.01.2019) JP

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

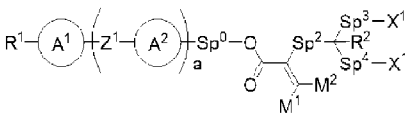
(72) 発明者：森 絢子(**MORI Ayako**)；〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 矢野 智広(**YANO Tomohiro**)；〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 矢野 匡一(**YANO Masakazu**)；〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 高田 章博(**TAKATA Akihiro**)；〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (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, JO, 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.

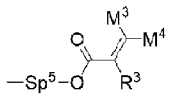
(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能)：ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,

(54) **Title:** COMPOUND, LIQUID CRYSTAL COMPOSITION, AND LIQUID CRYSTAL DISPLAY ELEMENT

(54) 発明の名称： 化合物、液晶組成物、および液晶表示素子



(1)



(1-a)

(57) **Abstract:** Provided is a polar compound having high chemical stability, high ability to orient liquid crystal molecules, high solubility with respect to a liquid crystal composition, and a high voltage holding ratio of a liquid crystal display element. This compound is represented by formula (1). R^1 is hydrogen or an alkyl which may be substituted; ring A^1 and ring A^2 are phenylenes, or the like which may be substituted; a is 0-4; Z^1 is an alkylene or the like which may be single-bonded or substituted; R^2 is an alkyl which may be substituted; at least one hydrogen among ring A^2 and Sp^0 may be substituted by formula (1-a); Sp^0, and Sp^2-Sp^5 are alkylenes which may be single-bonded or substituted; M^1-M^4 are hydrogen, fluorine, or the like; R^3 is an alkyl having 1-10 carbon atoms; and X^1 is -OH, or the like.

WO 2020/080120 A1

［続葉有］

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)）

(57) 要約：化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、液晶組成物への高い溶解度を有し、液晶表示素子の電圧保持率が大きい極性化合物を提供する。 式（１）で表される化合物。Ｒ^{1}は、水素または置換されていてもよいアルキル；環Ａ^{1}および環Ａ^{2}は置換されていてもよいフェニレンなどであり；ａは、０～４；Ｚ^{1}は単結合または置換されていてもよいアルキレンなどであり；Ｒ^{2}は置換されていてもよいアルキル； 環Ａ^{2}、またはＳｐ^{0}において、少なくとも１つの水素は、式（１－ａ）で置き換えられてもよく； Ｓｐ^{0}、Ｓｐ^{2}～Ｓｐ^{5}は単結合または置換されていてもよいアルキレンであり； Ｍ^{1}～Ｍ^{4}は水素、フッ素などであり；Ｒ^{3}は、炭素数１から１０のアルキルであり； Ｘ^{1}は、－ＯＨなどである。

明　細　書

発明の名称 ： 化合物、液晶組成物、および液晶表示素子

技術分野

[0001] 本発明は、化合物、液晶組成物および液晶表示素子に関する。さらに詳しくは、メタクリロイルオキシなどの重合性基と、２つの－ＯＨ基などの極性基によって置換されたアクリロイルオキシなどの重合性基を併せ持つ化合物、この化合物を含み、誘電率異方性が正または負の液晶組成物、およびこの組成物またはその一部の硬化物を含む液晶表示素子に関する。

背景技術

[0002] 液晶表示素子を液晶分子の動作モードに基づいて分類すると、ＰＣ（phase change）、ＴＮ（twisted nematic）、ＳＴＮ（super twisted nematic）、ＥＣＢ（electrically controlled birefringence）、ＯＣＢ（optically compensated bend）、ＩＰＳ（in-plane switching）、ＶＡ（vertical alignment）、ＦＦＳ（fringe field switching）、ＦＰＡ（field-induced photo-reactive alignment）などのモードに分類できる。また、素子の駆動方式に基づくと、ＰＭ（passive matrix）とＡＭ（active matrix）に分類できる。ＰＭは、スタティック（static）、マルチプレックス（multiplex）などに分類され、ＡＭは、ＴＦＴ（thin film transistor）、ＭＩＭ（metal insulator metal）などに分類される。さらに、ＴＦＴは非晶質シリコン（amorphous silicon）および多結晶シリコン（polycrystal silicon）に分類できる。後者は製造工程によって高温型と低温型とに分類される。光源に基づいた分類すると、自然光を利用する反射型、バックライトを利用する透過型、そして自然光とバックライトの両方を利用する半透過型に分類できる。

[0003] ネマチック相を有する液晶組成物は、適切な特性を有する。この組成物の特性を向上させることによって、良好な特性を有するＡＭ素子を得ることができる。前記組成物の特性とＡＭ素子の特性との関連を下記の表１にまとめる。

[0004] 表1．組成物とAM素子における特性

番号	組成物の特性	AM素子の特性
1	ネマチック相の温度範囲が広い	使用できる温度範囲が広い
2	粘度が小さい[1)]	応答時間が短い
3	光学異方性が適切である	コントラスト比が大きい
4	正または負に誘電率異方性が大きい	しきい値電圧が低く、消費電力が小さい コントラスト比が大きい
5	比抵抗が大きい	電圧保持率が大きく、コントラスト比が大きい
6	紫外線および熱に安定である	寿命が長い
7	弾性定数が大きい	コントラスト比が大きい、応答時間が短い

1）液晶表示素子に組成物を注入する時間を短縮できる

[0005] 前記組成物の特性を市販されているＡＭ素子に基づいてさらに説明する。ネマチック相の温度範囲（ネマチック相を呈する温度範囲）は、素子の使用できる温度範囲に関連する。ネマチック相の好ましい上限温度は約７０℃以上であり、そしてネマチック相の好ましい下限温度は約－１０℃以下である。

前記組成物の粘度は素子の応答時間に関連する。素子で動画を表示するためには短い応答時間が好ましい。１ミリ秒でもより短い応答時間が望ましい。したがって、前記組成物の粘度は低いことが好ましく、さらに、低温でも低いとより好ましい。

[0006] 前記組成物の光学異方性は、素子のコントラスト比に関連する。素子のモードに応じて、大きな光学異方性または小さな光学異方性、すなわち適切な光学異方性が必要である。組成物の光学異方性（Δｎ）と素子のセルギャップ（ｄ）との積（Δｎ×ｄ）は、コントラスト比を最大にするように設計される。適切な積の値は動作モードの種類に依存する。この値は、ＴＮなどのモードの素子では約０．４５μｍである。この値は、ＶＡモードの素子では約０．３０μｍから約０．４０μｍの範囲であり、ＩＰＳモードまたはＦＦＳモードの素子では約０．２０μｍから約０．３０μｍの範囲である。これらの場合、小さなセルギャップの素子には大きな光学異方性を有する組成物が好ましい。

前記組成物における大きな誘電率異方性は、素子における低いしきい値電

圧、小さな消費電力と大きなコントラスト比に寄与する。したがって、正または負に大きな誘電率異方性が好ましい。組成物における大きな比抵抗は、素子における大きな電圧保持率と大きなコントラスト比とに寄与する。したがって、初期段階において室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。長時間使用した後、室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。

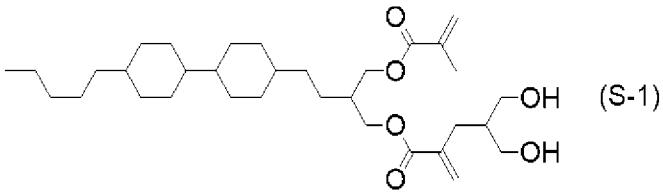
紫外線および熱に対する組成物の安定性は、素子の寿命に関連する。この安定性が高いとき、素子の寿命は長い。このような特性は、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いるＡＭ素子に好ましい。

[0007] 高分子支持配向（ＰＳＡ；polymer sustained alignment）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。ここでは、複数の重合性基を有する重合性化合物が一般的に使用される。次に、この素子を挟持する基板の間に電圧を印加しながら、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。この組成物を用いると、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。重合体のこのような効果は、ＴＮ、ＥＣＢ、ＯＣＢ、ＩＰＳ、ＶＡ、ＦＦＳ、ＦＰＡなどのモードを有する素子に期待できる。

[0008] 汎用の液晶表示素子において、液晶分子の垂直配向は、ポリイミド配向膜によって達成される。一方、配向膜を有しない液晶表示素子として、極性化合物を液晶組成物に添加し、液晶分子を配向させるモードが提案されている。まず、少量の極性化合物および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。該重合性化合物としては、複数の重合性基を有する重合性化合物が一般的に使用される。ここで、極性化合物の作用によって液晶分子が配向される。次に、この素子を挟持する基板の間に電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。ここで、重合性化合物が重合し、液晶分子の配向

を安定化させる。この組成物を用いると、極性化合物および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。さらに、配向膜を有しない素子では、配向膜を形成する工程が不要である。配向膜がないので、配向膜と組成物との相互作用によって、素子の電気抵抗が低下することはない。極性化合物と重合体の組合せによるこのような効果は、ＴＮ、ＥＣＢ、ＯＣＢ、ＩＰＳ、ＶＡ、ＦＦＳ、ＦＰＡなどのモードを有する素子に期待できる。

[0009] これまでに、配向膜を有しない液晶表示素子において、極性化合物の作用と重合性化合物の作用を兼ね備えた化合物として、重合性を有する極性化合物が合成されてきた（例えば、特許文献１および２）。特許文献２には、複数の極性基と複数の重合性基を有する重合性化合物（Ｓ－１）が記載されている。

[0010] 

(S-1)

先行技術文献

特許文献

[0011] 特許文献1：国際公開第２０１６／１２９４９０号

特許文献2：国際公開第２０１７／２０９１６１号

発明の概要

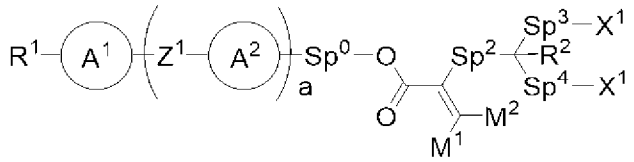
発明が解決しようとする課題

[0012] 本発明の第一の課題は、化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、紫外線照射による高い重合反応性、液晶表示素子に用いた場合の大きな電圧保持率の少なくとも１つを有し、そして液晶組成物への高い溶解度を有する化合物を提供することである。第二の課題は、この化合物を含み、そしてネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、低粘度、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提供することである。第三の課題は、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い透過率、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命、良好な垂直配向性などの特性の少なくとも１つを有する液晶表示素子を提供することである。

課題を解決するための手段

[0013] 本発明は、式（１）で表される化合物、この化合物を含む液晶組成物、およびこの組成物および／またはこの組成物の少なくとも一部が重合した重合物を含む液晶表示素子に関する。



(1)

式（１）において、

R^1は、水素または炭素数１から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、－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環A^1および環A^2は独立して、１，２－シクロプロピレン、１，３－シクロブチレン、１，３－シクロペンチレン、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘプチレン、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、またはピリジン－２，５－ジイルであり、この環A^1および環A^2において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコ

キシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ａは、０、１、２、３、または４であり；

Z^1は独立して、単結合または炭素数１から６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、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Sp^0、Sp^2、Sp^3、およびSp^4は独立して、単結合または炭素数１から１５のアルキレンであり、このSp^0、Sp^2、Sp^3、およびSp^4において、少なくとも１つの－CH_2－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素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、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

R^2は、炭素数１から１０のアルキルであり、このR^2において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

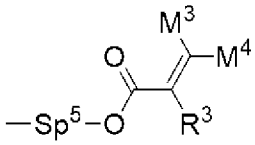
X^1は独立して、－ＯＨ、－NH_2、－OR^4、－Ｎ（R^4）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、または－Ｓｉ（R^4）$_3$であり；

－OR^4、－Ｎ（R^4）$_2$、および－Ｓｉ（R^4）$_3$において、

R^4は水素または炭素数１から１０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、－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、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環Ａ^{2}またはＳｐ^{0}において、少なくとも１つの水素は、式（１－ａ）で表される基で置き換えられている；



(1-a)

式（１－ａ）において、

Ｓｐ^{5}は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{5}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｍ^3、およびＭ^{4}は独立して、水素、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

Ｒ^{3}は、炭素数１から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－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

発明の効果

[0014] 本発明の第一の長所は、化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、紫外線照射による高い重合反応性、液晶表示素子に用いた場合の大きな電圧保持率の少なくとも１つを有し、そして液晶組成物への高い溶解度を有する化合物を提供することである。第二の長所は、この化合物を含み、そ

してネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、低粘度、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提供することである。第三の長所は、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い透過率、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命、良好な垂直配向性などの特性の少なくとも１つを有する液晶表示素子を提供することである。

発明を実施するための形態

[0015] この明細書における用語の使い方は、次のとおりである。「液晶性化合物」、「液晶組成物」、および「液晶表示素子」の用語をそれぞれ「化合物」、「組成物」、および「素子」と略すことがある。

「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、上限温度、下限温度、粘度、誘電率異方性などの組成物の物性を調節する目的で添加する化合物の総称である。この化合物は、通常、１，４－シクロヘキシレンや１，４－フェニレンなどの六員環を有し、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。アルケニルを有する液晶性化合物は、その意味では重合性化合物ではない。

「極性化合物」は、極性基が基板表面などと相互作用することによって液晶分子が配列するのを援助する。

「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などの総称である。

[0016] 液晶組成物は、通常、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。この組成物には、物性をさらに調整する目的で、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、色素、および消泡剤などの添加物が必要に応じて添加される

。液晶組成物中の液晶性化合物の割合（含有量）は、添加物を添加した場合であっても、添加物を含まない液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表す。液晶組成物中の添加物の割合（添加量）は、添加物を含まない液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表す。すなわち、液晶性化合物や添加物の割合は、液晶性化合物の全重量に基づいて算出される。重量百万分率（ｐｐｍ）が用いられることもある。液晶組成物中の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す。

[0017] 「透明点」は、液晶性化合物における液晶相－等方相の転移温度である。「液晶相の下限温度」は、液晶性化合物における固体－液晶相（スメクチック相、ネマチック相など）の転移温度である。「ネマチック相の上限温度」は、液晶性化合物と母液晶との混合物または液晶組成物におけるネマチック相－等方相の転移温度であり、「上限温度」と略すことがある。「ネマチック相の下限温度」を「下限温度」と略すことがある。「誘電率異方性を上げる」や「大きな誘電率異方性」との表現は、その値の絶対値が増加するまたは大きいことを意味する。「電圧保持率が大きい」とは、素子が初期段階において室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有し、そして素子を長時間使用した後においても、室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有することを意味する。組成物や素子では、経時変化試験（加速劣化試験を含む）の前後で特性が検討されることがある。「液晶組成物への溶解度が高い」との表現は、常温での液晶性化合物を含む組成物のいずれにも対しても溶解度が高いことを意味するが、該組成物として、下記実施例で溶解性を評価するのに用いた組成物を規準とすることができる。

[0018] 式（１）で表される化合物を「化合物（１）」と略すことがある。化合物（１）は、式（１）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。このルールは、式（２）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物などにも適用される。

六角形で囲んだＡ[1]、Ｂ[1]、Ｃ[1]などの記号はそれぞれ環Ａ[1]、環Ｂ[1]、環Ｃ[1]などに対応する。六角形は、シクロヘキサン環やベンゼン環などの六員環またはナフタレン環などの縮合環を表す。この六角形の一辺を横切る直線は、環上の任意の水素が－Ｓｐ[1]－Ｐ[1]などの基で置き換えられてもよいことを表す。

ｆ、ｇ、ｈ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。

「環Ａおよび環Ｃは独立して、Ｘ、Ｙ、またはＺである」との表現では、主語が複数であるから、「独立して」を用いる。主語が「環Ａは」であるときは、主語が単数であるから「独立して」を用いない。

[0019] 化合物の化学式において、末端基Ｒ[11]の記号を複数の化合物に用いているが、これらの化合物におけるＲ[11]が表す基はそれぞれ同一であってもよく、または異なってもよい。例えば、化合物（２）のＲ[11]がエチルである場合、化合物（３）のＲ[11]はエチルであってもよく、プロピルなどの他の基であってもよい。このルールは、他の記号にも適用される。化合物（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、同一であってもよく、または異なってもよい。ｉが２より大きいとき、任意の２つの環Ｄ[1]にも適用される。このルールは、他の記号にも適用される。

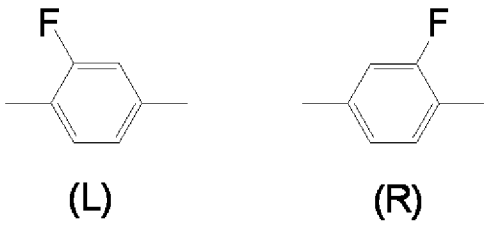
[0020] 「少なくとも１つの‘Ａ’」との表現は、‘Ａ’の数は任意であることを意味する。「少なくとも１つの‘Ａ’は、‘Ｂ’で置き換えられてもよい」との表現は、‘Ｂ’で置き換えられない‘Ａ’そのものの場合、１つの‘Ａ’が‘Ｂ’で置き換えられた場合、２つ以上の‘Ａ’が‘Ｂ’で置き換えられた場合を含み、これらにおいて、‘Ｂ’で置き換えられる‘Ａ’の位置は任意である。置換位置が任意であるとのルールは、「少なくとも１つの‘Ａ’が、‘Ｂ’で置き換えられた」との表現にも適用される。「少なくとも１つのＡが、Ｂ、Ｃ、またはＤで置き換えられてもよい」という表現は、Ａが置換されない場合、少なくとも１つのＡがＢで置き換えられた場合、少なく

とも１つのＡがＣで置き換えられた場合、および少なくとも１つのＡがＤで置き換えられた場合、さらに複数のＡがＢ、Ｃ、Ｄの少なくとも２つで置き換えられ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_2CH_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。アルキルなどにおいて、メチル部分（－CH_2－Ｈ）の－CH_2－が－Ｏ－で置き換えられて－Ｏ－Ｈになることも好ましくない。

[0021] 「R^{11}およびR^{12}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、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い」との表現が使われることがある。この表現において、「これらの基において」は、文言どおりに解釈してよい。この表現では、「これらの基」は、アルキル、アルケニル、アルコキシ、アルケニルオキシなどを意味する。すなわち、「これらの基」は、「これらの基において」の用語よりも前に記載された基の総てを表す。この常識的な解釈は、他の用語にも適用される。

[0022] ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素を意味する。好ましいハロゲンは、フッ素または塩素である。さらに好ましいハロゲンはフッ素である。液晶性化合物において、アルキルは、直鎖状または分岐状であり、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。

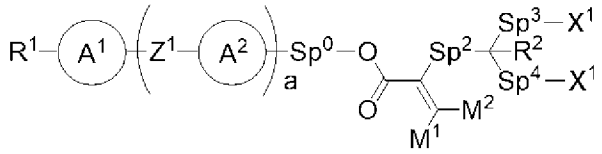
このルールは、テトラヒドロピラン－２，５－ジイルなどの、環から水素を２つ除くことによって生成した左右非対称な二価基にも適用される。

[0023] 

[0024] 本発明は、下記の項などを包含する。

[0025] 項１．

式（１）で表される化合物。



式（１）において、

R^1は、水素または炭素数１から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、－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環A^1および環A^2は独立して、１，２－シクロプロピレン、１，３－シクロブチレン、１，３－シクロペンチレン、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘプチレン、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、またはピリジン－２，５－ジイルであり、この環A^1および環A^2において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、

少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ａは、０、１、２、３、または４であり；

Z^1は独立して、単結合または炭素数１から６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、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Sp^0、Sp^2、Sp^3、およびSp^4は独立して、単結合または炭素数１から１５のアルキレンであり、このSp^0、Sp^2、Sp^3、およびSp^4において、少なくとも１つの－CH_2－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素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、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

R^2は、炭素数１から１０のアルキルであり、このR^2において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

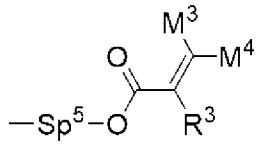
X^1は独立して、－ＯＨ、－NH_2、－OR^4、－Ｎ（R^4）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、または－Ｓｉ（R^4）$_3$であり；

－OR^4、－Ｎ（R^4）$_2$、および－Ｓｉ（R^4）$_3$において、

R^4は水素または炭素数１から１０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、－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、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環Ａ^{2}またはＳｐ^{0}において、少なくとも１つの水素は、式（１－ａ）で表される基で置き換えられている；



(1-a)

式（１－ａ）において、

Ｓｐ^{5}は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{5}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｍ^{3}、およびＭ^{4}は独立して、水素、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

Ｒ^{3}は、炭素数１から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－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0026] 項２．式（１）において、

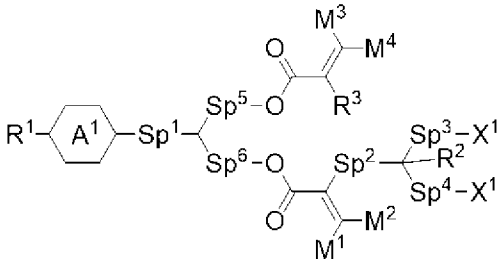
Ｚ^{1}が独立して、単結合、－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－、－（ＣＨ$_{2}$）$_{4}$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＦ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＨ$_{2}$－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；

環Ａ^{1}および環Ａ^{2}が独立して、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、テト

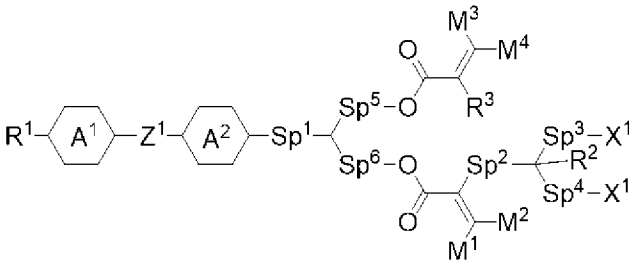
ラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルであり、この環A^1および環A^2において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；環A^2またはSp^0において、少なくとも１つの水素は、式（１－ａ）で置き換えられている、項１に記載の化合物。

[0027] 項３

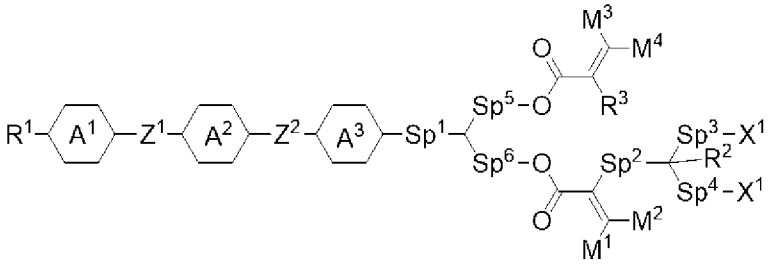
式（１－１）から式（１－８）のいずれか１つで表される、項１または２に記載の化合物。



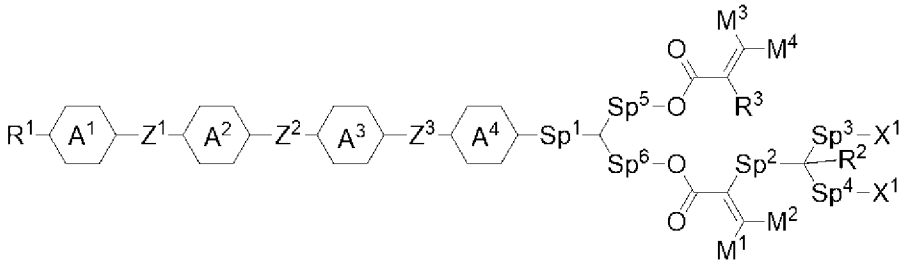
(1-1)



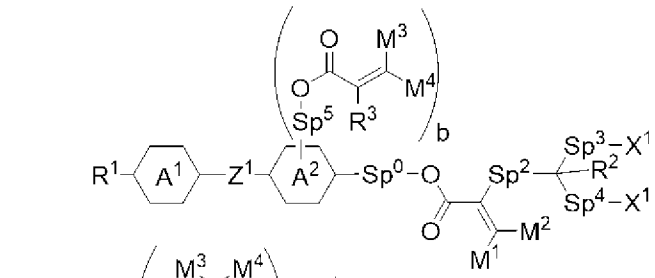
(1-2)



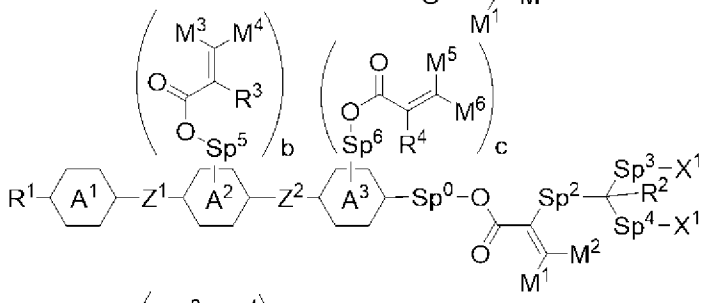
(1-3)



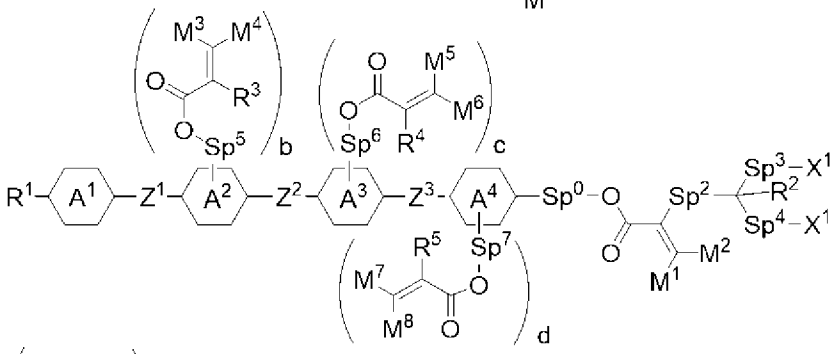
(1-4)



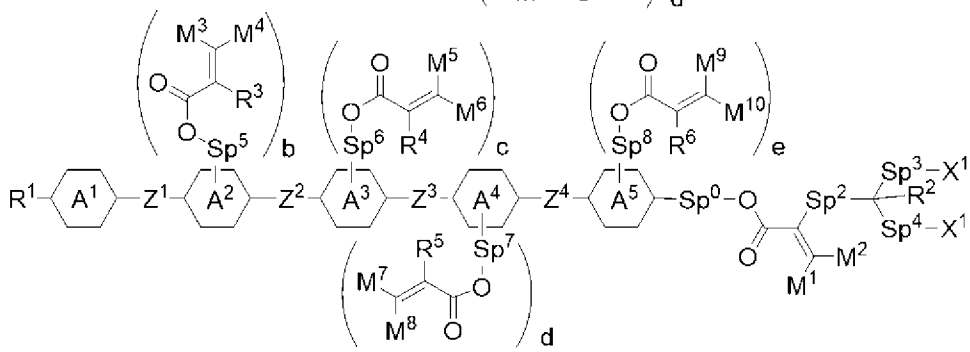
(1-5)



(1-6)



(1-7)



(1-8)

式（１－１）から式（１－８）において、

Ｒ[1]は、炭素数１から１５のアルキル、炭素数２から１５のアルケニル、炭素数１から１４のアルコキシ、または炭素数２～１４のアルケニルオキシであり、このＲ[1]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；

環Ａ[1]から環Ａ[5]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、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり、この環Ａ[1]から環Ａ[5]において、少なくとも１つの水素は、フッ素

、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシ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；ｂからｅは独立して、０、１、２、３、または４であり、それらの合計は１、２、３、または４であり；

Z^1からZ^4は独立して、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；

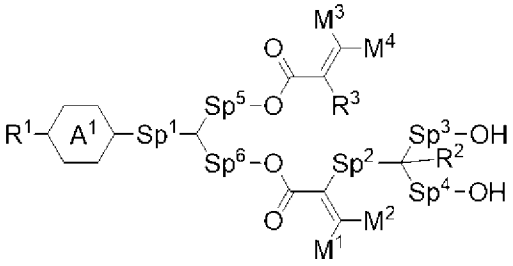
Sp^0からSp^8は独立して、単結合または炭素数１から７のアルキレンであり、このSp^0からSp^8において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、または－ＯＣＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

M^1からM^{10}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

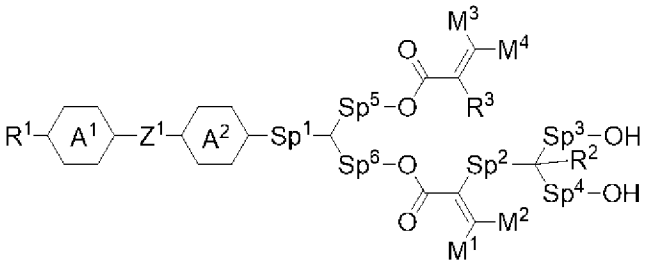
R^2からR^6は独立して、炭素数１から１０のアルキルであり、このR^2からR^6において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

X^1は独立して、－ＯＨ、－NH_2、または－ＳＨである。

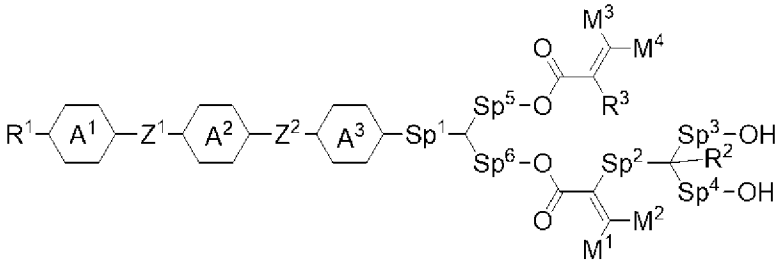
[0028] 項４．式（１－９）から式（１－１６）のいずれか１つで表される、項１から３のいずれか１項に記載の化合物。



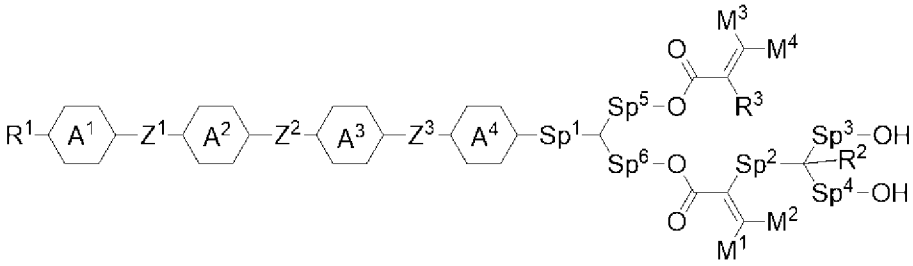
(1-9)



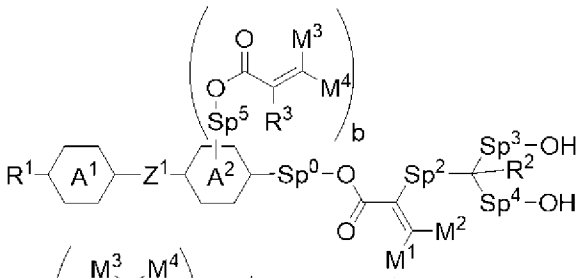
(1-10)



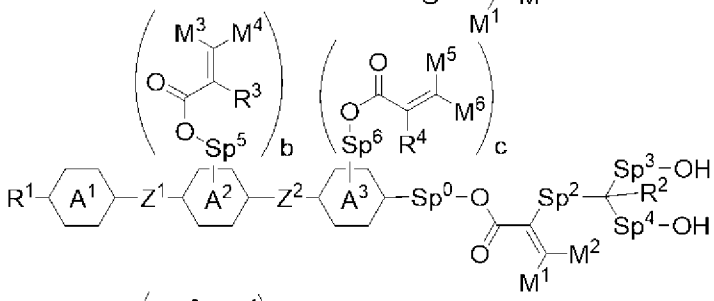
(1-11)



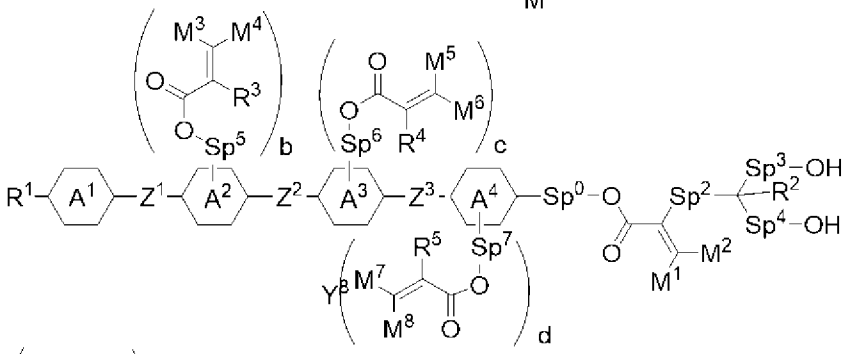
(1-12)



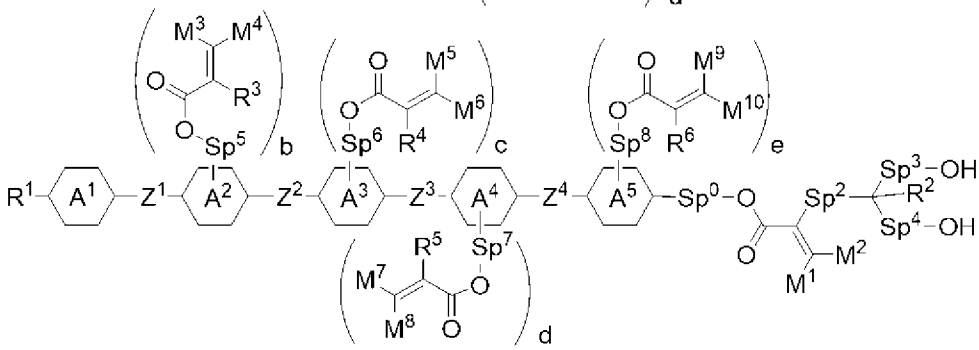
(1-13)



(1-14)



(1-15)



(1-16)

式（１－９）から式（１－１６）において、

Ｒ[1]は、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、または炭素数１から９のアルコキシであり；

環Ａ[1]から環Ａ[5]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、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり、この環Ａ[1]から環Ａ[5]において、少なくとも１つの水素は、フッ素、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシで置き換えられてもよく；

ｂからｅは独立して、０、１、２、３、または４であり、それらの合計は１、２、３、または４であり；

Z^1からZ^4は独立して、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－CH_2O－、または－OCH_2－であり；

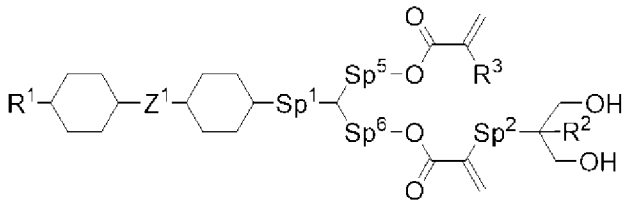
Sp^0からSp^8は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^0からSp^8において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく；

M^1からM^{10}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

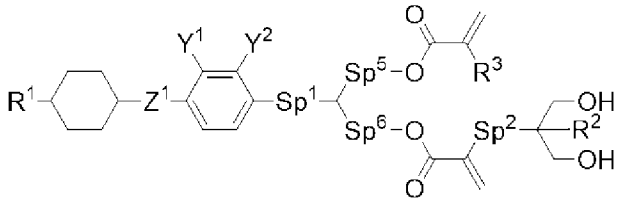
R^2は、炭素数１から３のアルキルであり；

R^3からR^6は独立して、炭素数１から１０のアルキル、または炭素数１から９のアルコキシである。

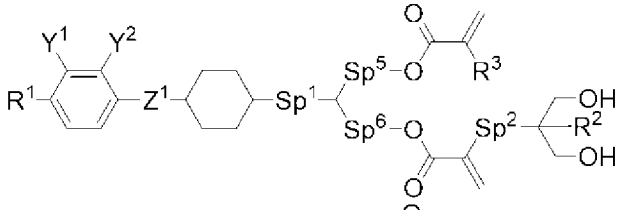
[0029] 項５．式（１－１７）から式（１－５３）のいずれか１つで表される、項１から４のいずれか１項に記載の化合物。



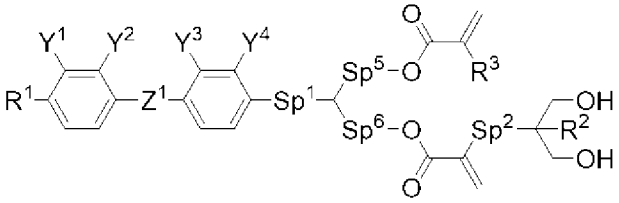
(1-17)



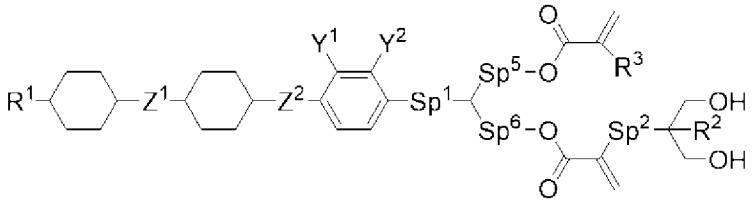
(1-18)



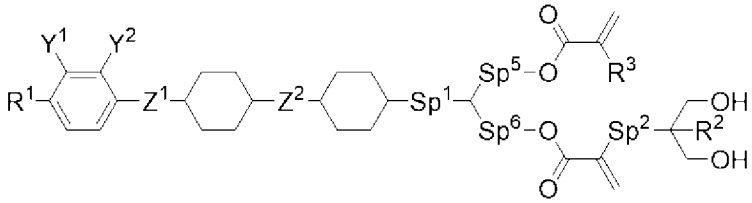
(1-19)



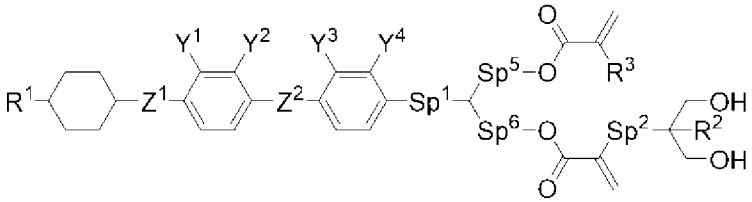
(1-20)



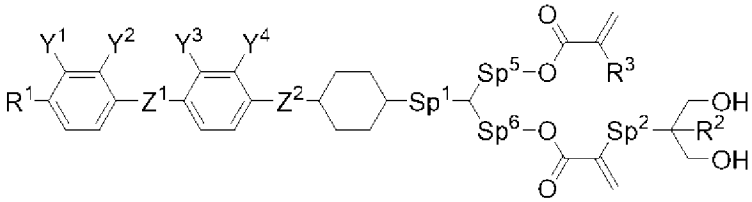
(1-21)



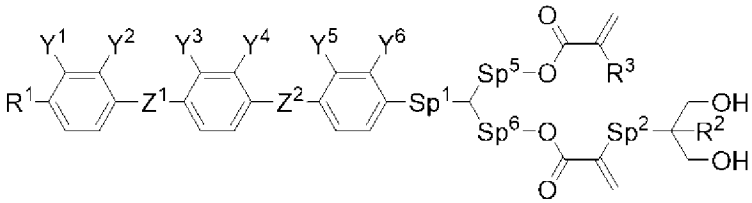
(1-22)



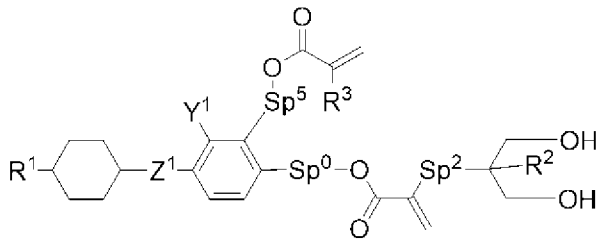
(1-23)



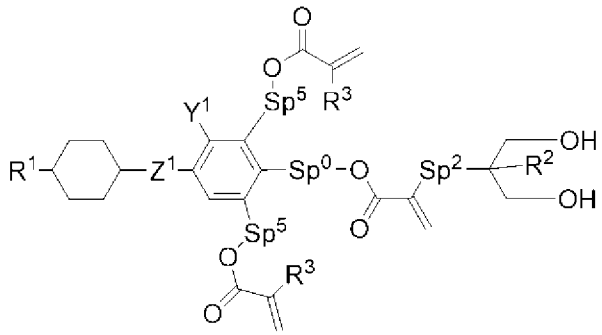
(1-24)



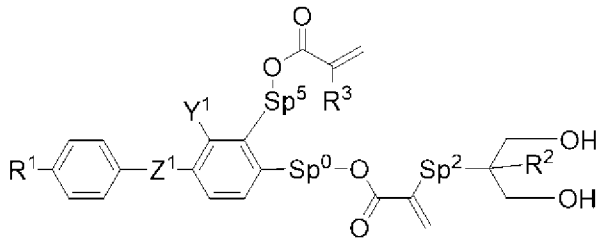
(1-25)



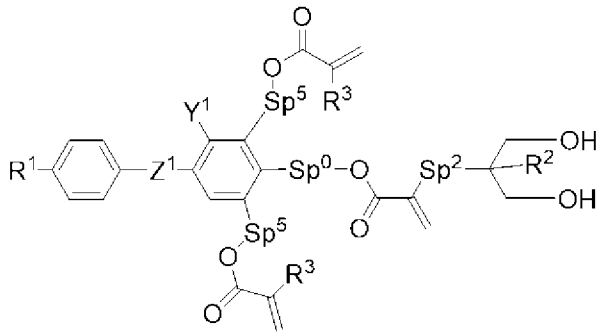
(1-26)



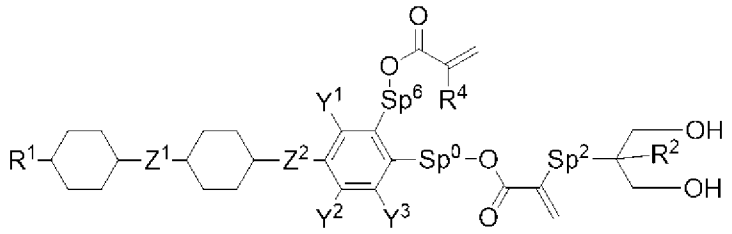
(1-27)



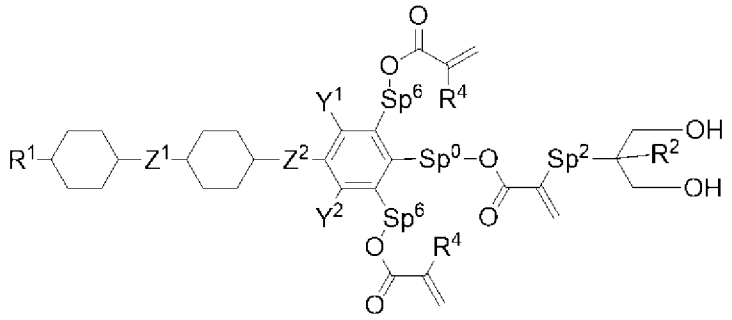
(1-28)



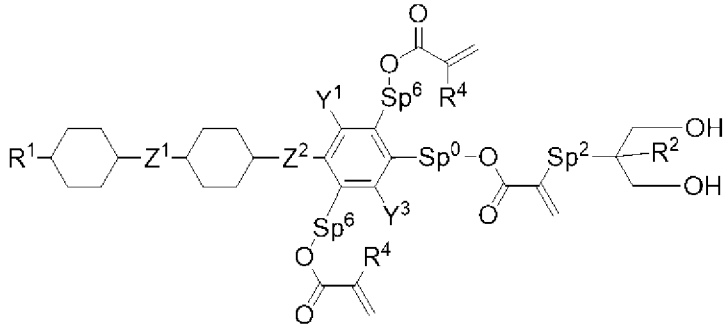
(1-29)



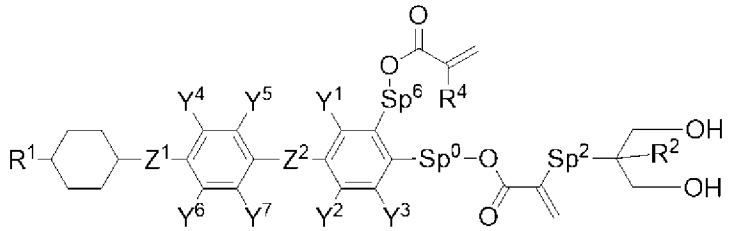
(1-30)



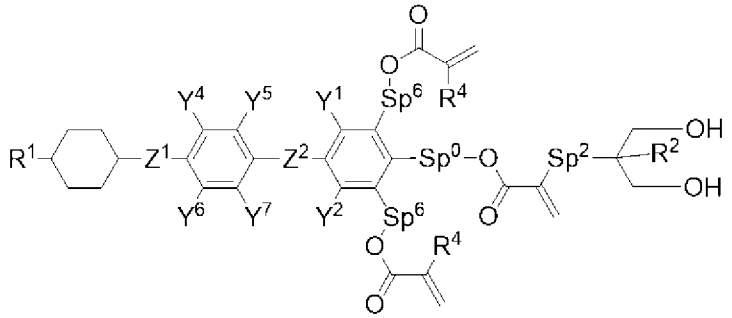
(1-31)



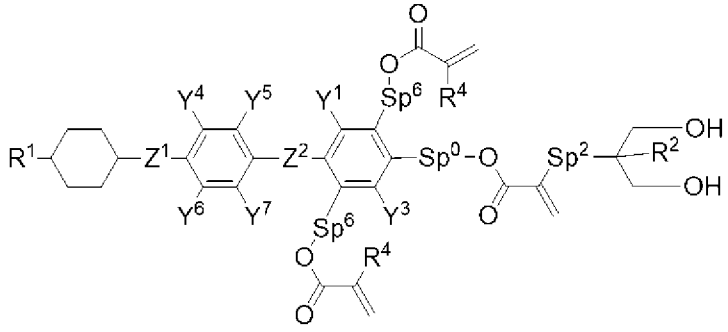
(1-32)



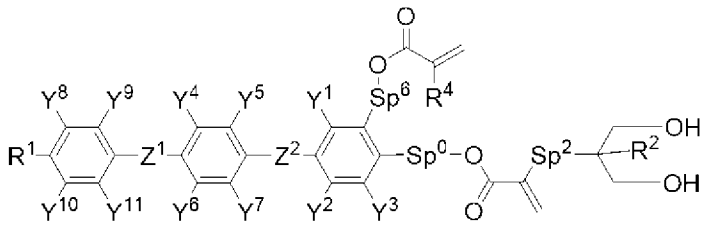
(1-33)



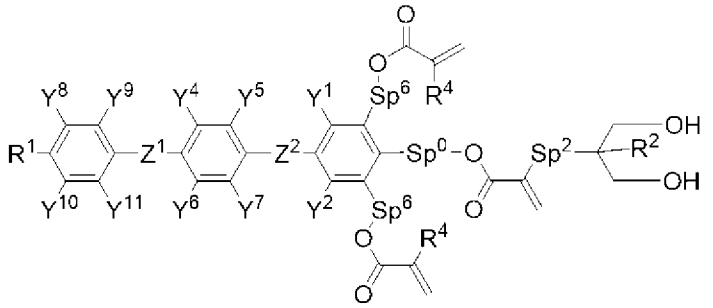
(1-34)



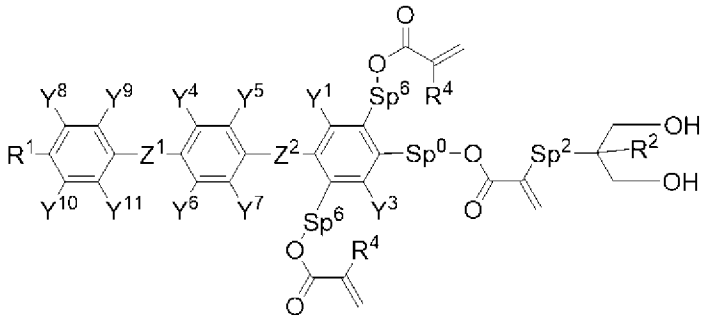
(1-35)



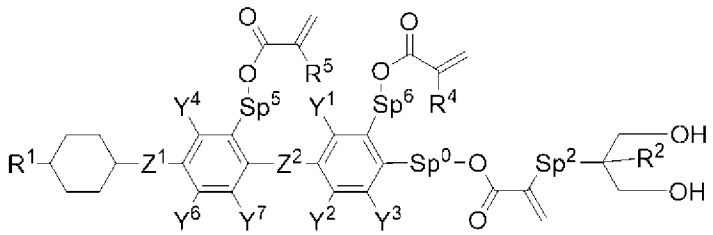
(1-36)



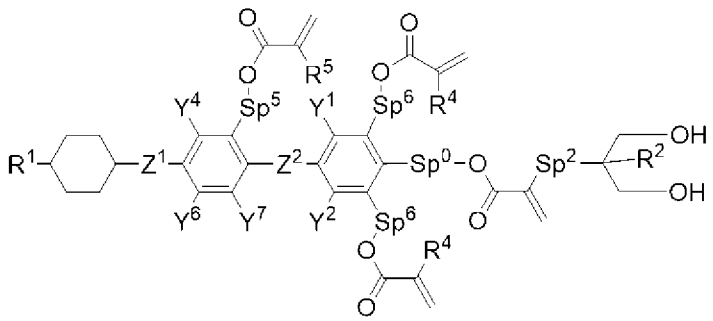
(1-37)



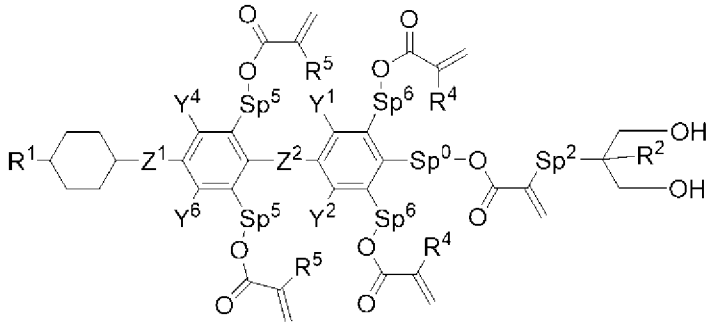
(1-38)



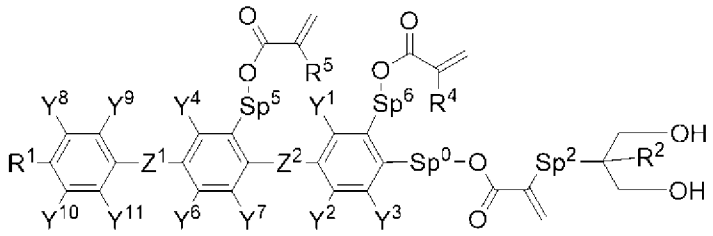
(1-39)



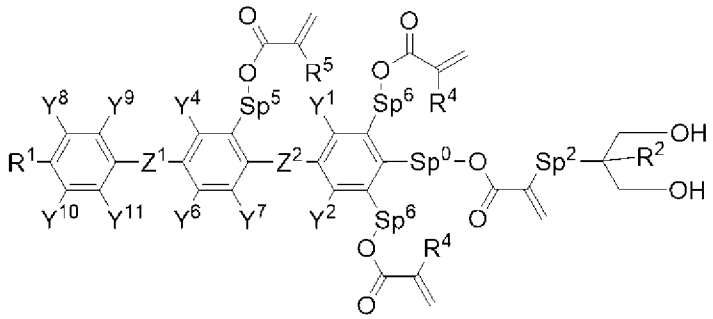
(1-40)



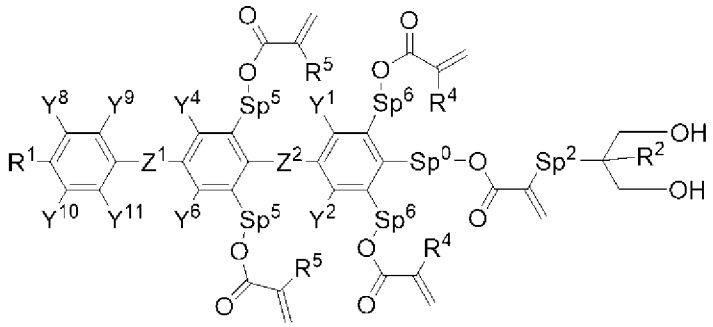
(1-41)



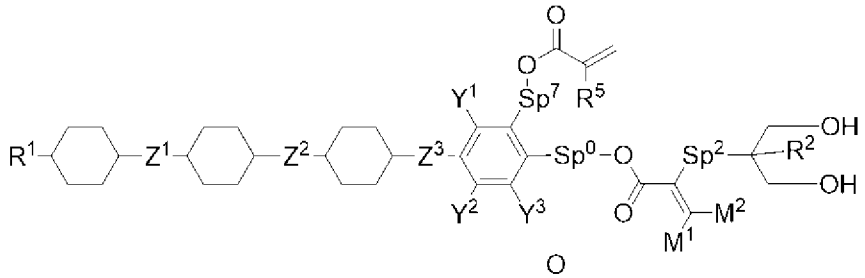
(1-42)



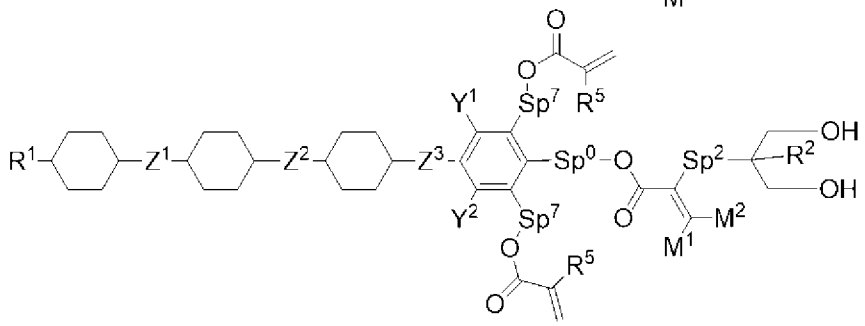
(1-43)



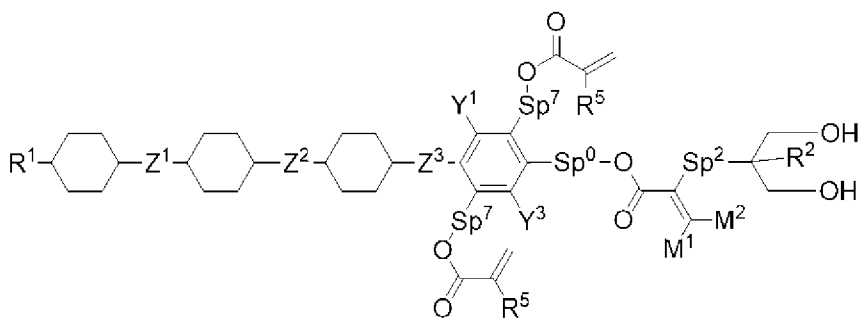
(1-44)



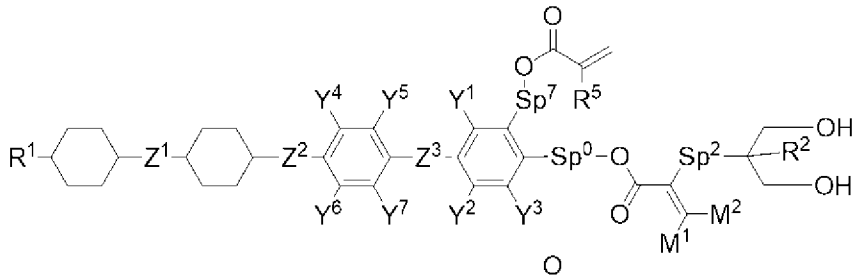
(1-45)



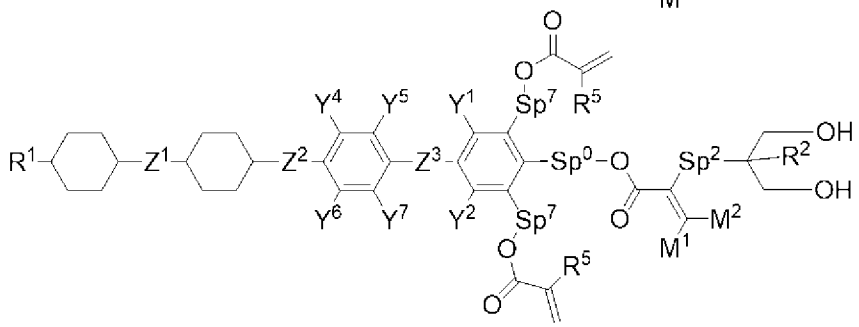
(1-46)



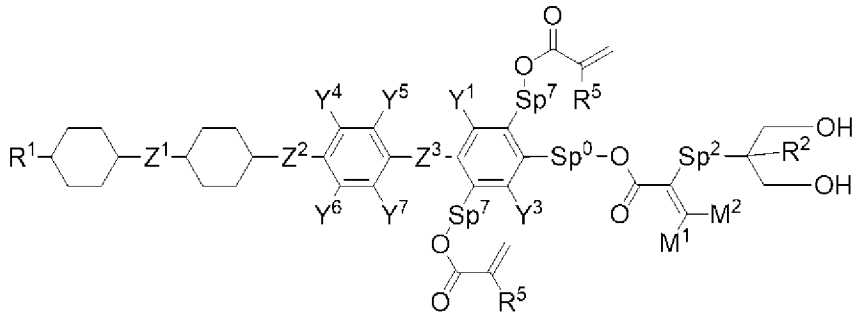
(1-47)



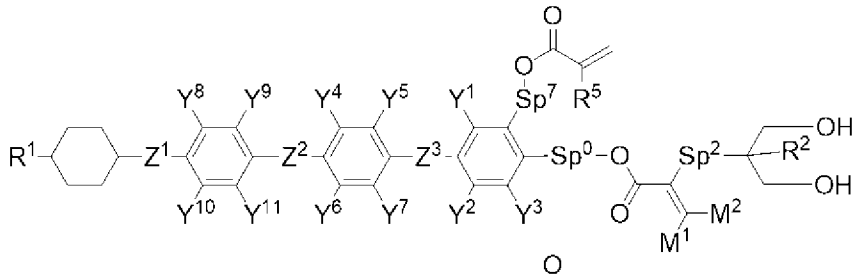
(1-48)



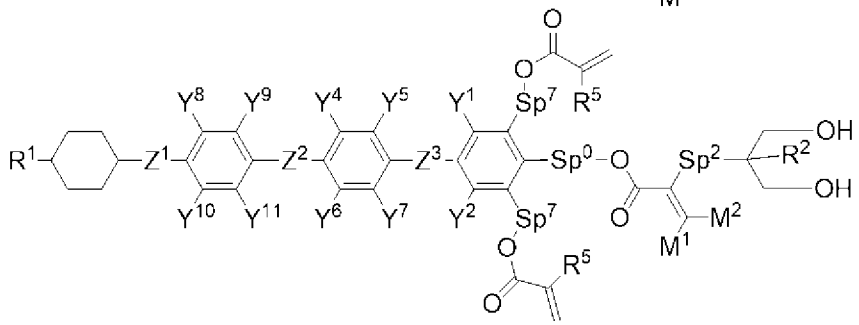
(1-49)



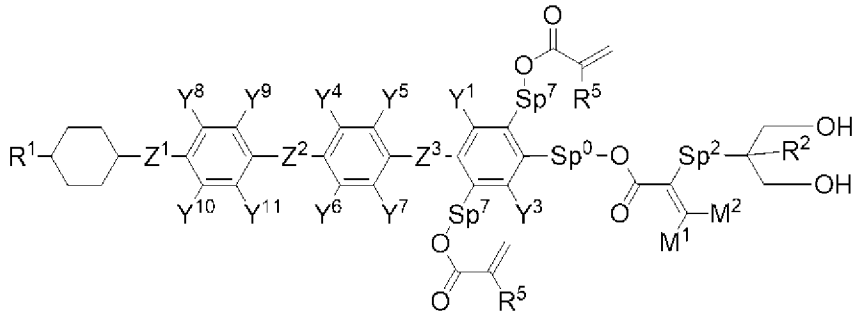
(1-50)



(1-51)



(1-52)



(1-53)

式（１－１７）から式（１－５３）において、

R^1は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

Z^1からZ^3は独立して、単結合または－（CH_2）$_2$－であり；

Sp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7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；

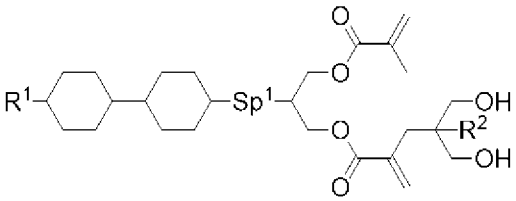
Y^1からY^{11}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシであり；

R^2は、炭素数１から１０のアルキル、または炭素数１から９のアルコキシであり；

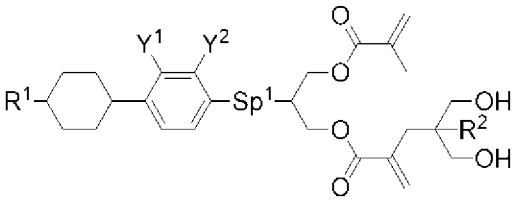
R^3、R^4、およびR^5は独立して、炭素数１から３のアルキルであり；

M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。

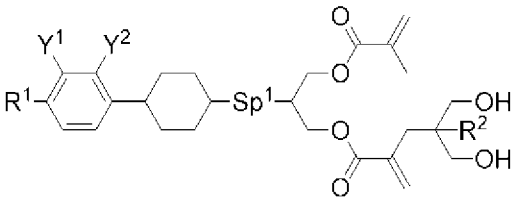
[0030] 項６．式（１－５４）から式（１－８８）のいずれか１つで表される、項１から５のいずれか１項に記載の化合物。



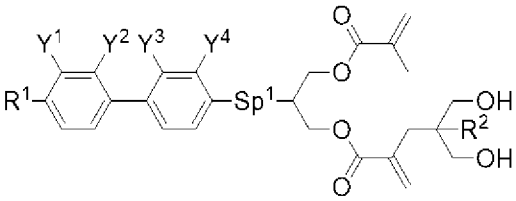
(1-54)



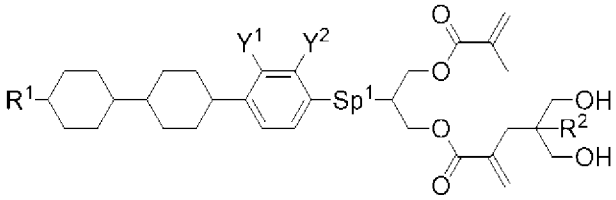
(1-55)



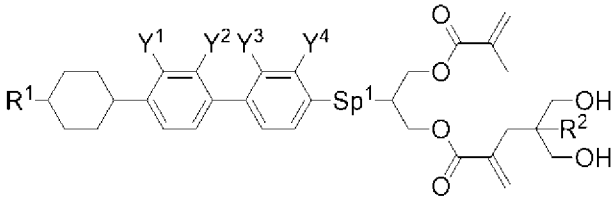
(1-56)



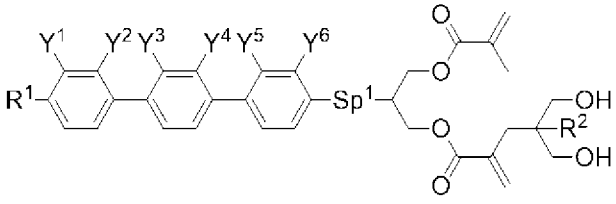
(1-57)



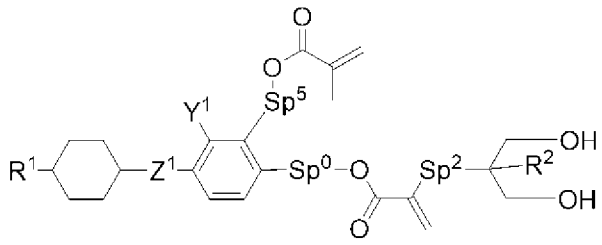
(1-58)



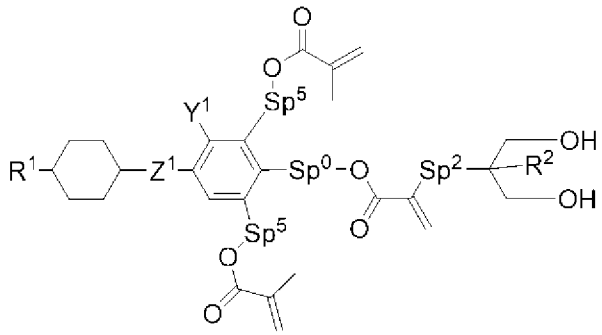
(1-59)



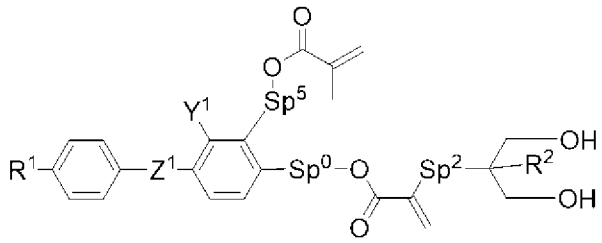
(1-60)



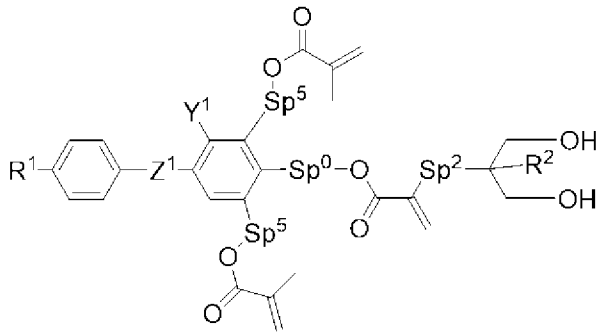
(1-61)



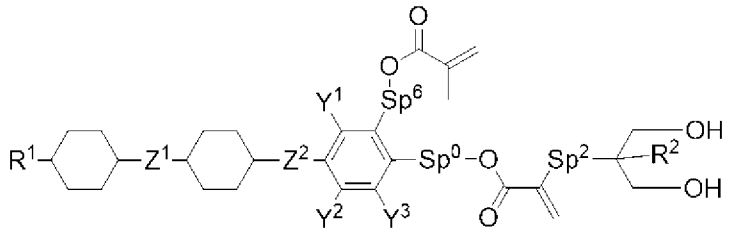
(1-62)



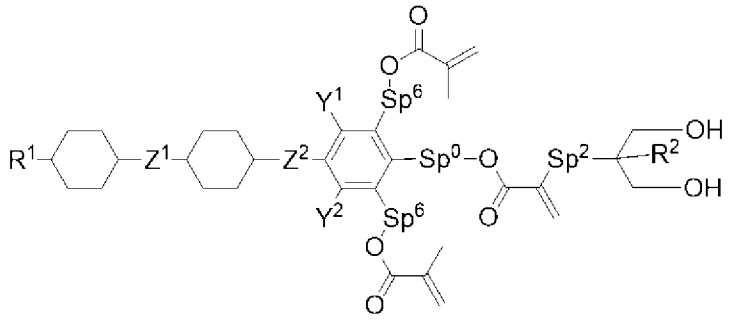
(1-63)



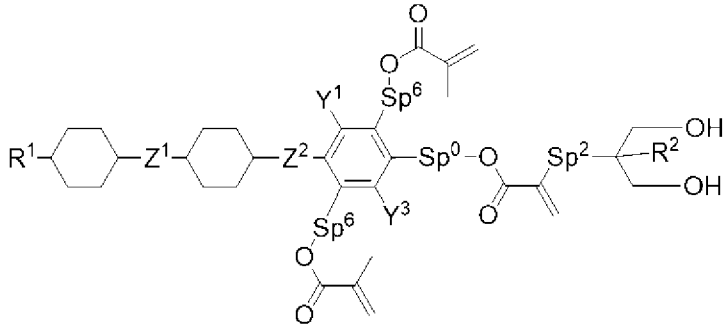
(1-64)



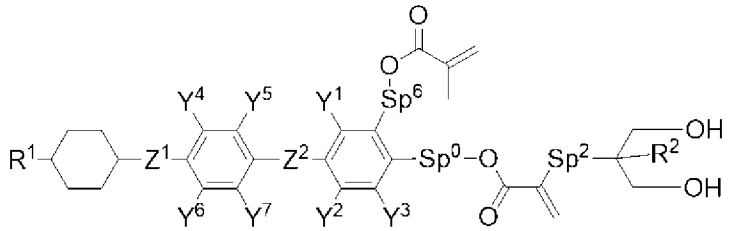
(1-65)



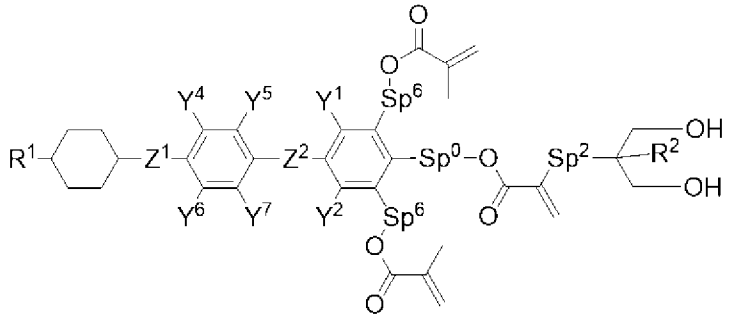
(1-66)



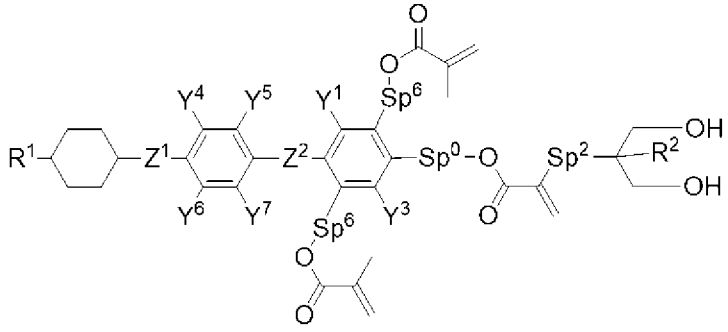
(1-67)



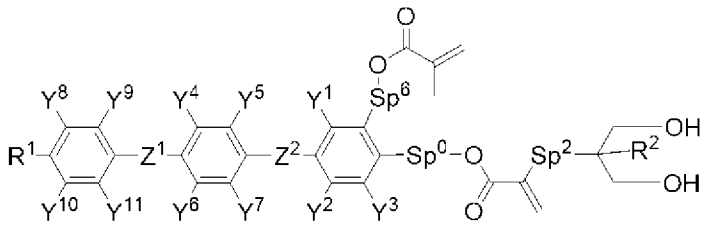
(1-68)



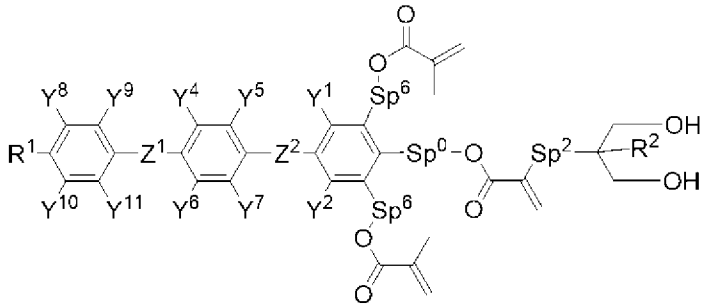
(1-69)



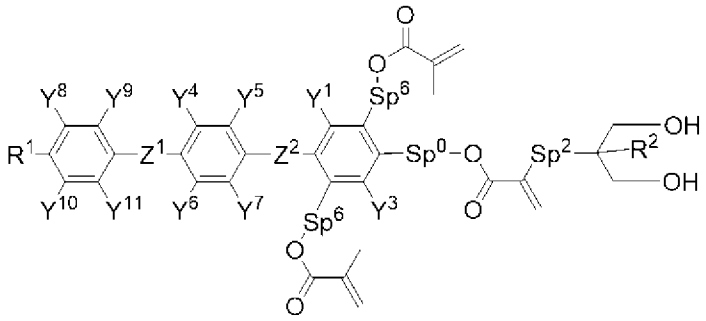
(1-70)



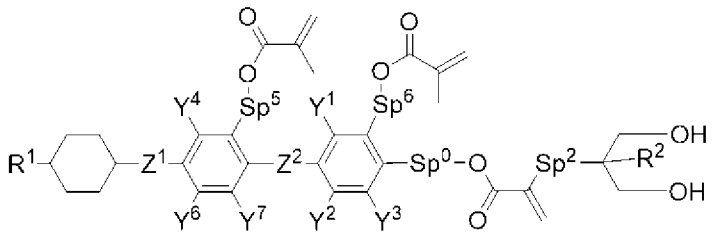
(1-71)



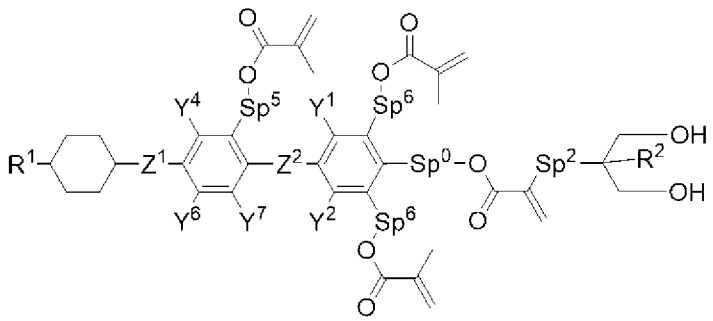
(1-72)



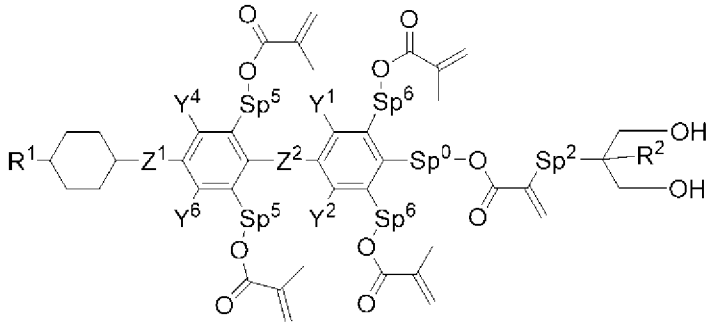
(1-73)



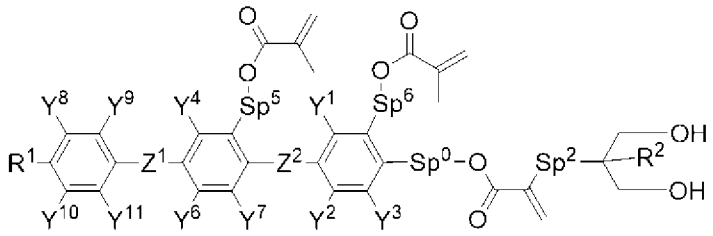
(1-74)



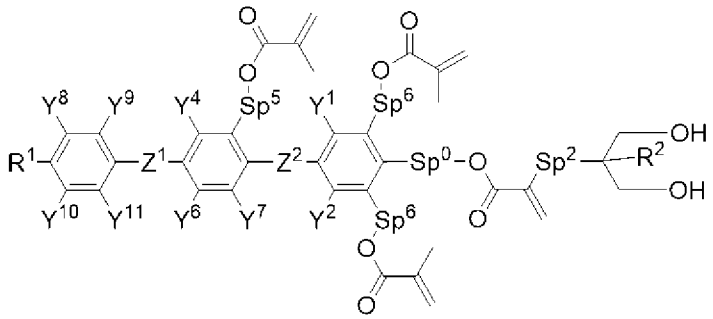
(1-75)



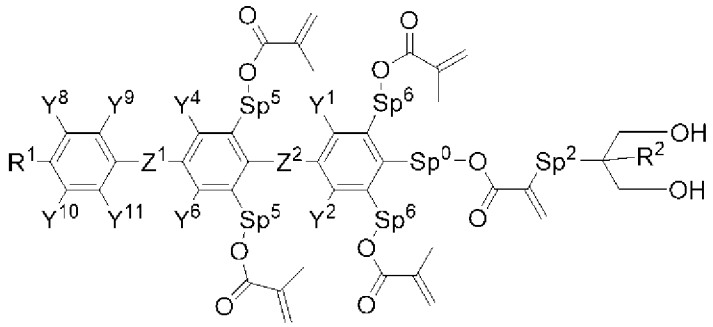
(1-76)



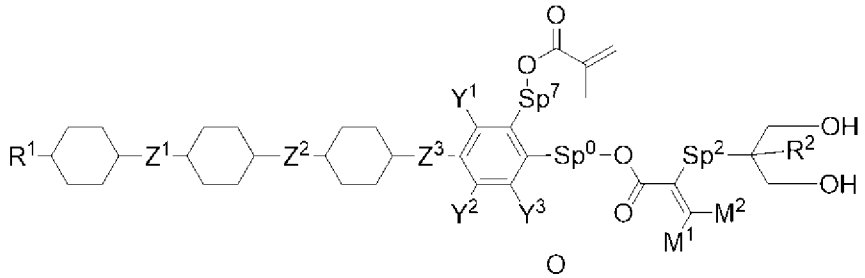
(1-77)



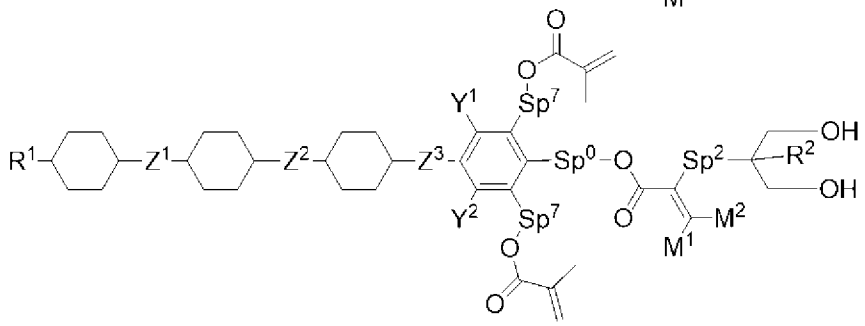
(1-78)



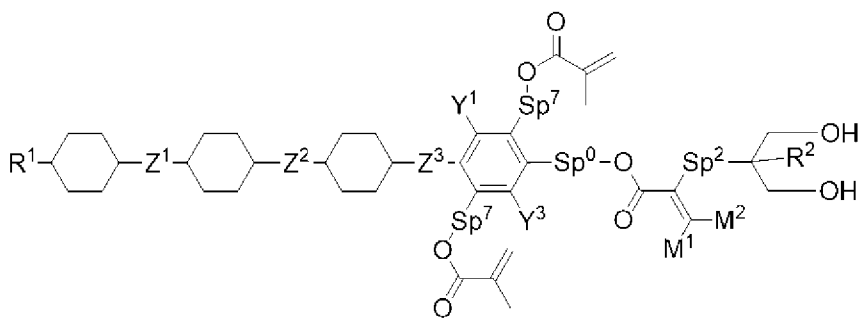
(1-79)



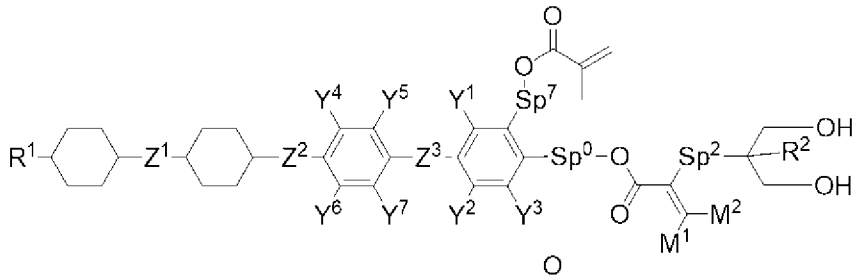
(1-80)



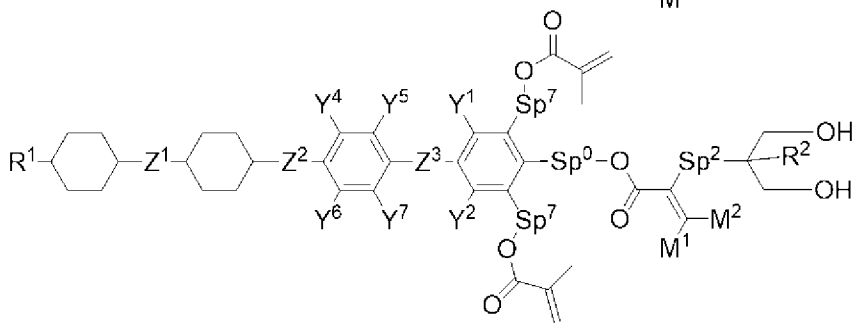
(1-81)



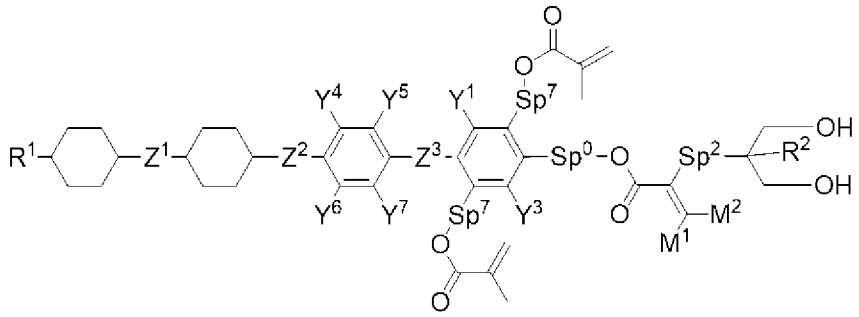
(1-82)



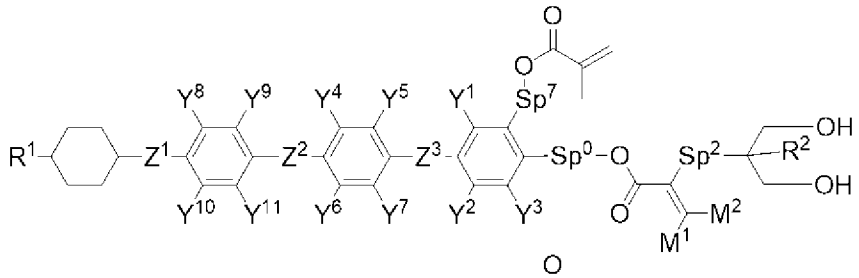
(1-83)



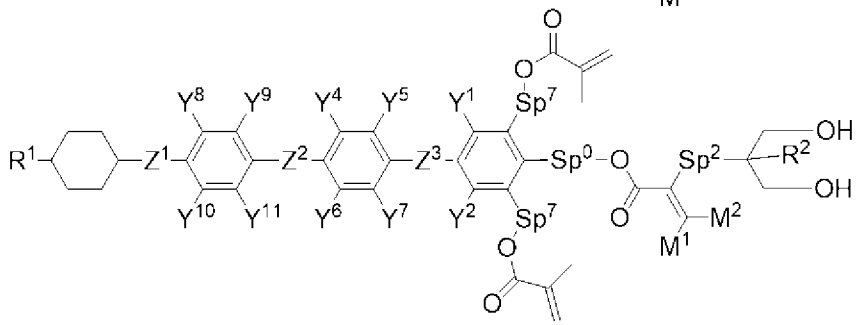
(1-84)



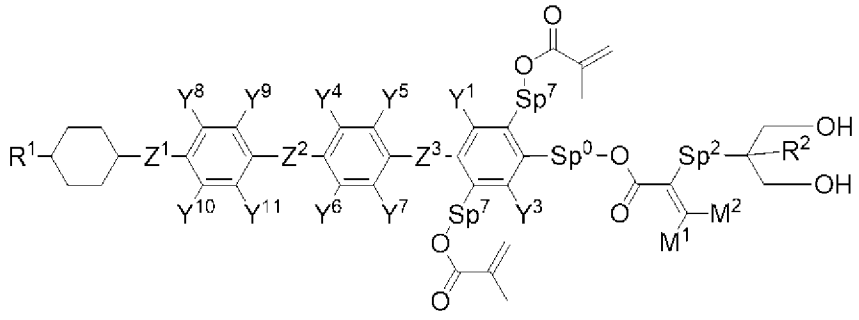
(1-85)



(1-86)



(1-87)



(1-88)

式（１－５４）から式（１－８８）において、

R^1は、炭素数１～１０のアルキルであり；

Z^1およびZ^2は独立して、単結合または－（CH_2）$_2$－であり；

Y^1からY^{11}は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり、

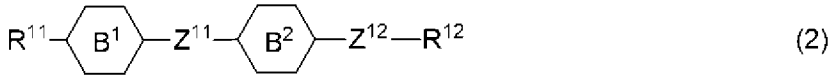
Sp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

R^2は、炭素数１～１０のアルキルである。

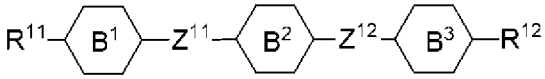
M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。

[0031] 項７．項１から６のいずれか１項に記載の化合物の少なくとも１つを含有する液晶組成物。

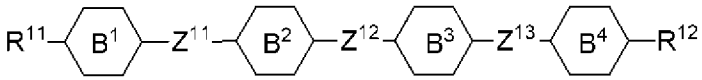
[0032] 項８．式（２）から（４）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有する、項７に記載の液晶組成物。



(2)



(3)



(4)

式（２）から（４）において、

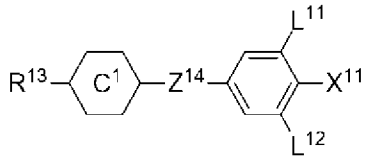
R^{11}およびR^{12}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このR^{11}およびR^{12}において、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

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

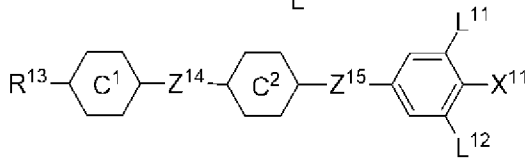
ン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２，５－ジフルオロ－１，４－フェニレン、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

Z^{11}、Z^{12}、およびZ^{13}は独立して、単結合、－ＣＯＯ－、－CH_2CH_2－、－ＣＨ＝ＣＨ－、または－Ｃ≡Ｃ－である。

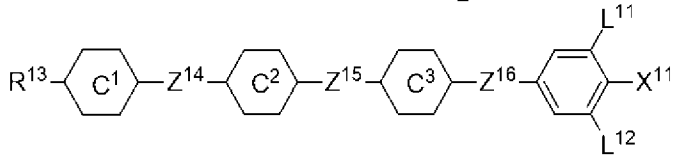
[0033] 項９．式（５）から（７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有する、項７または８に記載の液晶組成物。



(5)



(6)



(7)

式（５）から（７）において、

R^{13}は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から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；

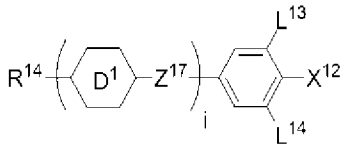
X^{11}は、フッ素、塩素、$-OCF_3$、$-OCHF_2$、$-CF_3$、$-CHF_2$、$-CH_2F$、$-OCF_2CHF_2$、または$-OCF_2CHFCF_3$であり；

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、１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェニレンであり；

Z^{14}、Z^{15}、およびZ^{16}は独立して、単結合、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、$-CH_2O-$、$-OCH_2-$、$-CF_2O-$、$-OCF_2-$、$-CH_2CH_2-$、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、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。

[0034] 項１０．式（８）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有する、項７から９のいずれか１項に記載の液晶組成物。



(8)

式（８）において、

R^{14}は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から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≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎであり；

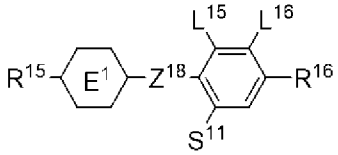
環D^1は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェニレンであり；

Z^{17}は、単結合、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CH_2O－、－OCH_2－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2CH_2－、または－Ｃ≡Ｃ－であり；

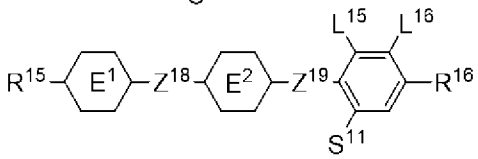
L^{13}およびL^{14}は独立して、水素またはフッ素であり；

ｉは、１、２、３、または４である。

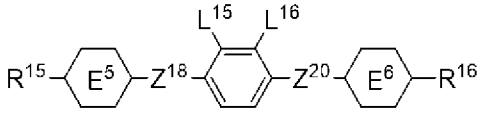
[0035] 項１１．式（１１）から（１９）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有する、項７から１０のいずれか１項に記載の液晶組成物。



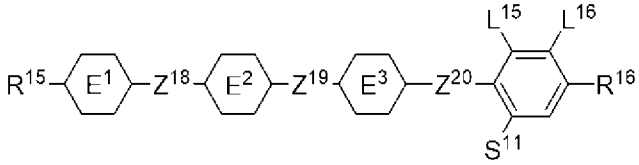
(11)



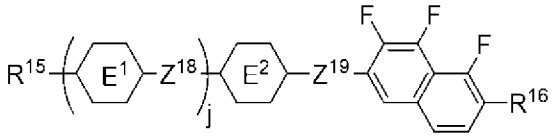
(12)



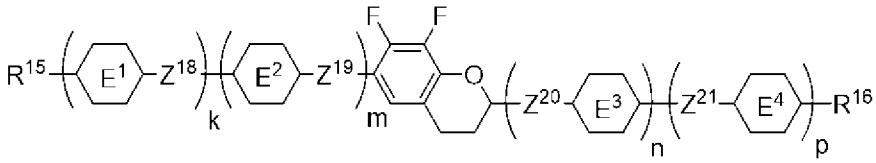
(13)



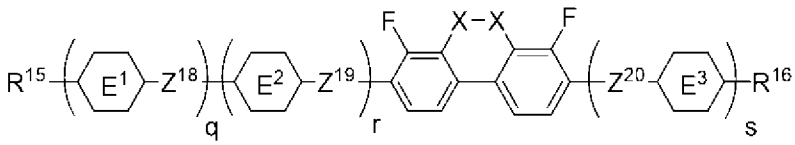
(14)



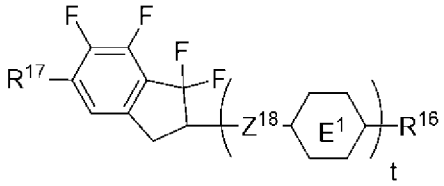
(15)



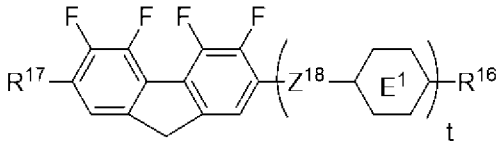
(16)



(17)



(18)



(19)

式（１１）から（１９）において、

Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、およびＲ^{17}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このＲ^{15}、Ｒ^{16}、およびＲ^{17}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、そし

てＲ^{17}は、水素またはフッ素であってもよく；

環Ｅ^{1}、環Ｅ^{2}、環Ｅ^{3}、および環Ｅ^{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、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェニレンであり；

環Ｅ^{5}および環Ｅ^{6}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，テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、またはデカヒドロナフタレン－２，６－ジイルであり；

Ｚ^{18}、Ｚ^{19}、Ｚ^{20}、およびＺ^{21}は独立して、単結合、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CH_2O－、－OCH_2－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2CH_2－、－$CF_2OCH_2CH_2$－、または－$OCF_2CH_2CH_2$－であり；

Ｌ^{15}およびＬ^{16}は独立して、フッ素または塩素であり；

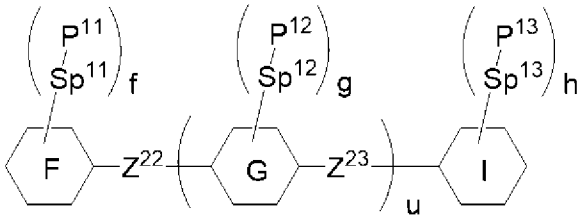
Ｓ^{11}は、水素またはメチルであり；

Ｘは、－ＣＨＦ－または－CF_2－であり；

ｊ、ｋ、ｍ、ｎ、ｐ、ｑ、ｒ、およびｓは独立して、０または１であり、ｋ、ｍ、ｎ、およびｐの和は、１または２であり、ｑ、ｒ、およびｓの和は、０、１、２、または３であり、

ｔは、１、２、または３である。

[0036] 項１２．式（１）で表される化合物以外の、式（２０）で表される少なくとも１つの重合性化合物を含有する、項７から１１のいずれか１項に記載の液晶組成物。



(20)

式（２０）において、

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、この環Ｆおよび環Ｉにおいて、少なくとも１つの水素は、ハロゲン、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から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から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、フェナントレン－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、この環Ｇにおいて、少なくとも１つの水素は、ハロゲン、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から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から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から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、－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、－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、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；

P^{11}、P^{12}、およびP^{13}は独立して、重合性基であり；

Sp^{11}、Sp^{12}、およびSp^{13}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このSp^{11}、Sp^{12}、およびSp^{13}において、少なくとも１つの$-CH_2-$は、－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、－Ｃ

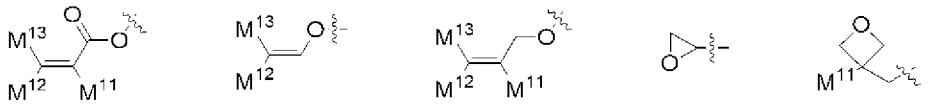
Ｈ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ｕは、０、１、または２であり；

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

[0037] 項１３．式（２０）において、

Ｐ^{11}、Ｐ^{12}、およびＰ^{13}が独立して、式（Ｐ－１）から式（Ｐ－５）で表される重合性基の群から選択された基である、項１２に記載の液晶組成物。

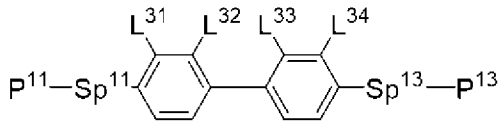


(P-1) (P-2) (P-3) (P-4) (P-5)

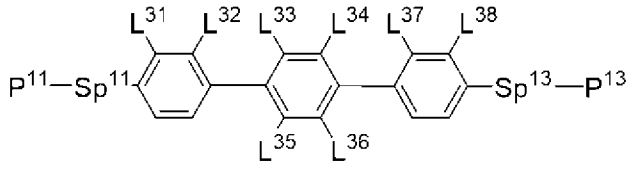
式（Ｐ－１）から式（Ｐ－５）において、

Ｍ^{11}、Ｍ^{12}、およびＭ^{13}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から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から５のアルキルである。

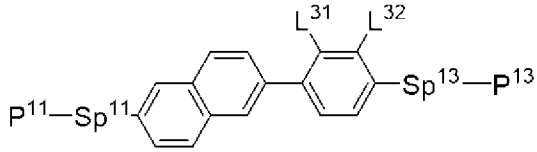
[0038] 項１４．式（２０）で表される重合性化合物が、式（２０－１）から式（２０－７）で表される重合性化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である、項１２または１３に記載の液晶組成物。



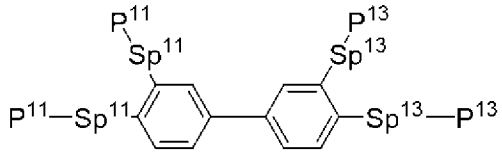
(20-1)



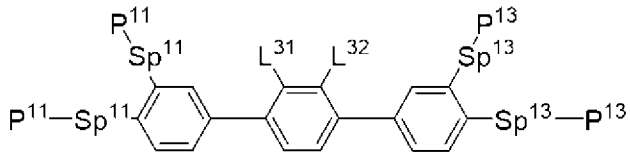
(20-2)



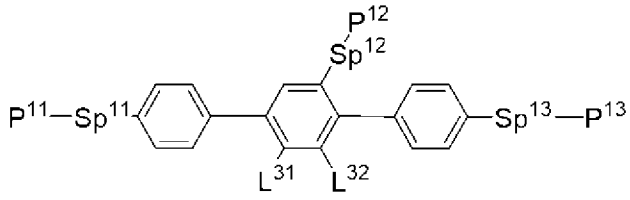
(20-3)



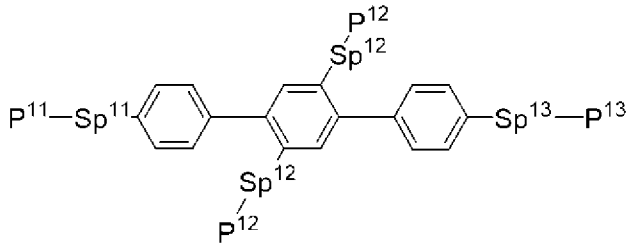
(20-4)



(20-5)



(20-6)



(20-7)

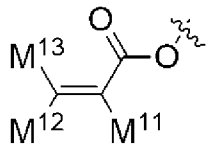
式（２０－１）から式（２０－７）において、

Ｌ^{31}、Ｌ^{32}、Ｌ^{33}、Ｌ^{34}、Ｌ^{35}、Ｌ^{36}、Ｌ^{37}、およびＬ^{38}は独立して、

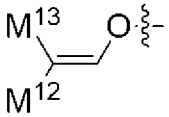
水素、フッ素、またはメチルであり；

Sp^{11}、Sp^{12}、およびSp^{13}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このSp^{11}、Sp^{12}、およびSp^{13}において、少なくとも１つの－CH_2－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

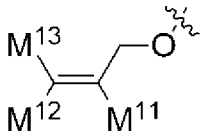
P^{11}、P^{12}、およびP^{13}は独立して、式（Ｐ－１）から式（Ｐ－３）で表される重合性基の群から選択された基であり、



(P-1)



(P-2)



(P-3)

式（Ｐ－１）から式（Ｐ－３）において、

M^{11}、M^{12}、およびM^{13}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から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から５のアルキルである。

[0039] 項１５．式（１）または式（２０）で表される化合物とは異なる重合性化合物、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、色素、および消泡剤の群から選択された少なくとも１つを含有する、項７から１４のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[0040] 項１６．項７から１５のいずれか１項に記載の液晶組成物、および項７から１５のいずれか１項に記載の液晶組成物の少なくとも一部が重合したものからなる群より選択された少なくとも１つを含有する液晶表示素子。

[0041] 本発明は、次の項も含む。

（ａ）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、色素、消泡剤などの添加物の少

なくとも２つをさらに含有する前記の液晶組成物。

（ｂ）前記の液晶組成物に化合物（１）または化合物（２０）とは異なる重合性化合物を添加することによって調製した重合性組成物。

（ｃ）前記の液晶組成物に化合物（１）と化合物（２０）とを添加することによって調製した重合性組成物。

（ｄ）前記重合性組成物を重合させることによって調製した液晶複合体。

（ｅ）この液晶複合体を含有する高分子支持配向型の素子。

（ｆ）前記の液晶組成物に化合物（１）と化合物（２０）と、化合物（１）または化合物（２０）とは異なる重合性化合物とを添加することによって調製した重合性組成物を使用することによって作成した高分子支持配向型の素子。

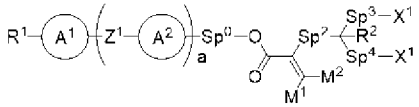
[0042] 以下、化合物（１）の態様、化合物（１）の合成、液晶組成物、および液晶表示素子について順に説明する。

[0043] １．化合物（１）の態様

本発明の化合物（１）は、少なくとも１つの環より構成されるメソゲン部位、２つの極性基、および２つ以上の重合性基を有することを特徴とする。化合物（１）は、極性基がガラス（または金属酸化物）等の基板表面と非共有結合的に相互作用するので有用である。用途の一つは、液晶表示素子に使われる液晶組成物用の添加物であり、この用途において、化合物（１）は液晶分子の配向を制御する目的で添加される。このような添加物は、素子に密閉された条件下では化学的に安定であり、液晶分子を配向させる能力が高く、液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きく、そして液晶組成物への溶解度が大きいことが好ましい。化合物（１）は、このような特性をかなりの程度で充足し、従来の化合物では達成できなかった、液晶組成物への溶解度が極めて大きく、該化合物（１）を用いることで、従来の化合物を用いた場合に比べ、配向性や電圧保持率を同程度またはそれ以上に維持したまま、長期安定性に優れる素子を容易に得ることができる。

[0044] 化合物（１）の好ましい例について説明をする。化合物（１）におけるR^1

、Ａ[1]、Ｓｐ[0]などの記号の好ましい例は、化合物（１）の下位式、例えば式（１－１）などにも適用される。化合物（１）において、これらの基の種類を適切に組み合わせることによって、特性を任意に調整することが可能である。化合物の特性に大きな差異がないので、化合物（１）は、[2]Ｈ（重水素）、[13]Ｃなどの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。



(1)

[0045] Ｒ[1]は、水素または炭素数１から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、－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0046] 好ましいＲ[1]は、炭素数１から１５のアルキル、炭素数２から１５のアルケニル、炭素数１から１４のアルコキシ、または炭素数２から１４のアルケニルオキシであり、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い。

さらに好ましいＲ[1]は、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニルまたは炭素数１から９のアルコキシである。

特に好ましいＲ[1]は、炭素数１から１０のアルキルである。

[0047] Ｒ[1]が炭素数１から１５のアルキルまたは炭素数１から１４のアルコキシである化合物は、化学的安定性が高い。Ｒ[1]が炭素数１から１５のアルキル、炭素数２から１５のアルケニル、または炭素数２から１４のアルケニルオキシである化合物は、液晶組成物への溶解度が大きい。Ｒ[1]が炭素数１～１５のアルキルである化合物は、液晶分子を配向させる能力が高い。

[0048] 環Ａ[1]および環Ａ[2]は独立して、１，２－シクロプロピレン、１，３－シクロブチレン、１，３－シクロペンチレン、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘプチレン、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、またはピリジン－２，５－ジイルであり、この環Ａ[1]および環Ａ[2]において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0049] 好ましい環Ａ[1]および環Ａ[2]は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９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、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0050] より好ましい環Ａ[1]および環Ａ[2]は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－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、フッ素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９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、フッ素で置き換えられてもよい。

[0051] さらに好ましい環Ａ[1]および環Ａ[2]は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－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、フッ素

、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシで置き換えられてもよい。

[0052] 特に好ましい環Ａ[1]および環Ａ[2]は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２位置換、３位置換、または２位および３位置換１，４－フェニレンであり、該置換基としては、好ましくは、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシであり、より好ましくは水素、フッ素、メチル、またはエチルである。

[0053] 環Ａ[1]および環Ａ[2]が独立して、１，３－シクロペンチレン、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘプチレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素が炭素数１から５のアルキルで置き換えられた１，４－フェニレン、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、またはテトラヒドロピラン－２，５－ジイルである化合物は、化学的安定性が高い。環Ａ[1]および環Ａ[2]が独立して、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、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素が炭素数１から５のアルキルで置き換えられた１，４－フェニレン、または少なくとも１つの水素が炭素数２から５のアルケニルで置き換えられた１，４－フェニレンである化合物は、液晶組成物への溶解度が大きい。環Ａ[1]および環Ａ[2]が独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素が炭素数１から２のアルキルで置き換えられた１，４－フェニレンである化合物は、液晶分子を配向させる能力が高い。環Ａ[1]および環Ａ[2]が独立して、１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素が炭素数１から５のアルキルで置き換えられた１，４－フェニレン、少なくとも１つの水素が炭素数１から４のアルコキシで置き換えられた１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルである化合物は、紫外線照射による重合反応性が高い。

[0054] ａは、０、１、２、３、または４であり、好ましくは、０、１、２、または３、であり、より好ましくは、１、２、または３であり、特に好ましくは、１または２である。

[0055] ａが０である化合物は、液晶組成物への溶解度が大きい。ａが３または４である化合物は、液晶分子を配向させる能力が高い。ａが１または２である化合物は、液晶組成物への溶解度が大きく、液晶分子を配向させる能力が高く、紫外線照射による重合反応性が高い。

[0056] Z^1は、単結合または炭素数１から６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、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよい。ただし、隣り合う－CH_2－が、これらの基で連続して置き換えられることはない。

少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－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、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0057] 好ましいZ^1は、単結合、－（CH_2）$_2$－、－（CH_2）$_4$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、または－ＣＦ＝ＣＦ－である。

より好ましいZ^1は、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡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）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－CH_2O－、または－OCH_2－であり、より好ましいZ^1は、単結合または－（CH_2）$_2$－であり、特に好ましいZ^1は、単結合である。

[0058] Z^1が単結合である化合物は、化学的安定性が高い。Z^1が単結合、－（CH_2）$_2$－、－CF_2O－、または－OCF_2－である化合物は、液晶組成物への溶解度が大きい。Z^1が単結合または－（CH_2）$_2$－である化合物は、液晶分子を配向させる能力が高い。Z^1が単結合、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CH_2O－、－OCH_2－である化合物は、紫外

線照射による重合反応性が高い。

[0059] ＳｐＯ、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４は独立して、単結合または炭素数１から１５のアルキレンであり、このＳｐＯ、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４において、少なくとも１つの－ＣＨ２－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0060] 好ましいＳｐＯ、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４は独立して、単結合または炭素数１から７のアルキレンであり、このＳｐＯ、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４において、少なくとも１つの－ＣＨ２－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、または－ＯＣＯ－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、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

[0061] ＳｐＯ、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４は独立して、単結合または炭素数１から７のアルキレンである化合物は、化学的安定性が高い。ＳｐＯ、Ｓｐ１、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４が独立して、炭素数１から７のアルキレン、または炭素数１から７のアルキレンの少なくとも１つの－ＣＨ２－が－Ｏ－で置き換えられた基である化合物は、液晶組成物への溶解度が大きい。

[0062] より好ましいＳｐＯ、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このＳｐＯ、Ｓｐ２、Ｓｐ３、およびＳｐ４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い。

[0063] 液晶組成物への溶解性により優れる化合物となる等の点から、特に好ましいＳｐＯは、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このＳｐＯ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；

特に好ましいＳｐ２は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このＳｐ２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、さらに好ましくは－CH_2－であり；

特に好ましいSp^4およびSp^3は－CH_2－である。

[0064] M^1、およびM^2は独立して、水素、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり、好ましくは水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり、紫外線照射による重合反応性が特に高い化合物となる等の点から、より好ましくは、水素である。

[0065] R^2は、炭素数１から１０のアルキルであり、このR^2において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

好ましいR^2は、炭素数１から５のアルキルであり、このR^2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い。液晶組成物への溶解性により優れ、化学的安定性が高く、液晶分子を配向させる能力が高い化合物となる等の点から、より好ましいR^2は、炭素数１から４のアルキルであり、特に好ましいR^2は、エチル、プロピル、またはブチルである。

[0066] X^1は独立して、－ＯＨ、－NH_2、－OR^3、－$N(R^3)_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、または－$Si(R^3)_3$である。

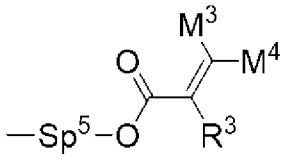
液晶組成物への溶解性により優れる化合物となる等の点から、好ましいX^1は、－ＯＨ、－NH_2、または－ＳＨであり、特に好ましいX^1は、－ＯＨである。

ここで、R^3は水素または炭素数１から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、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い。

[0067] X^1が－ＯＨ、－NH_2、または－ＳＨである化合物は、液晶分子を配向さ

せる能力が高い。X^1が－ＯＨである化合物は、化学的安定性が高く、液晶分子を配向させる能力が高く、液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きく、そして液晶組成物への溶解度が大きい。

[0068] ただし、環A^2またはSp^0おいて、少なくとも１つの水素は、式（１－ａ）で置き換えられる。



(1-a)

[0069] Sp^5は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このSp^5において、少なくとも１つの－CH_2－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0070] Sp^5が、単結合または炭素数１から７のアルキレンである化合物は、化学的安定性が高い。Sp^5が、炭素数１から７のアルキレン、または炭素数１から７のアルキレンの少なくとも１つの－CH_2－が－Ｏ－で置き換えられた基である化合物は、液晶組成物への溶解度が大きい。

[0071] より好ましいSp^5は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^5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い。

[0072] 液晶組成物への溶解性により優れる化合物となる等の点から、特に好ましくは、Sp^5は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^5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い。

[0073] M^3、およびM^4は独立して、水素、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素

数１から５のアルキルであり、好ましくは水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり、紫外線照射による重合反応性が特に高い化合物となる等の点から、より好ましくは、水素である。

[0074] R^3は、炭素数１から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－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、より好ましくは水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり、紫外線照射による重合反応性が特に高い化合物となる等の点から、より好ましくは、水素、メチルまたはエチルである。

[0075] 好ましい化合物（１）の例は、項３に記載した化合物（１－１）から（１－８）である。より好ましい化合物（１）の例は、項４に記載した化合物（１－９）から（１－１６）である。さらに好ましい化合物（１）の例は、項５に記載した化合物（１－１７）から（１－５３）である。最も好ましい化合物（１）の例は、項６に記載した化合物（１－５４）から（１－８８）である。

[0076] ２．化合物（１）の合成

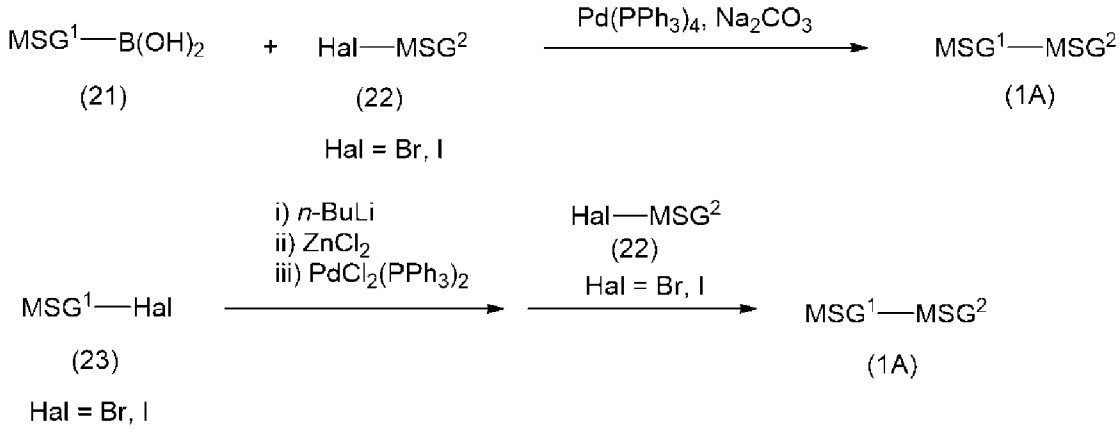
化合物（１）の合成法について説明する。化合物（１）は、有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成できる。合成法を記載しなかった化合物は、「オーガニック・シンセシス」（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc）、「オーガニック・リアクションズ」（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc）、「コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス」（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、「新実験化学講座」（丸善）などの成書に記載された方法によって合成できる。

[0077] ２－１．結合基の生成

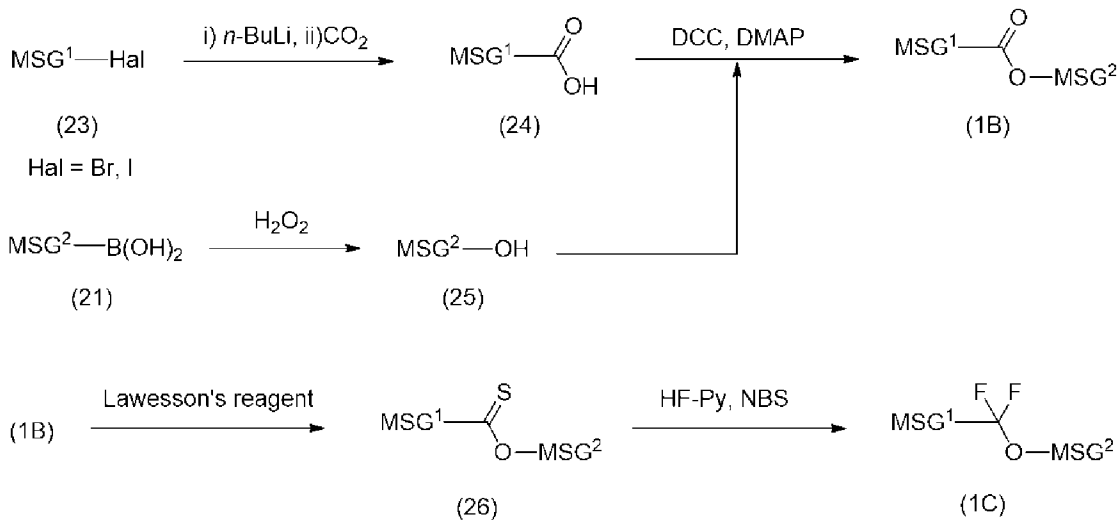
化合物（１）における結合基を生成する方法の例は、下記のスキームのと

おりである。このスキームにおいて、ＭＳＧ^{1}（またはＭＳＧ^{2}）は、少なくとも１つの環を有する一価の有機基である。複数のＭＳＧ^{1}（またはＭＳＧ^{2}）が表す一価の有機基は、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（１）または化合物（１）の中間体に相当する。

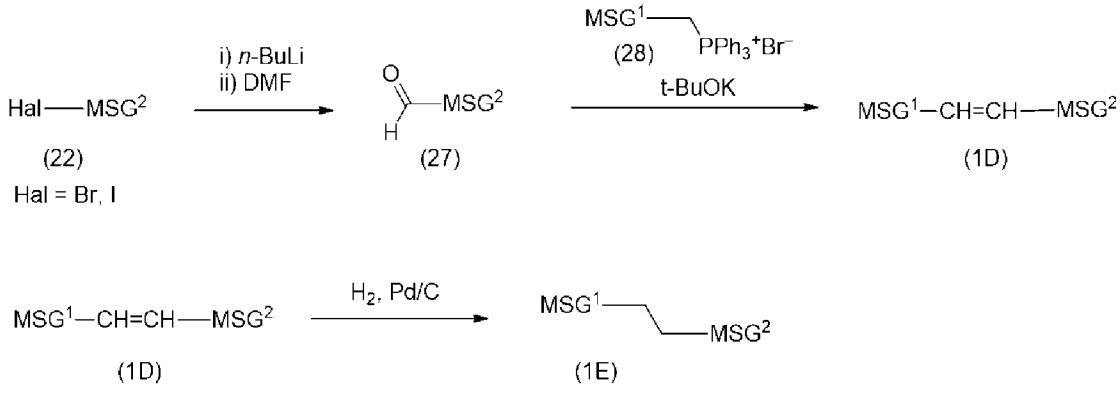
[0078]



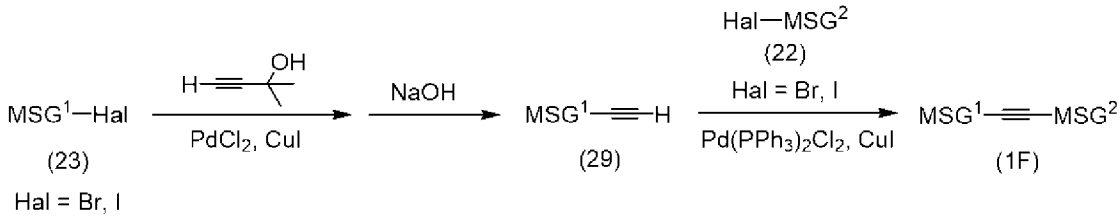
[0079]



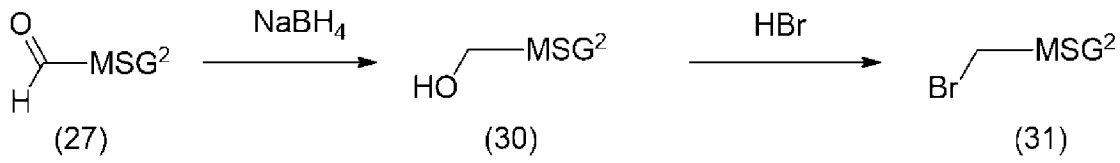
[0080]

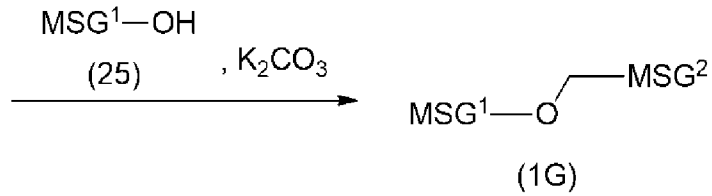


[0081]

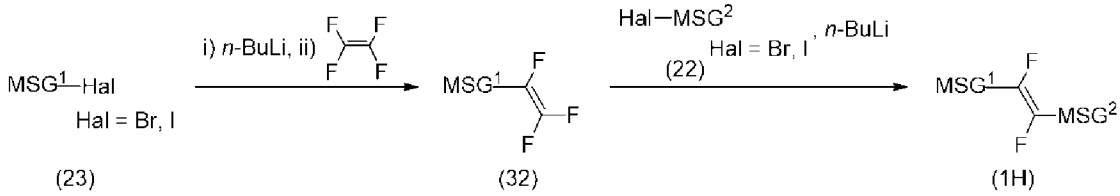


[0082]





[0083]



[0084] （ｉ）単結合の生成

ホウ酸化合物（２１）と化合物（２２）とを、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できる。

[0085] （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）から誘導したアルコール（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。

[0086] （ＩＩＩ）－ＣＦ$_2$Ｏ－と－ＯＣＦ$_2$－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、－ＣＦ$_2$Ｏ－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できる。W. H. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768.を参照。この方法によって－ＯＣＦ$_2$－を有する化合物も合成できる。

[0087] （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ｔｅｒｔ－ブトキシドを反応させて発生させたリンイリドとを、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。

[0088] （Ｖ）－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－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。

[0089] （ＶＩ）－Ｃ≡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後、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。

[0090] （ＶＩＩ）－ＣＨ$_2$Ｏ－と－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）とを反応させて、化合物（１Ｇ）

を合成する。この方法によって－ＯＣＨ$_2$－を有する化合物も合成できる。

[0091] （ＶＩＩＩ）－ＣＦ＝ＣＦ－の生成

化合物（２３）をｎ－ブチルリチウムで処理した後、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後、化合物（３２）と反応させて、化合物（１Ｈ）を合成する。

[0092] ２－２．環Ａ^{1}およびＡ^{2}の生成

１，２－シクロプロピレン、１，３－シクロブチレン、１，３－シクロペンチレン、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘプチレン、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。

[0093] ２－３．合成例

化合物（１）を合成する方法の例は、次のとおりである。これらの化合物において、Ｒ^1、Ｒ^2、Ａ^1、Ａ^2、Ｚ^1、Ｓｐ^1、Ｓｐ^2、Ｓｐ^3、およびａの定義は、項１に記載と同一である。

[0094] 式（１）において、Ｍ^1、およびＭ^{2}が水素であり、Ｘ^{1}が－ＯＨである化合物（１－５１）は、以下の方法で合成できる。

化合物（５１）を対応するアセトン溶媒中でｐ－トルエンスルホン酸一水和物およびトリエチルアミンと反応させ、化合物（５２）を得る。化合物（５２）をジクロロメタン溶媒中でトシルクロライドおよびピリジンと反応させ、化合物（５３）を得る。化合物（５３）を２－ブタノン溶媒中でヨウ化ナトリウムと反応させ、化合物（５４）を得る。

化合物（５４）をＤＭＦ溶媒中水素化ナトリウム存在下で、化合物（５５）と反応させ、さらに水存在下炭酸カリウムおよびパラホルムアルデヒドと反

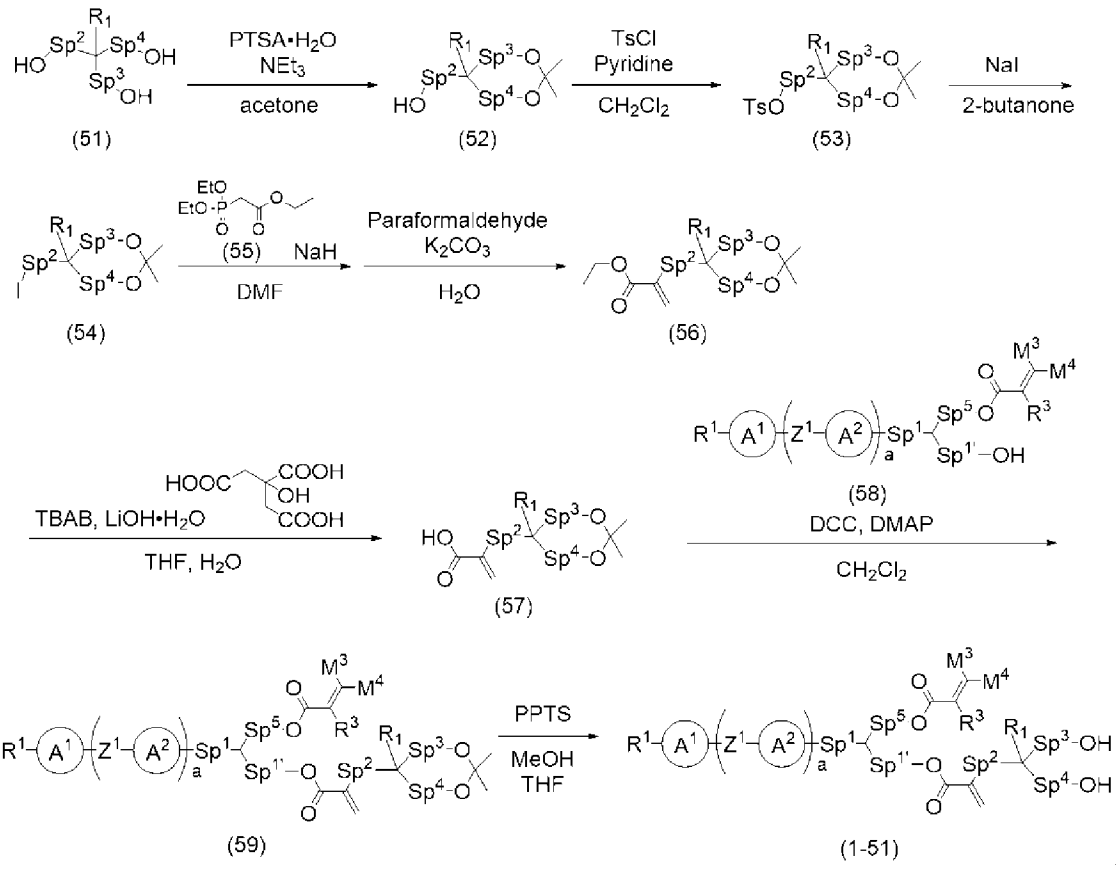
応させることで化合物（５６）を得る。

化合物（５６）をテトラブチルアンモニウムブロミド（ＴＢＡＢ）、ＴＨＦおよび水存在下で、水酸化リチウム・一水和物と反応させクエン酸でｐＨを４に調整し化合物（５７）を得る。

公知の方法で合成される（５８）と化合物（５７）をジクロロメタン溶媒中、ＤＣＣおよびＤＭＡＰの存在下で反応させ化合物（５９）を得る。

化合物（５９）を得た後、ＴＨＦとメタノールの混合溶媒中でＰＰＴＳを用いて脱保護させる事により、化合物（１－５１）へと導く事ができる。

[0095]



[0096] ３．液晶組成物

３－１．成分化合物

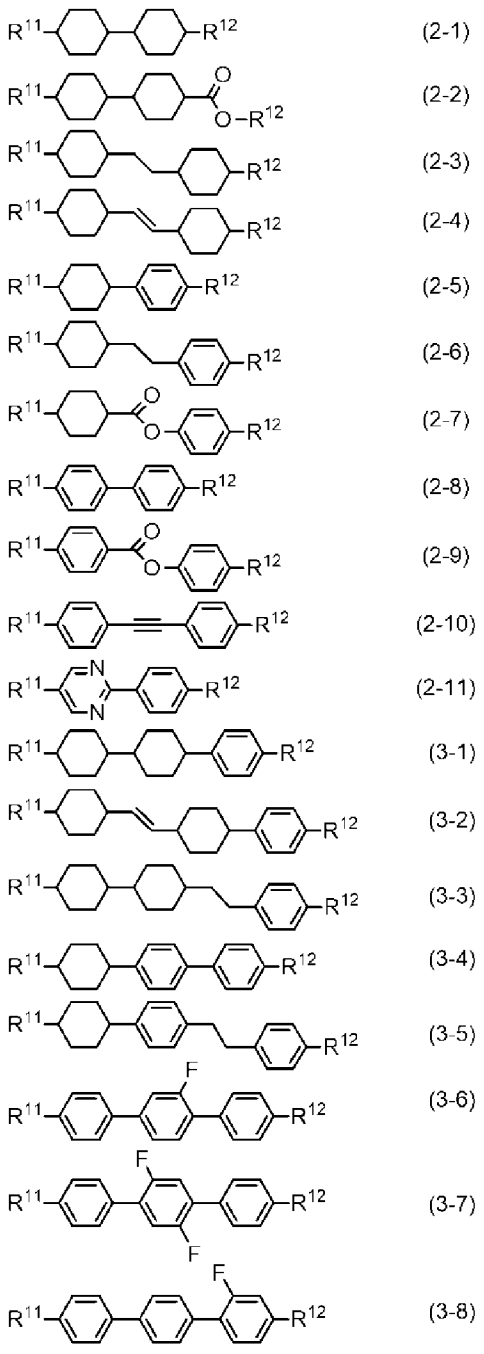
本発明の液晶組成物は、化合物（１）を成分Ａとして含む。化合物（１）は、素子の基板との非共有結合的な相互作用によって、液晶分子の配向を制御することができる。この組成物は、化合物（１）を成分Ａとして含み、下記成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥから選択された少なくとも１つの液晶性化合物

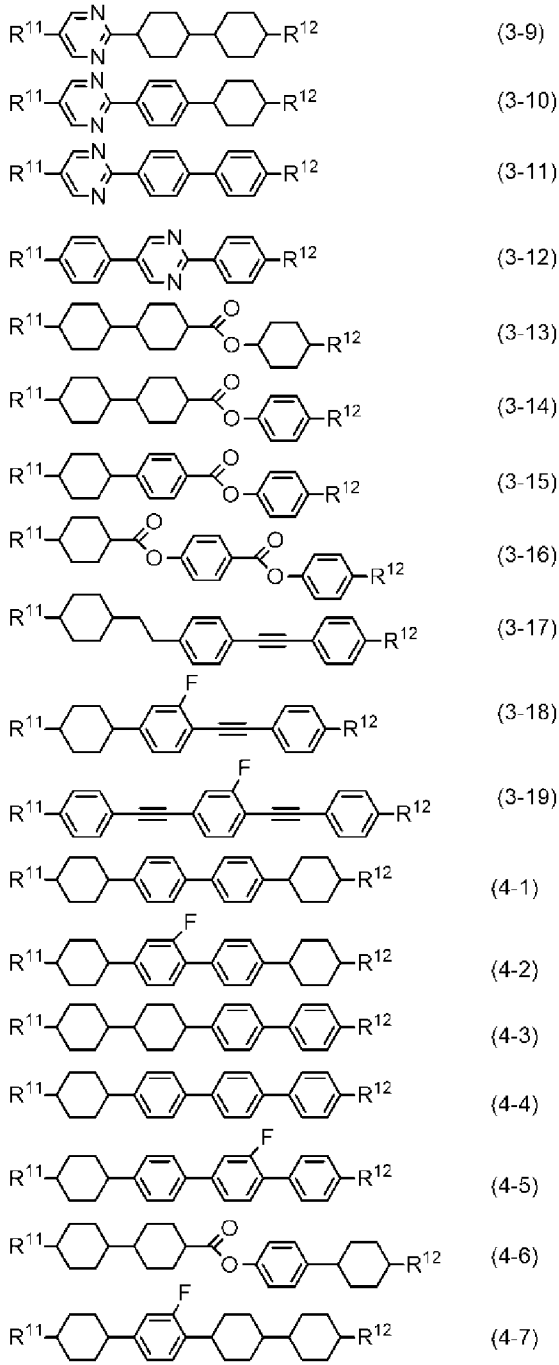
をさらに含むことが好ましい。成分Ｂは、化合物（２）から（４）である。成分Ｃは、化合物（２）から（４）以外の化合物（５）から（７）である。成分Ｄは、化合物（８）である。成分Ｅは、化合物（１１）から（１９）である。この組成物は、化合物（２）から（８）および（１１）から（１９）とは異なる、その他の液晶性化合物を含んでもよい。この組成物を調製するときには、正または負の誘電率異方性の大きさなどを考慮して成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥを選択することが好ましい。成分を適切に選択した組成物は、高い上限温度、低い下限温度、低粘度、適切な光学異方性（すなわち、大きな光学異方性または小さな光学異方性）、正または負に大きな誘電率異方性、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。

[0097] 化合物（１）は、液晶分子の配向を制御する目的で、組成物に添加される。液晶組成物１００重量％に対する化合物（１）の好ましい割合は、液晶分子を容易に配向させることができる等の点から、０．０５重量％以上であり、素子の表示不良をより防ぐことができる等の点から、１０重量％以下であることが好ましい。さらに好ましい割合は、０．１重量％から７重量％の範囲であり、特に好ましい割合は、０．４重量％から５重量％の範囲である。これらの割合は、化合物（２０）を含む組成物に対しても適用される。

[0098] 成分Ｂは、２つの末端基がアルキルなどである化合物である。成分Ｂは、小さな誘電率異方性を有する。成分Ｂの好ましい例として、化合物（２－１）から（２－１１）、化合物（３－１）から（３－１９）、および化合物（４－１）から（４－７）を挙げることができる。これらの化合物において、R^{11}およびR^{12}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このR^{11}およびR^{12}において、少なくとも１つの－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い。

[0099]


(2-1)
(2-2)
(2-3)
(2-4)
(2-5)
(2-6)
(2-7)
(2-8)
(2-9)
(2-10)
(2-11)
(3-1)
(3-2)
(3-3)
(3-4)
(3-5)
(3-6)
(3-7)
(3-8)


(3-9)
(3-10)
(3-11)
(3-12)
(3-13)
(3-14)
(3-15)
(3-16)
(3-17)
(3-18)
(3-19)
(4-1)
(4-2)
(4-3)
(4-4)
(4-5)
(4-6)
(4-7)

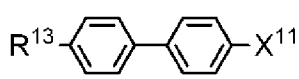
[0100] 成分Ｂは、誘電率異方性の絶対値が小さいので、中性に近い化合物である。化合物（２）は、主として粘度の減少または光学異方性の調整に効果がある。化合物（３）および（４）は、上限温度を高くすることによってネマチック相の温度範囲を広げる効果、または光学異方性の調整に効果がある。

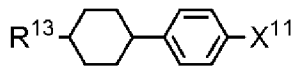
[0101] 成分Ｂの含有量を増加させるにつれて組成物の誘電率異方性が小さくなるが粘度は小さくなる。このため、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り

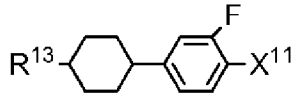
、成分Ｂの含有量は多いほうが好ましい。成分Ｂの含有量は、液晶組成物１００重量％に対し、好ましくは３０重量％以上、さらに好ましくは４０重量％以上であり、その上限は特に制限されないが、例えば９９．９５重量％である。

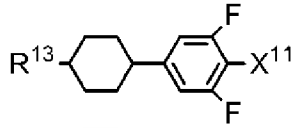
[0102] 成分Ｃは、少なくとも一方の末端にフッ素、塩素またはフッ素含有基を有する化合物である。成分Ｃは、正に大きな誘電率異方性を有する。成分Ｃの好ましい例として、化合物（５－１）から（５－１６）、化合物（６－１）から（６－１１６）、化合物（７－１）から（７－５９）を挙げることができる。成分Ｃの化合物において、R^{13}は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このR^{13}において、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；X^{11}は、フッ素、塩素、－OCF_3、－$OCHF_2$、－CF_3、－CHF_2、－CH_2F、－OCF_2CHF_2、または－OCF_2CHFCF_3である。

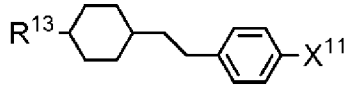
[0103]

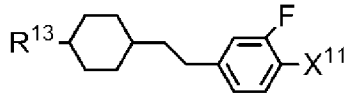

(5-1)

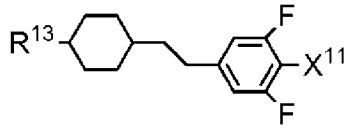

(5-2)

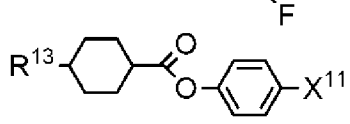

(5-3)

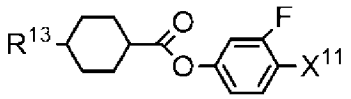

(5-4)

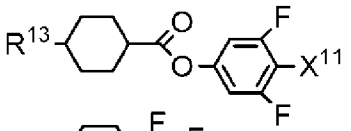

(5-5)

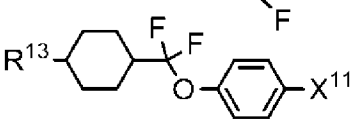

(5-6)

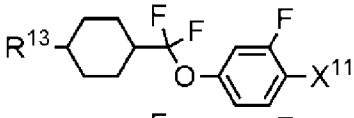

(5-7)

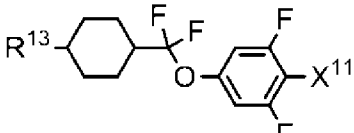

(5-8)

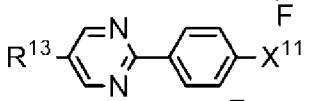

(5-9)

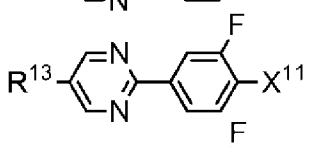

(5-10)

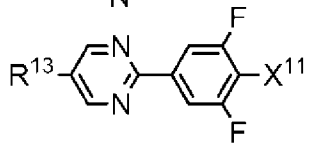

(5-11)


(5-12)

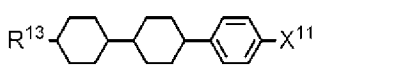

(5-13)

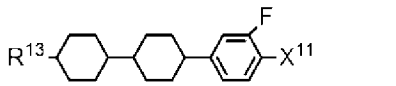

(5-14)

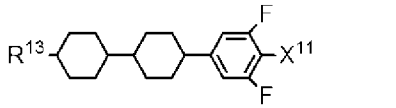

(5-15)

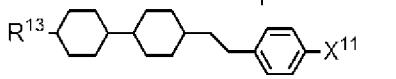

(5-16)

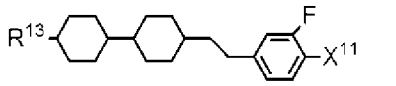
[0104]

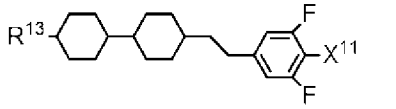

(6-1)

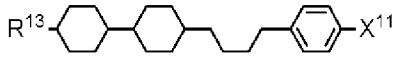

(6-2)

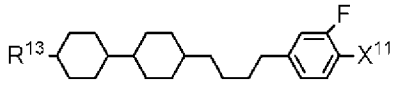

(6-3)

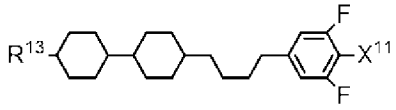

(6-4)

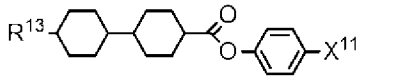

(6-5)

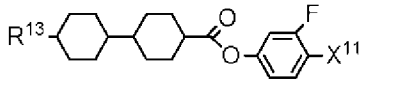

(6-6)

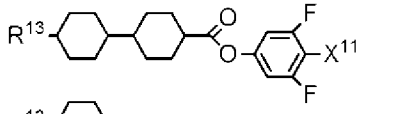

(6-7)

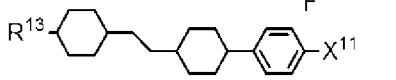

(6-8)

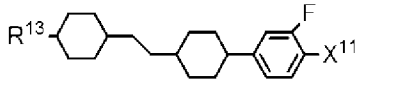

(6-9)

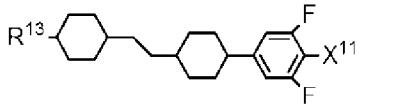

(6-10)

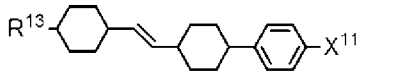

(6-11)

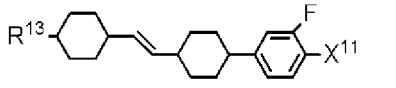

(6-12)

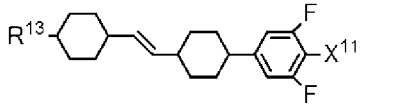

(6-13)

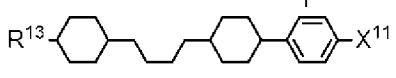

(6-14)

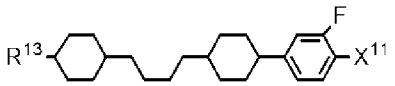

(6-15)

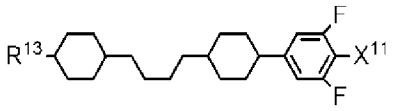

(6-16)

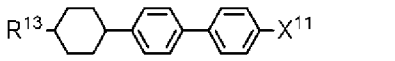

(6-17)

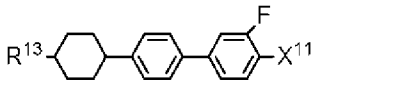

(6-18)

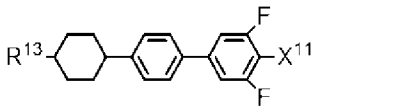

(6-19)

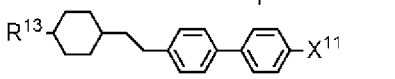

(6-20)

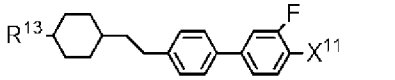

(6-21)

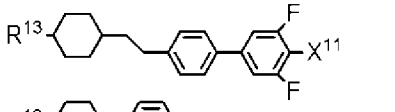

(6-22)

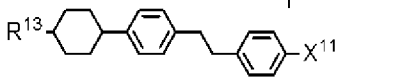

(6-23)

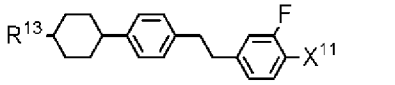

(6-24)

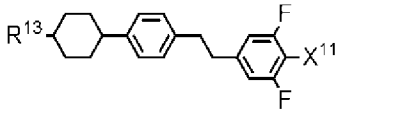

(6-25)

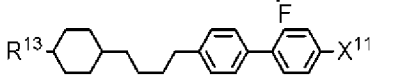

(6-26)

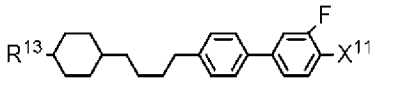

(6-27)

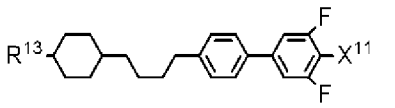

(6-28)

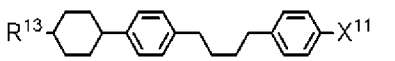

(6-29)

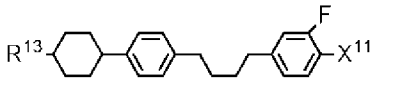

(6-30)

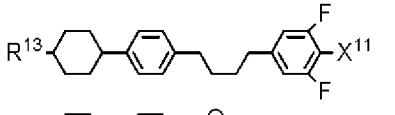

(6-31)

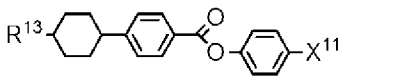

(6-32)

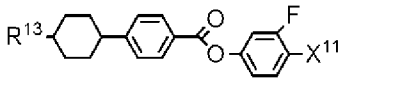

(6-33)


(6-34)

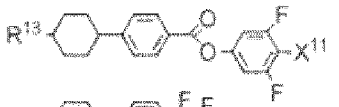

(6-35)

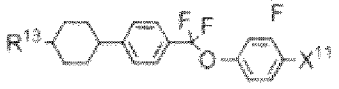

(6-36)

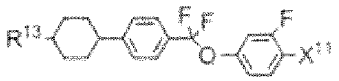

(6-37)

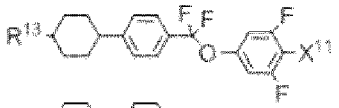

(6-38)

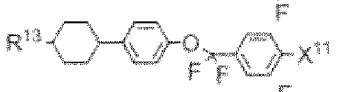
[0105]

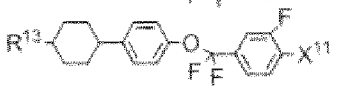

(6-39)

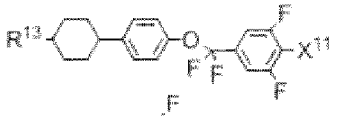

(6-40)

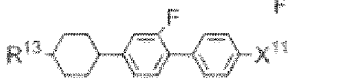

(6-41)

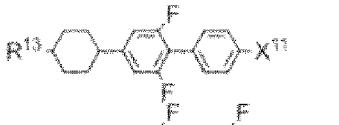

(6-42)

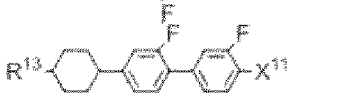

(6-43)

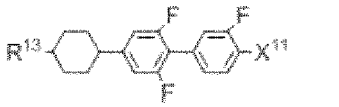

(6-44)

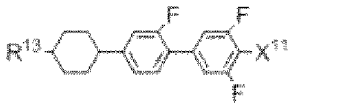

(6-45)

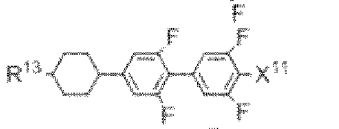

(6-46)

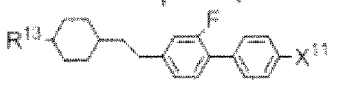

(6-47)

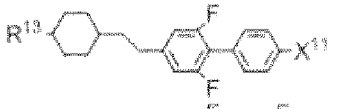

(6-48)

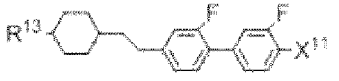

(6-49)

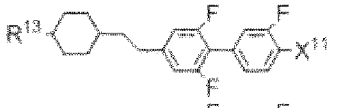

(6-50)

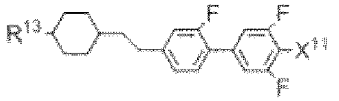

(6-51)

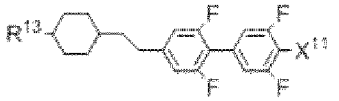

(6-52)

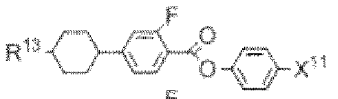

(6-53)

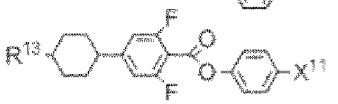

(6-54)

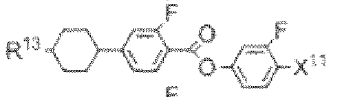

(6-55)

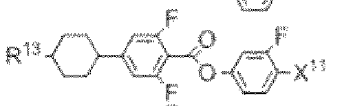

(6-56)

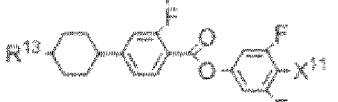

(6-57)

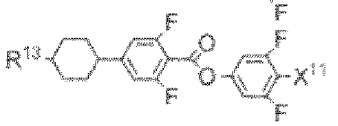

(6-58)


(6-59)

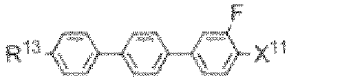

(6-60)

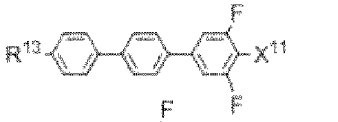

(6-61)

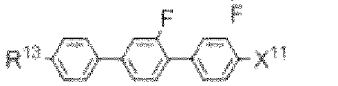

(6-62)

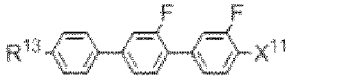

(6-63)

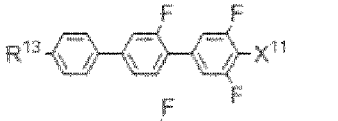

(6-64)

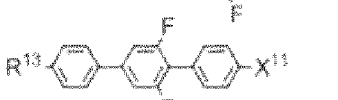

(6-65)

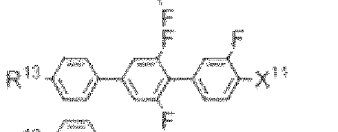

(6-66)

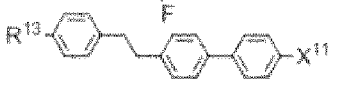

(6-67)

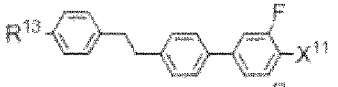

(6-68)

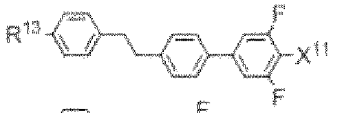

(6-69)

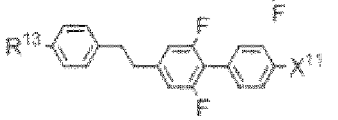

(6-70)

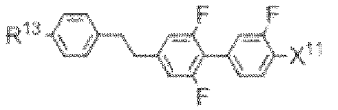

(6-71)


(6-72)

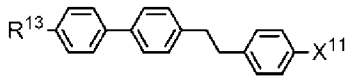

(6-73)

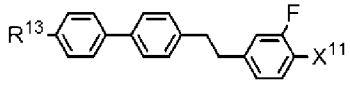

(6-74)

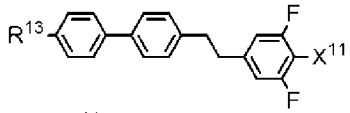

(6-75)

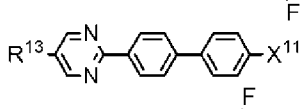

(6-76)

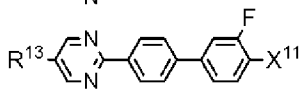
[0106]

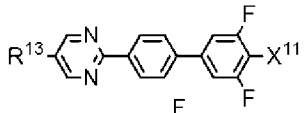

(6-77)

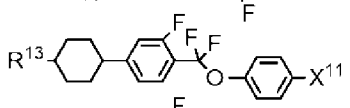

(6-78)

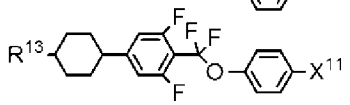

(6-79)

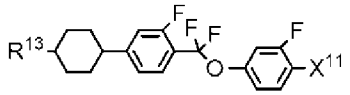

(6-80)

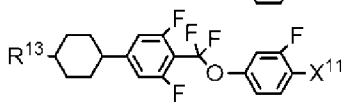

(6-81)

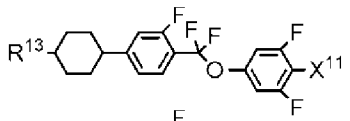

(6-82)

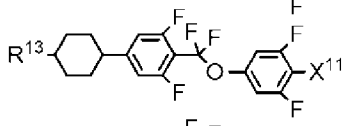

(6-83)

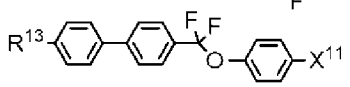

(6-84)

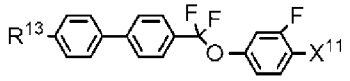

(6-85)

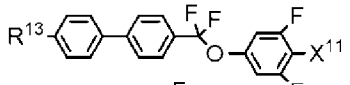

(6-86)

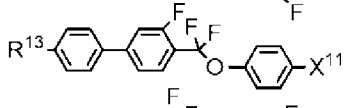

(6-87)

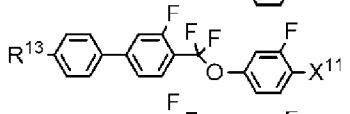

(6-88)

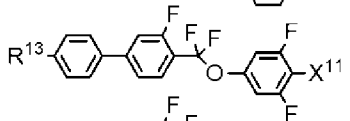

(6-89)

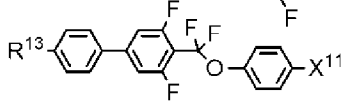

(6-90)

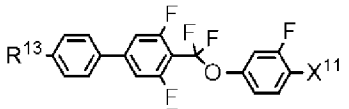

(6-91)

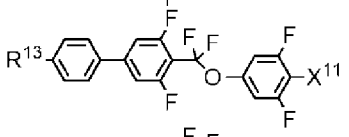

(6-92)

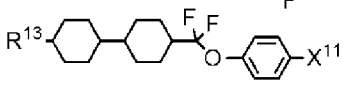

(6-93)

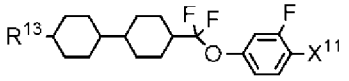

(6-94)

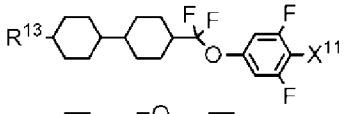

(6-95)

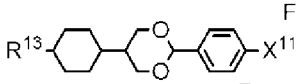

(6-96)

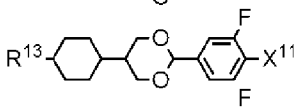

(6-97)

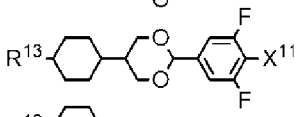

(6-98)

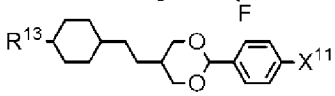

(6-99)

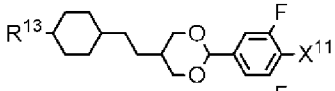

(6-100)

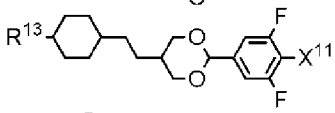

(6-101)

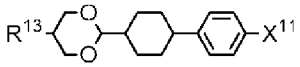

(6-102)

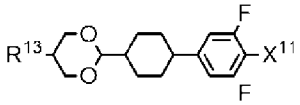

(6-103)

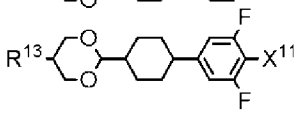

(6-104)

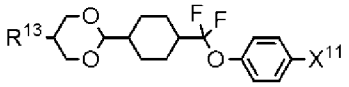

(6-105)

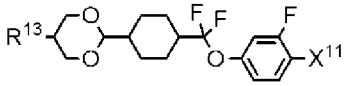

(6-106)

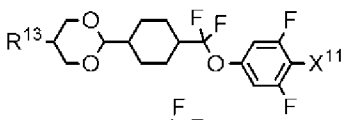

(6-107)

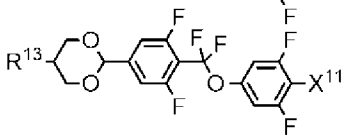

(6-108)


(6-109)

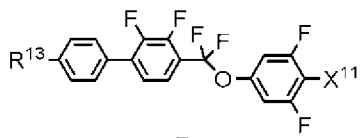

(6-110)


(6-111)

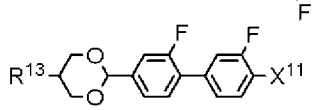

(6-112)


(6-113)

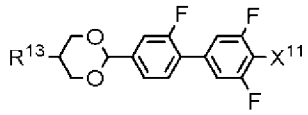
[0107]



(6-114)

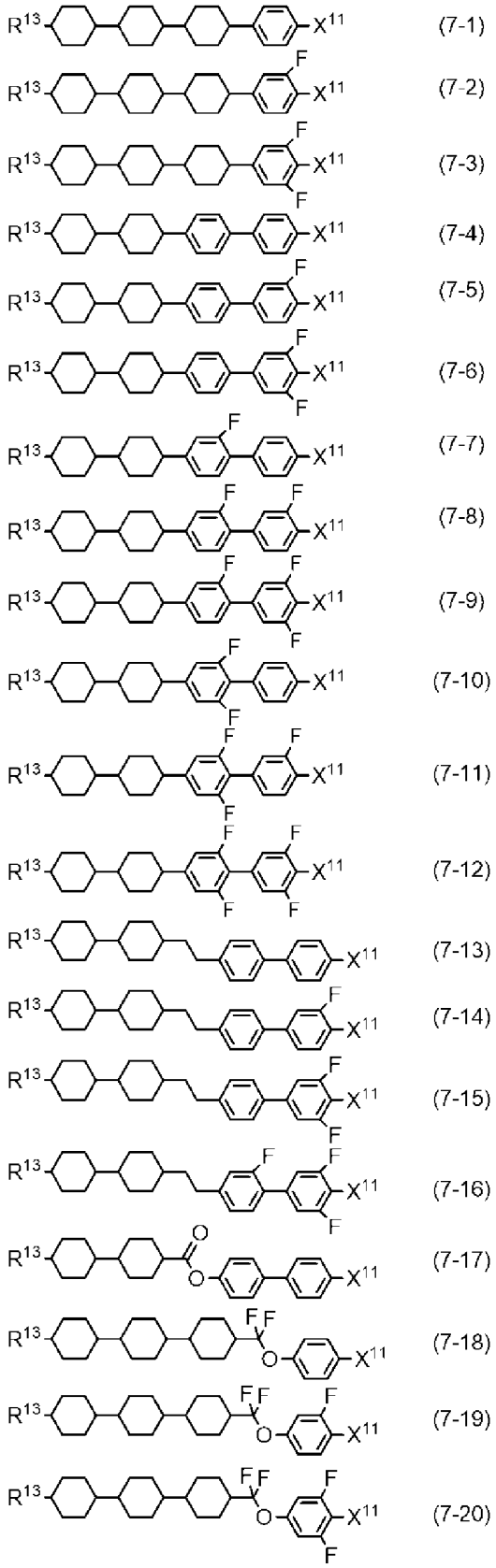


(6-115)

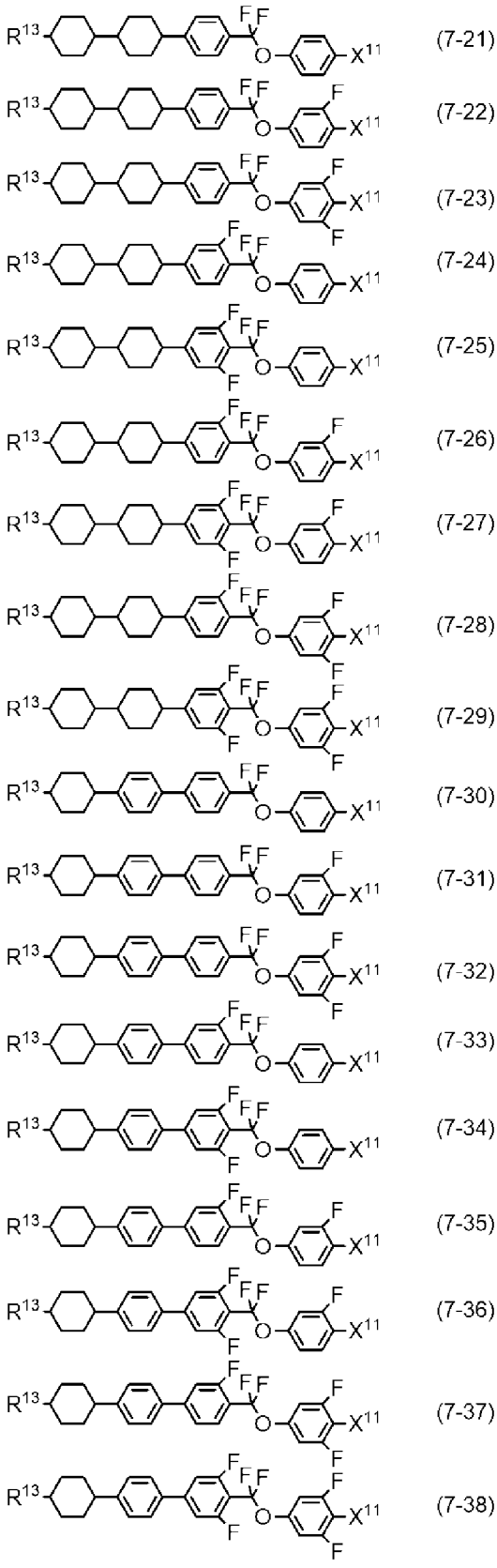


(6-116)

[0108]

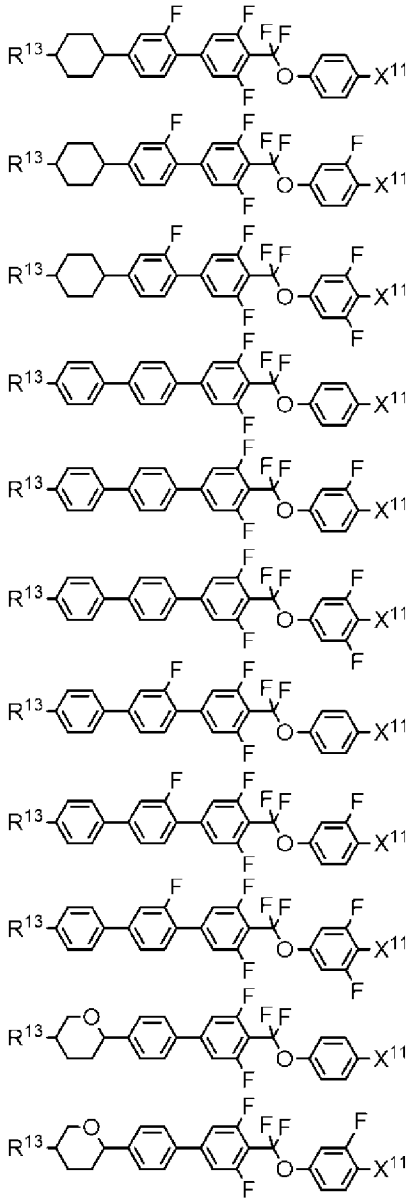


(7-1)
(7-2)
(7-3)
(7-4)
(7-5)
(7-6)
(7-7)
(7-8)
(7-9)
(7-10)
(7-11)
(7-12)
(7-13)
(7-14)
(7-15)
(7-16)
(7-17)
(7-18)
(7-19)
(7-20)



(7-21)
(7-22)
(7-23)
(7-24)
(7-25)
(7-26)
(7-27)
(7-28)
(7-29)
(7-30)
(7-31)
(7-32)
(7-33)
(7-34)
(7-35)
(7-36)
(7-37)
(7-38)

[0109]


(7-39)

(7-40)

(7-41)

(7-42)

(7-43)

(7-44)

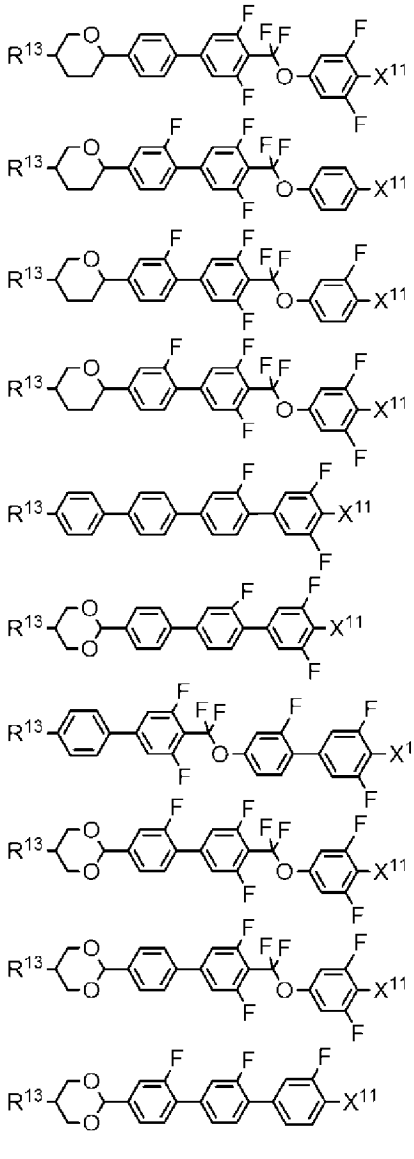
(7-45)

(7-46)

(7-47)

(7-48)

(7-49)


(7-50)

(7-51)

(7-52)

(7-53)

(7-54)

(7-55)

(7-56)

(7-57)

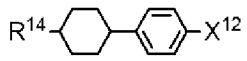
(7-58)

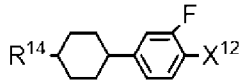
(7-59)

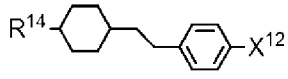
[0110] 成分Ｃは、誘電率異方性が正であり、熱、光などに対する安定性が非常に良好であるので、ＩＰＳ、ＦＦＳ、ＯＣＢなどのモード用の組成物を調製する場合に好適に用いられる。液晶組成物１００重量％に対する成分Ｃの含有量は、１重量％から９９重量％の範囲が適しており、好ましくは１０重量％から９７重量％の範囲、さらに好ましくは４０重量％から９５重量％の範囲である。成分Ｃを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Ｃの含有量は液晶組成物１００重量％に対し、３０重量％以下が好ましい。成分Ｃを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

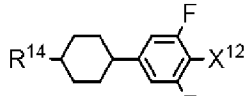
[0111] 成分Ｄは、片末端基が－Ｃ≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎである化合物（８）である。成分Ｄは、シアノ基を有するので正により大きな誘電率異方性を有する。成分Ｄの好ましい例として、化合物（８－１）から（８－６４）を挙げることができる。成分Ｄの化合物において、R^{14}は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このR^{14}において、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；－X^{12}は－Ｃ≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎである。

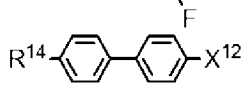
[0112]

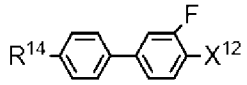

(8-1)

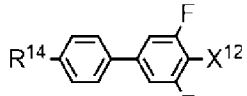

(8-2)

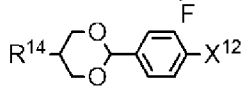

(8-3)

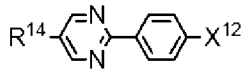

(8-4)

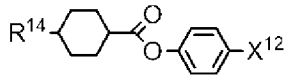

(8-5)

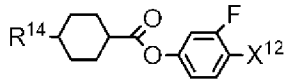

(8-6)

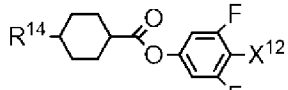

(8-7)

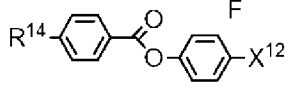

(8-8)

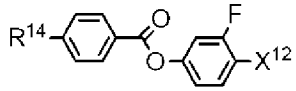

(8-9)

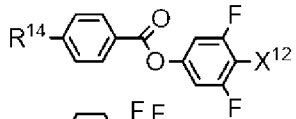

(8-10)

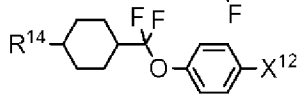

(8-11)

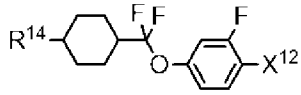

(8-12)

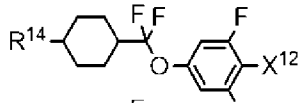

(8-13)

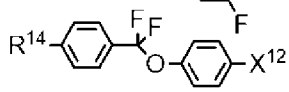

(8-14)

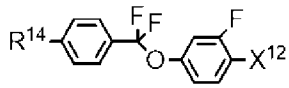

(8-15)

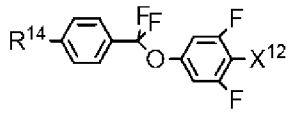

(8-16)

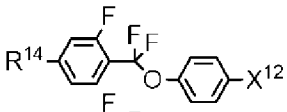

(8-17)

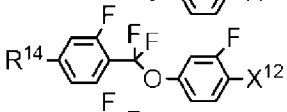

(8-18)

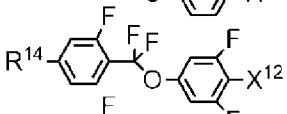

(8-19)

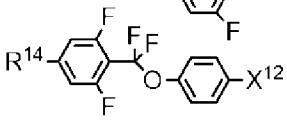

(8-20)

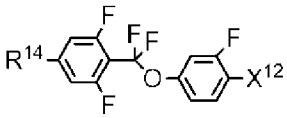

(8-21)

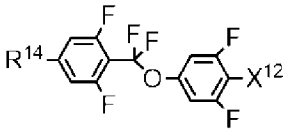

(8-22)

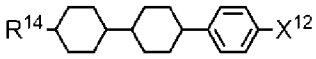

(8-23)

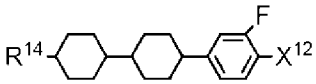

(8-24)

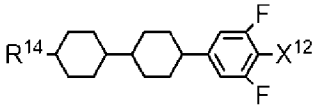

(8-25)

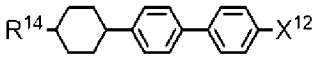

(8-26)

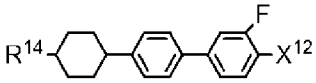

(8-27)

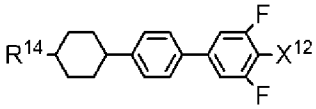

(8-28)

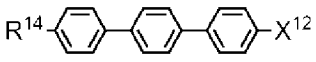

(8-29)

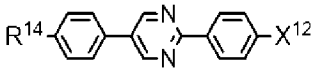

(8-30)

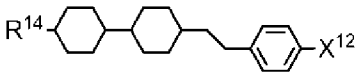

(8-31)

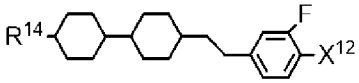

(8-32)

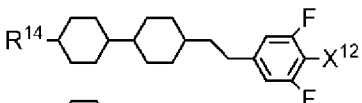

(8-33)

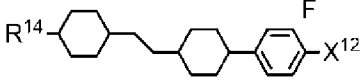

(8-34)

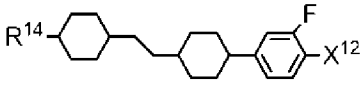

(8-35)


(8-36)

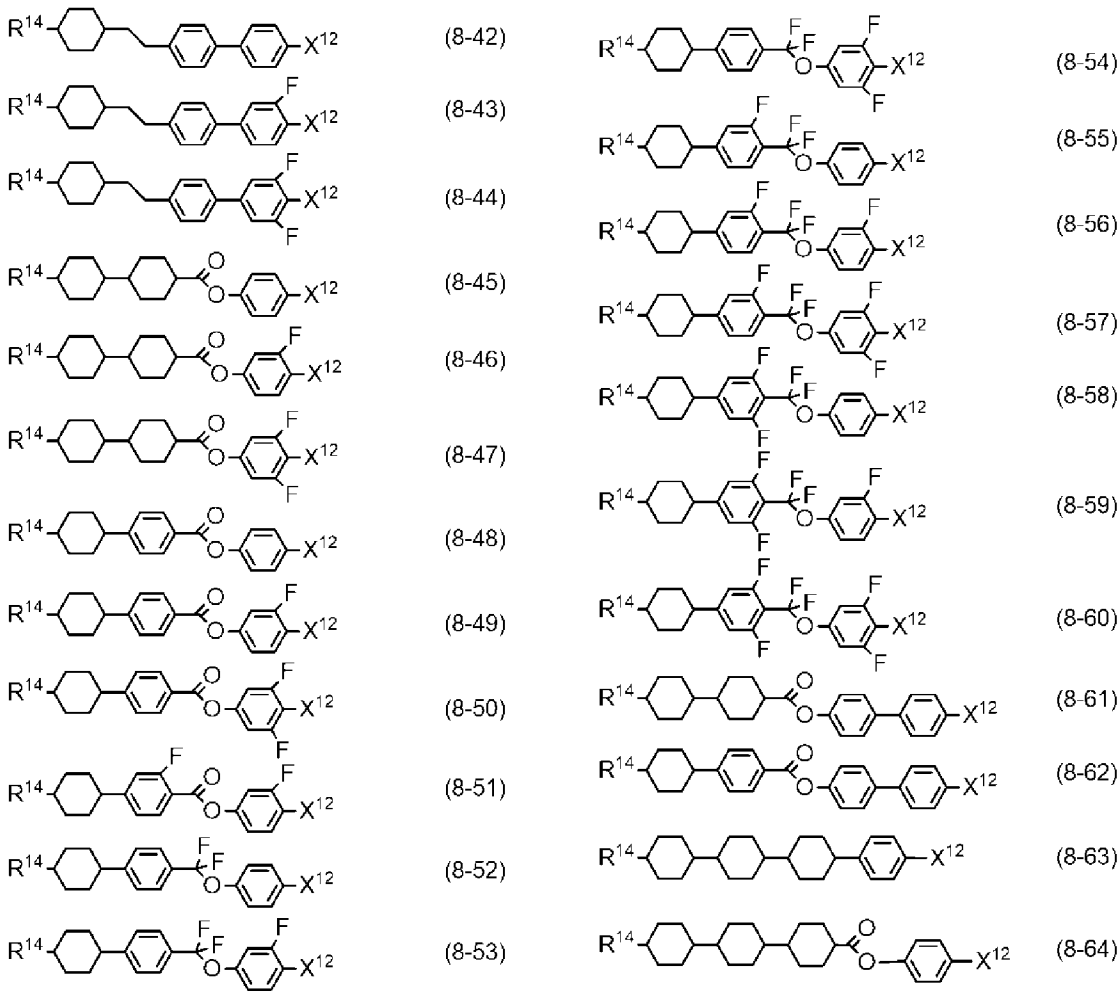

(8-37)


(8-38)


(8-39)


(8-40)

(8-41)

[0113] 
(8-42)
(8-43)
(8-44)
(8-45)
(8-46)
(8-47)
(8-48)
(8-49)
(8-50)
(8-51)
(8-52)
(8-53)
(8-54)
(8-55)
(8-56)
(8-57)
(8-58)
(8-59)
(8-60)
(8-61)
(8-62)
(8-63)
(8-64)

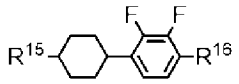
[0114] 成分Ｄは、誘電率異方性が正であり、その値が大きいので、ＴＮなどのモード用の組成物を調製する場合に主として用いられる。この成分Ｄを添加することにより、組成物の誘電率異方性を大きくすることができる。成分Ｄは、液晶相の温度範囲を広げる、粘度を調整する、または光学異方性を調整する、という効果がある。成分Ｄは、素子の電圧－透過率曲線の調整にも有用である。

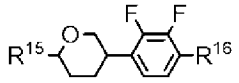
[0115] 液晶組成物１００重量％に対する成分Ｄの含有量は、１重量％から９９重量％の範囲が適しており、好ましくは１０重量％から９７重量％の範囲、さらに好ましくは４０重量％から９５重量％の範囲である。成分Ｄを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Ｄの含有量は液晶組成物１００重量％に対し、３０重量％以下が好ましい。成分Ｄを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能

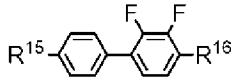
となる。

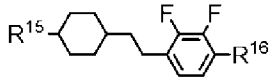
[0116] 成分Ｅは、化合物（１１）から（１９）である。成分Ｅは、負に大きな誘電率異方性を有する。これらの化合物は、２，３－ジフルオロ－１，４－フェニレンのように、ラテラル位が２つのハロゲン（フッ素または塩素）で置換されたフェニレンを有する。成分Ｅの好ましい例として、化合物（１１－１）から（１１－９）、化合物（１２－１）から（１２－１９）、化合物（１３－１）および（１３－２）、化合物（１４－１）から（１４－３）、化合物（１５－１）から（１５－３）、化合物（１６－１）から（１６－１１）、化合物（１７－１）から（１７－３）、化合物（１８－１）から（１８－３）、および化合物（１９－１）を挙げることができる。これらの化合物において、R^{15}、R^{16}、およびR^{17}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このR^{15}、R^{16}、およびR^{17}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、そしてR^{17}は、水素またはフッ素であってもよい。

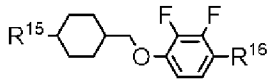
[0117]

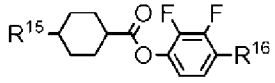

(11-1)

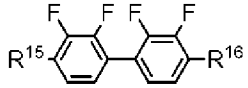

(11-2)

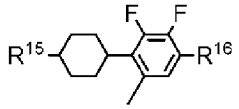

(11-3)

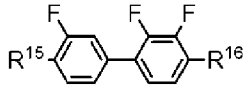

(11-4)

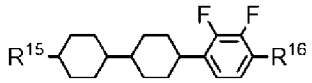

(11-5)

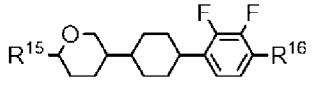

(11-6)

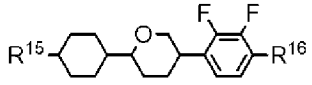

(11-7)

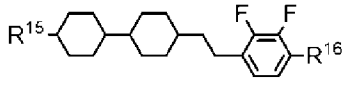

(11-8)

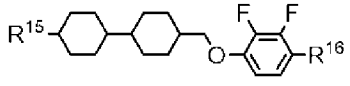

(11-9)

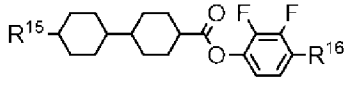

(12-1)

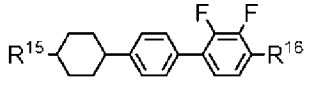

(12-2)

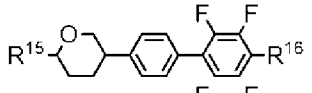

(12-3)

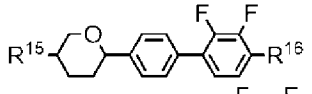

(12-4)

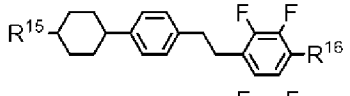

(12-5)

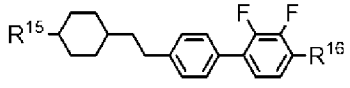

(12-6)

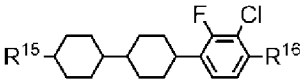

(12-7)

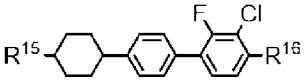

(12-8)

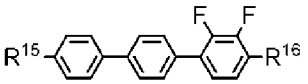

(12-9)

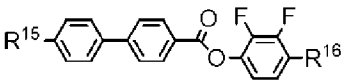

(12-10)

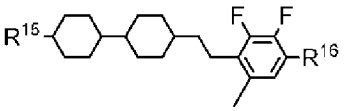

(12-11)

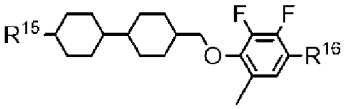

(12-12)

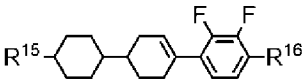

(12-13)

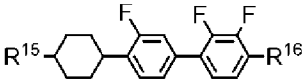

(12-14)

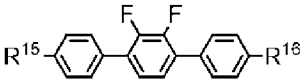

(12-15)

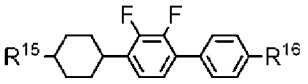

(12-16)

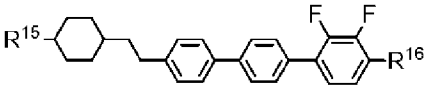

(12-17)

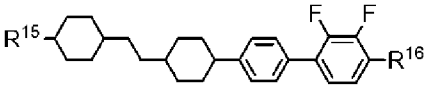

(12-18)

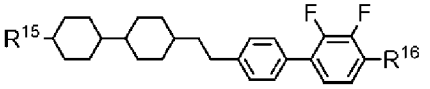

(12-19)

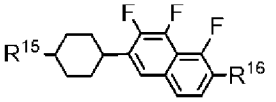

(13-1)

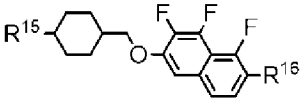

(13-2)

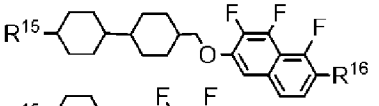

(14-1)

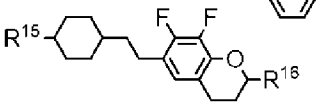

(14-2)

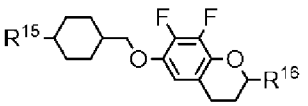

(14-3)


(15-1)

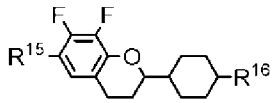

(15-2)

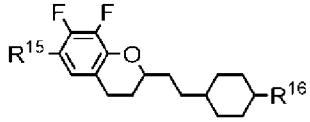

(15-3)

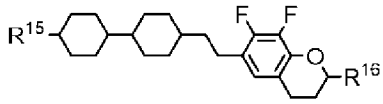

(16-1)

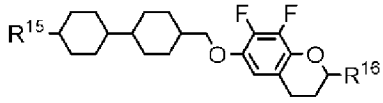

(16-2)

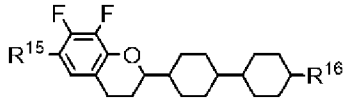
[0118]

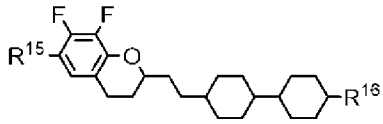

(16-3)

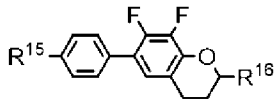

(16-4)

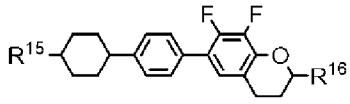

(16-5)

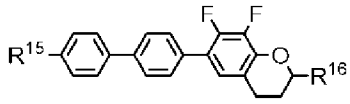

(16-6)

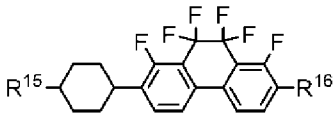

(16-7)

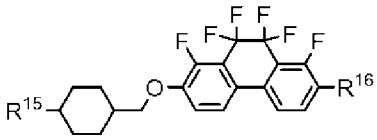

(16-8)

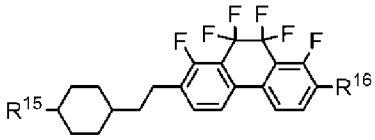

(16-9)

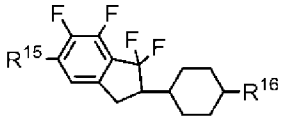

(16-10)

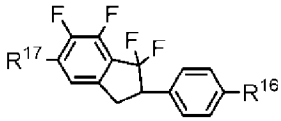

(16-11)

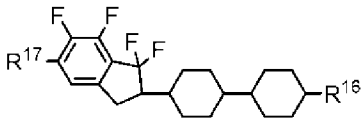

(17-1)

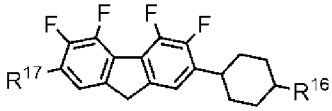

(17-2)


(17-3)


(18-1)


(18-2)


(18-3)


(19-1)

[0119] 成分Ｅは、誘電率異方性が負に大きい。成分Ｅは、ＩＰＳ、ＶＡ、ＰＳＡなどのモード用の組成物を調製する場合に好適に用いられる。成分Ｅ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負に大きくなるが、粘度が大きくなる。このため、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量は少ないほうが好ましい。誘電率異方性が－５程度であることを考慮すると、充分な電圧駆動をさせるには、液晶組成物１００重量％に対する成分Ｅの含有量は、４０重量％以上であることが好ましい。

[0120] 成分Ｅのうち、化合物（１１）は二環化合物であるので、粘度を下げる、光学異方性を調整する、または誘電率異方性を上げる効果がある。化合物（１２）および（１３）は三環化合物であり、化合物（１４）は四環化合物であるので、上限温度を上げる、光学異方性を上げる、または誘電率異方性を上げるという効果がある。化合物（１５）から（１９）は、誘電率異方性を

上げるという効果がある。

[0121] 成分Ｅの含有量は、液晶組成物１００重量％に対し、好ましくは４０重量％以上であり、さらに好ましくは５０重量％から９５重量％の範囲である。成分Ｅを誘電率異方性が正である組成物に添加する場合は、成分Ｅの含有量は、液晶組成物１００重量％に対し、３０重量％以下が好ましい。成分Ｅ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。

[0122] 以上に述べた成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥ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。

[0123] ３－２．添加物

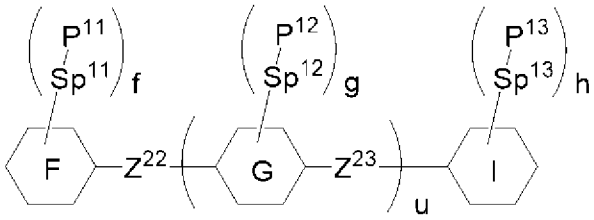
液晶組成物は公知の方法によって調製される。例えば、前記成分を混合し、そして加熱によって互いに溶解させる方法が挙げられる。用途に応じて、この組成物に添加物を添加してよい。添加物の例は、化合物（１）以外の重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、色素、消泡剤などである。このような添加物は当業者によく知られており、文献に記載されている。

[0124] 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。液晶組成物を素子に注入して、電極間に電圧を印加した状態で紫外線を照射して、化合物（１）を重合させることによって、重合体を生成させることができる。この際、化合物（１）は、その極性基がガラス（または金属酸化物）の基板表面と非共有結合的に相互作用した状態で固定化される。これにより、液晶分子の配向を制御する能力がさらに向上し、適切なプレチルトが得られるので、応答時間が短縮される。

[0125] 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。

重合性化合物の特に好ましい例は、化合物（２０）が挙げられる。化合物（２０）は、化合物（１）とは異なる化合物である。化合物（１）は極性基を有する。一方、化合物（２０）は、極性基を有さないことが好ましい。

[0126] 

(20)

[0127] 式（２０）において、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、この環Ｆおよび環Ｉにおいて、少なくとも１つの水素は、ハロゲン、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から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から１２のアルキルで置き換えられてもよい。

[0128] 好ましい環Ｆまたは環Ｉは、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、フルオロフェニル、ジフルオロフェニル、１－ナフチル、または２－ナフチルである。さらに好ましい環Ｆまたは環Ｉは、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、またはフェニルである。特に好ましい環Ｆまたは環Ｉは、フェニルである。

[0129] 式（２０）において、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－

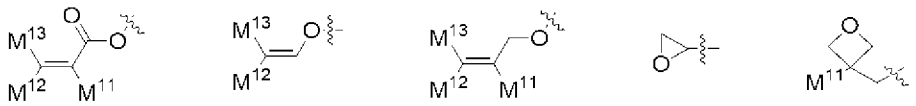
２，６－ジイル、ナフタレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルであり、この環Ｇにおいて、少なくとも１つの水素は、ハロゲン、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から１２のアルキルで置き換えられてもよい。

[0130] 好ましい環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、２－フルオロ－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－ジイルである。さらに好ましい環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、または２－フルオロ－１，４－フェニレンである。特に好ましい環Ｇは、１，４－フェニレンまたは２－フルオロ－１，４－フェニレンである。最も好ましい環Ｇは、１，４－フェニレンである。

[0131] 式（２０）において、Z^{22}およびZ^{23}は独立して、単結合または炭素数１から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、－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、－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、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い。好ましいZ^{22}またはZ^{23}は、単結合、－CH_2CH_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、－ＣＯＯ－、または－ＯＣＯ－である。さらに好ましいZ^{22}またはZ^{23}は、単結合である。

[0132] 化合物（２０）において、P^{11}、P^{12}、およびP^{13}は独立して、重合性基

である。好ましいＰ[11]からＰ[13]は、式（Ｐ－１）から式（Ｐ－５）で表される重合性基の群から選択された基である。さらに好ましいＰ[11]からＰ[13]は、式（Ｐ－１）、式（Ｐ－２）、または式（Ｐ－３）で表される基ある。特に好ましいＰ[11]からＰ[13]は、式（Ｐ－１）で表される基ある。式（Ｐ－１）で表される好ましい基は、アクリロイルオキシ（－ＯＣＯ－ＣＨ＝CH_2）またはメタクリロイルオキシ（－ＯＣＯ－Ｃ（CH_3）＝CH_2）である。式（Ｐ－１）から式（Ｐ－５）の波線は、結合する部位を示す。

[0133] 

(P-1) (P-2) (P-3) (P-4) (P-5)

[0134] 式（Ｐ－１）から式（Ｐ－５）において、Ｍ[11]、Ｍ[12]、およびＭ[13]は独立して、水素、フッ素、炭素数１から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から５のアルキルである。好ましいＭ[11]、Ｍ[12]、またはＭ[13]は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましいＭ[11]は水素またはメチルであり、さらに好ましいＭ[12]またはＭ[13]は水素である。

[0135] 式（２０）において、Ｓｐ[11]、Ｓｐ[12]、およびＳｐ[13]は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ[11]、Ｓｐ[12]、およびＳｐ[13]において、少なくとも１つの－CH_2－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましいＳｐ[11]、Ｓｐ[12]、およびＳｐ[13]は、単結合である。

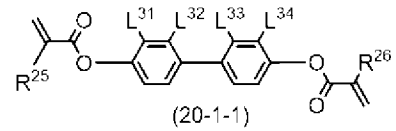
[0136] 式（２０）において、ｕは、０、１、または２である。好ましいｕは０または１である。

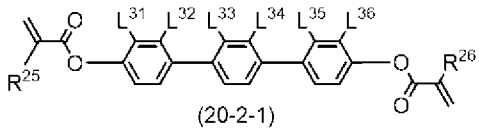
[0137] 式（２０）において、ｆ、ｇ、およびｈは独立して、０、１、２、３、または４であり、そして、ｆ、ｇ、およびｈの和は、１以上である。好ましいｆ、ｇ、またはｈは、１または２である。好ましい和は、２、３または４で

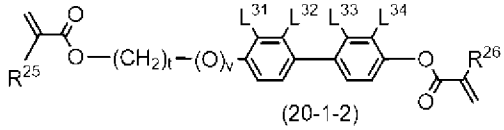
ある。さらに好ましい和は、２または３である。

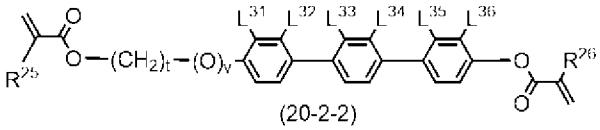
[0138] 化合物（２０）の好ましい例は、項１５に記載の化合物（２０－１）から化合物（２０－７）および後述する化合物（２０－８）から（２０－１１）である。さらに好ましい例は、化合物（２０－１－１）から（２０－１－５）、化合物（２０－２－１）から（２０－２－５）、化合物（２０－４－１）、化合物（２０－５－１）、化合物（２０－６－１）、および化合物（２０－７－１）である。これらの化合物において、R^{25}からR^{31}は独立して、水素またはメチルであり；R^{32}、R^{33}、およびR^{34}は独立して、水素または炭素数１から５のアルキルであり、R^{32}、R^{33}、およびR^{34}の少なくとも１つは炭素数１から５のアルキルであり；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から１０の整数であり、ｔ＋ｖおよびｘ＋ｕはそれぞれ最大で１０であり；L^{31}からL^{36}は独立して、水素またはフッ素であり、L^{37}およびL^{38}は独立して、水素、フッ素、またはメチルである。

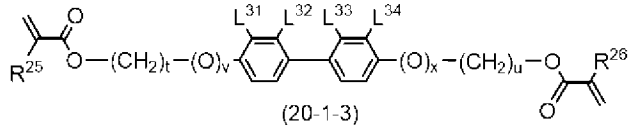
[0139]

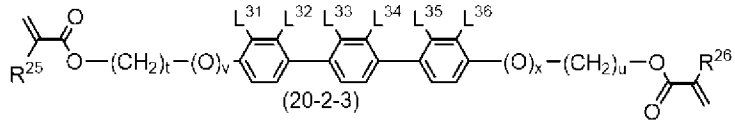

(20-1-1)

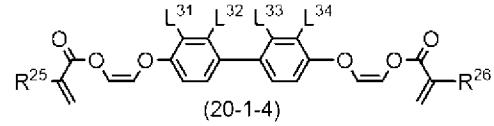

(20-2-1)

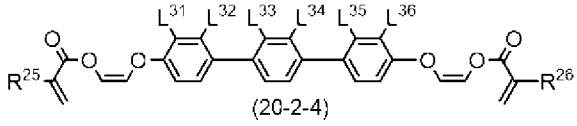

(20-1-2)

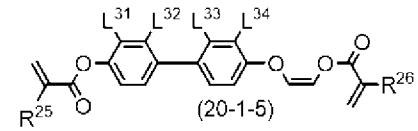

(20-2-2)

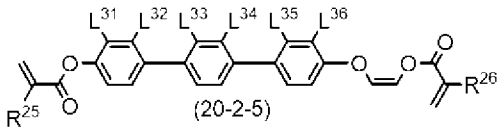

(20-1-3)


(20-2-3)

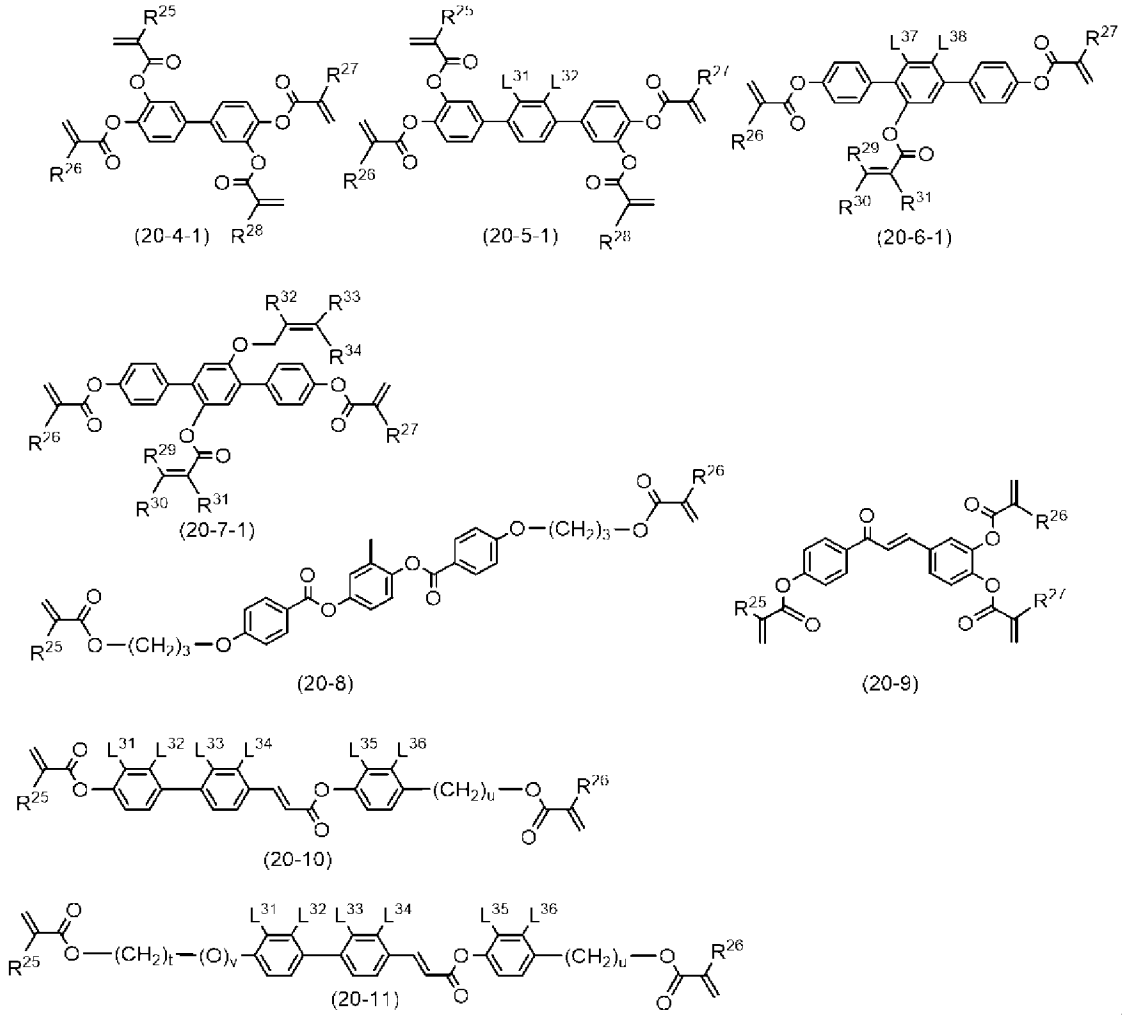

(20-1-4)


(20-2-4)


(20-1-5)


(20-2-5)

[0140]



[0141] 組成物中の重合性化合物は、光ラジカル重合開始剤などの重合開始剤を用いることによって、速やかに重合させることができる。また、重合の際の反応条件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が挙げられ、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が挙げられる。

[0142] 光ラジカル重合開始剤の追加例は、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、

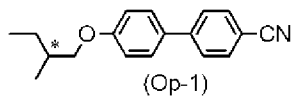
１－（４－イソプロピルフェニル）－２－ヒドロキシ－２－メチルプロパン－１－オン、ベンジルジメチルケタール、２－メチル－１－［４－（メチルチオ）フェニル］－２－モルホリノプロパン－１－オン、２，４－ジエチルキサントン／ｐ－ジメチルアミノ安息香酸メチル混合物、ベンゾフェノン／メチルトリエタノールアミン混合物である。

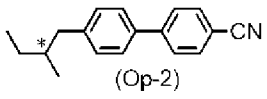
[0143] 液晶組成物に光ラジカル重合開始剤を添加した後、電場を印加した状態で紫外線を照射することによって重合を行うことができる。しかし、未反応の重合開始剤または重合開始剤の分解生成物は、素子に画像の焼き付きなどの表示不良を引き起こす可能性がある。これを防ぐために重合開始剤を添加しないまま光重合を行ってもよい。照射する光の好ましい波長は１５０ｎｍから５００ｎｍの範囲である。さらに好ましい波長は２５０ｎｍから４５０ｎｍの範囲であり、最も好ましい波長は３００ｎｍから４００ｎｍの範囲である。

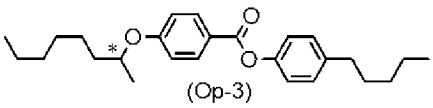
[0144] 重合性化合物を保管するとき、重合を防止するために重合禁止剤を添加してもよい。重合性化合物は、通常は重合禁止剤を除去しないまま組成物に添加される。重合禁止剤の例は、ヒドロキノン、メチルヒドロキノンなどのヒドロキノン誘導体、４－ｔ－ブチルカテコール、４-メトキシフェノール、フェノチアジンである。

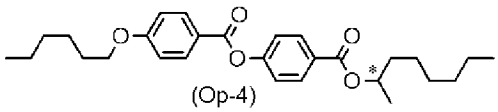
[0145] 光学活性化合物は、液晶分子にらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与えることによって逆ねじれを防ぐ、という効果を有する。光学活性化合物を添加することによって、らせんピッチを調整することができる。らせんピッチの温度依存性を調整する目的で２つ以上の光学活性化合物を添加してもよい。光学活性化合物の好ましい例として、下記の化合物（Ｏｐ－１）から（Ｏｐ－１８）を挙げることができる。化合物（Ｏｐ－１８）において、環Ｊは１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであり、R^{28}は炭素数１から１０のアルキルである。＊印は不斉炭素を表す。

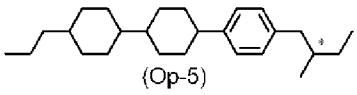
[0146]

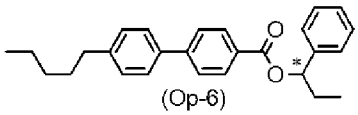

(Op-1)

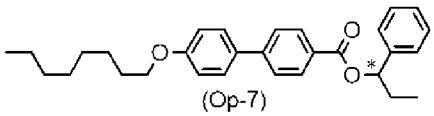

(Op-2)

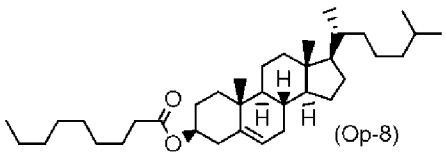

(Op-3)

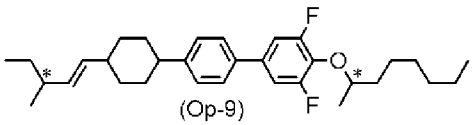

(Op-4)

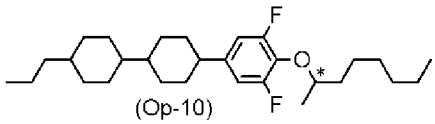

(Op-5)

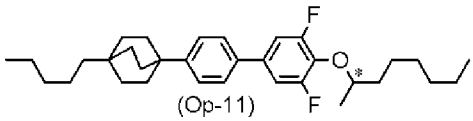

(Op-6)

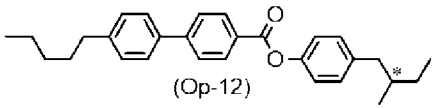

(Op-7)

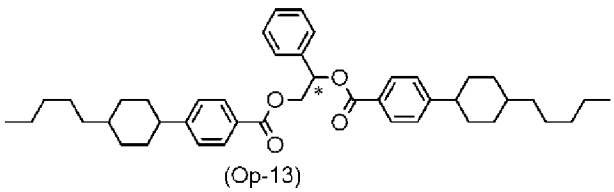

(Op-8)

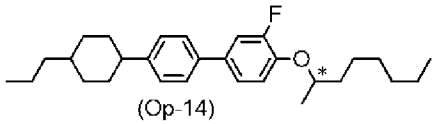

(Op-9)

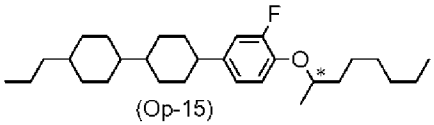

(Op-10)

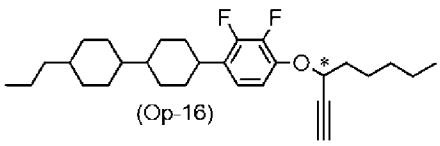

(Op-11)

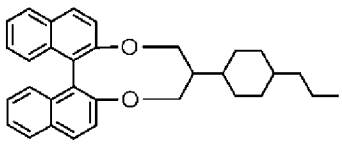

(Op-12)

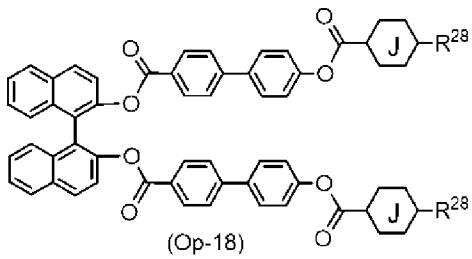

(Op-13)


(Op-14)


(Op-15)


(Op-16)


(Op-17)


(Op-18)

[0147] 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（ＡＯ－１）および（ＡＯ－２）；Ｉ

ｒｇａｎｏｘ４１５、Ｉｒｇａｎｏｘ５６５、Ｉｒｇａｎｏｘ１０１０、Ｉｒｇａｎｏｘ１０３５、Ｉｒｇａｎｏｘ３１１４、およびＩｒｇａｎｏｘ１０９８（商品名；ＢＡＳＦ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り、具体例として下記の化合物（ＡＯ－３）および（ＡＯ－４）；Ｔｉｎｕｖｉｎ３２９、ＴｉｎｕｖｉｎＰ、Ｔｉｎｕｖｉｎ３２６、Ｔｉｎｕｖｉｎ２３４、Ｔｉｎｕｖｉｎ２１３、Ｔｉｎｕｖｉｎ４００、Ｔｉｎｕｖｉｎ３２８、およびＴｉｎｕｖｉｎ９９－２（商品名；ＢＡＳＦ社）；および１，４－ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン（ＤＡＢＣＯ）を挙げることができる。

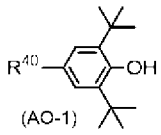
[0148] 立体障害のあるアミンなどの光安定剤は、大きな電圧保持率を維持するために好ましい。光安定剤の好ましい例として、下記の化合物（ＡＯ－５）、（ＡＯ－６）、および（ＡＯ－７）；Ｔｉｎｕｖｉｎ１４４、Ｔｉｎｕｖｉｎ７６５、およびＴｉｎｕｖｉｎ７７０ＤＦ（商品名；ＢＡＳＦ社）；ＬＡ－７７ＹおよびＬＡ－７７Ｇ（商品名；ＡＤＥＫＡ社）を挙げることができる。

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Ｉｒｇａｆｏｓ１６８（商品名；ＢＡＳＦ社）を挙げることができる。

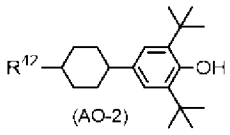
ＧＨ（guest host）モードの素子に適合させるために、必要により、アゾ系色素、アントラキノン系色素などの二色性色素（dichroic dye）が組成物に添加される。

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、ジメチルシリコーンオイル、メチルフェニルシリコーンオイルなどである。

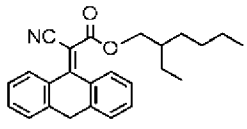
[0149]



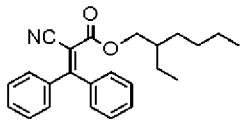
(AO-1)



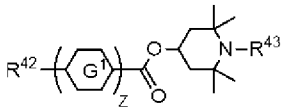
(AO-2)



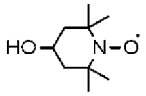
(AO-3)



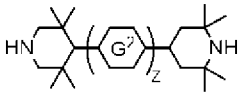
(AO-4)



(AO-5)



(AO-6)



(AO-7)

[0150] 化合物（ＡＯ－１）において、R^{40}は炭素数１から２０のアルキル、炭素数１から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から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から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・（酸素ラジカル）であり；環G^1は１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであり；化合物（ＡＯ－７）において、環G^2は１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、または１，４－フェニレンの少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた基であり；化合物（ＡＯ－５）および（ＡＯ－７）において、ｚは、１、２、または３である。

[0151] ４．液晶表示素子

液晶組成物は、ＰＣ、ＴＮ、ＳＴＮ、ＯＣＢ、ＰＳＡなどの動作モードを有し、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好適に使用できる。この組成物は、ＰＣ、ＴＮ、ＳＴＮ、ＯＣＢ、ＶＡ、ＩＰＳなどの動作モードを有し、パッシブマトリクス方式で駆動する液晶表示素子にも好適に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できる。

[0152] この組成物は、ＮＣＡＰ（nematic curvilinear aligned phase）素子にも適しており、ここでは組成物がマイクロカプセル化されている。この組成物は、ポリマー分散型液晶表示素子（ＰＤＬＣＤ）や、ポリマーネットワーク液晶表示素子（ＰＮＬＣＤ）にも使用できる。これらの組成物においては、重合性化合物が多量に添加される。一方、ＰＳＡモードの液晶表示素子に用

いる組成物は、重合性化合物の割合が液晶組成物１００重量％に対し、好ましくは１０重量％以下であり、より好ましい割合は０．１重量％から２重量％の範囲であり、さらに好ましい割合は、０．２重量％から１．０重量％の範囲である。ＰＳＡモードの素子は、アクティブマトリックス方式、パッシブマトリクス方式などの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できる。

[0153] 高分子支持配向型の素子では、組成物に含まれる重合体が液晶分子を配向させる。極性化合物は、液晶分子が配列するのを援助する。すなわち、極性化合物は、配向膜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。アレイ基板とカラーフィルター基板と呼ばれる２つの基板を有する素子を用意する。この基板は配向膜を有しない。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。この組成物に化合物（１）、さらに必要により他の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。この素子に電圧を印加した状態で光照射する。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、ＰＳＡモードを有する素子が作製される。

[0154] 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、基板上に配列する。この極性化合物が、液晶分子を配向させる。極性基が複数存在する場合、基板表面との相互作用がより強くなり、低濃度で配向させることができる。電圧を印加したとき、電場の作用によって液晶分子の配向がさらに促進される。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。化合物（１）は重合性であるので、重合によって消費される

。化合物（１）は、他の重合性化合物と共重合することによっても消費される。したがって、化合物（１）は極性基を有するが、消費されるので、電圧保持率の大きな液晶表示素子が得られる。なお、重合性を有する極性化合物を用いれば、極性化合物と重合性化合物の両方の効果を１つの化合物で達成することが可能である為、極性基を持たない重合性化合物を必要としない場合もある。

実施例

[0155] 実施例（合成例、使用例を含む）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。本発明は、使用例の組成物の少なくとも２つを混合することによって調製した混合物をも含む。

[0156] １．化合物（１）の実施例

特に記載のない限り、反応は窒素雰囲気下で行った。化合物（１）は、実施例１などに示した手順により合成した。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（１）、液晶性化合物、組成物、素子の特性は、下記の方法により測定した。

[0157] ＮＭＲ分析：測定には、ブルカーバイオスピン社製のＤＲＸ－５００を用いた。^{1}Ｈ－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、測定は、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はダブレット、ｔはトリプレット、ｑはカルテット、ｑｕｉｎはクインテット、ｓｅｘｔ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。

[0158] ガスクロマト分析：測定には、（株）島津製作所製のＧＣ－２０１０型ガスクロマトグラフを用いた。カラムは、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムＤＢ－１（長さ６０ｍ、内径０．２５ｍｍ、膜厚０．２５μｍ）を用いた。キャリアーガスとしてはヘリウム（１ｍｌ／分）を用いた。試料気化室の温度を３００℃、検出器（ＦＩＤ）部分の温度を３００℃に設定

した。試料はアセトンに溶解させて、１重量％の溶液となるように調製し、得られた溶液１μｌを試料気化室に注入した。記録計には（株）島津製作所製のＧＣＳｏｌｕｔｉｏｎシステムなどを用いた。

[0159] ＨＰＬＣ分析：測定には、（株）島津製作所製のＰｒｏｍｉｎｅｎｃｅ（ＬＣ－２０ＡＤ；ＳＰＤ－２０Ａ）を用いた。カラムは（株）ワイエムシィ製のＹＭＣ－Ｐａｃｋ　ＯＤＳ－Ａ（長さ１５０ｍｍ、内径４．６ｍｍ、粒子径５μｍ）を用いた。溶出液はアセトニトリルと水を適宜混合して用いた。検出器としてはＵＶ検出器、ＲＩ検出器、ＣＯＲＯＮＡ検出器などを適宜用いた。ＵＶ検出器を用いた場合、検出波長は２５４ｎｍとした。試料はアセトニトリルに溶解して、０．１重量％の溶液となるように調製し、この溶液１μＬを試料室に導入した。記録計としては（株）島津製作所製のＣ－Ｒ７Ａｐｌｕｓを用いた。

[0160] 紫外可視分光分析：測定には、（株）島津製作所製のＰｈａｒｍａＳｐｅｃ　ＵＶ－１７００用いた。検出波長は１９０ｎｍから７００ｎｍとした。試料はアセトニトリルに溶解して、０．０１ｍｍｏｌ／Ｌの溶液となるように調製し、石英セル（光路長１ｃｍ）に入れて測定した。

[0161] 測定試料：相構造および転移温度（透明点、融点、重合開始温度など）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。

[0162] 測定方法：特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（ＪＥＩＴＡ；Japan Electronics and Information Technology Industries Association）で審議制定されるＪＥＩＴＡ規格（ＪＥＩＴＡ・ＥＤ－２５２１Ｂ）に記載された方法、またはこれを修飾した方法であった。測定に用いたＴＮ素子には、薄膜トランジスター（ＴＦＴ）を取り付けなかった。

[0163] （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（メトラー社製、ＦＰ－５２型ホットステージ）に試料を置いた。この試料を、３℃／分の速度で加熱しながら相状態とその変化を偏光顕微鏡で観察し、相の種類を特定した

。

[0164] （２）転移温度（℃）

測定には、パーキンエルマー社製の走査熱量計、Ｄｉａｍｏｎｄ　ＤＳＣシステムまたは（株）日立ハイテクサイエンス製の高感度示差走査熱量計、Ｘ－ＤＳＣ７０００を用いた。試料は、３℃／分の速度で昇降温し、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。化合物の融点、重合開始温度もこの装置を使って測定した。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。

[0165] 結晶はＣと表した。結晶の種類の区別がつく場合は、それぞれをC_1、C_2のように表した。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℃であり、ネマチック相から液体への転移温度が１００．０℃であることを示す。

[0166] （３）ネマチック相の上限温度（T_{NI}またはＮＩ；℃）

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

[0167] （４）ネマチック相の下限温度（T_C；℃）

ネマチック相を有する試料を０℃、－１０℃、－２０℃、－３０℃、および－４０℃のフリーザー中に１０日間保管した後、液晶相を観察した。例え

ば、試料が－２０℃ではネマチック相のままであり、－３０℃では結晶またはスメクチック相に変化したとき、T_Cを≦－２０℃と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

[0168] （５）粘度（バルク粘度；η；２０℃で測定；ｍＰａ・ｓ）

測定には、東京計器（株）製のＥ型回転粘度計を用いた。

[0169] （６）光学異方性（屈折率異方性；２５℃で測定；Δｎ）

測定は、波長５８９ｎｍの光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッベ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後、試料を主プリズムに滴下した。屈折率（ｎ∥）は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率（ｎ⊥）は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学異方性（Δｎ）の値は、Δｎ＝ｎ∥－ｎ⊥、の式から計算した。

[0170] （７）比抵抗（ρ；２５℃で測定；Ωｃｍ）

電極を備えた容器に試料１．０ｍＬを注入した。この容器に直流電圧（１０Ｖ）を印加し、１０秒後の直流電流を測定した。比抵抗は次の式から算出した。（比抵抗）＝｛（電圧）×（容器の電気容量）｝／｛（直流電流）×（真空の誘電率）｝。

[0171] 誘電率異方性が正の試料と負の試料とでは、特性の測定法が異なることがある。誘電率異方性が正であるときの測定法は、項（８ａ）から（１２ａ）に記載した。誘電率異方性が負の場合は、項（８ｂ）から（１２ｂ）に記載した。

[0172] （８ａ）粘度（回転粘度；γ１；２５℃で測定；ｍＰａ・ｓ）

正の誘電率異方性：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度であり、そして２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が５μｍであるＴＮ素子に試料を入れた。この素子に１６Ｖから１９．５Ｖの範囲で０．５Ｖ毎に段階的に電圧を印加した。０．２秒の無印加の後、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。この計算で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。

[0173] （８ｂ）粘度（回転粘度；γ１；２５℃で測定；ｍＰａ・ｓ）

負の誘電率異方性：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。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が２０μｍのＶＡ素子に試料を入れた。この素子に３９ボルトから５０ボルトの範囲で１ボルト毎に段階的に電圧を印加した。０．２秒の無印加の後、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は、下記の誘電率異方性の項で測定した値を用いた。

[0174] （９ａ）誘電率異方性（Δε；２５℃で測定）

正の誘電率異方性：２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が９μｍであり、そしてツイスト角が８０度であるＴＮ素子に試料を入れた。この素子にサイン波（１０Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率（ε∥）を測定した。この素子にサイン波（０．５Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率（ε⊥）を測定した。誘電率異方性の値は、Δε＝ε∥－ε⊥、の式から計算した。

[0175] （９ｂ）誘電率異方性（Δε；２５℃で測定）

負の誘電率異方性：誘電率異方性の値は、Δε＝ε∥－ε⊥、の式から計算した。誘電率（ε∥およびε⊥）は次のように測定した。

１）誘電率（ε∥）の測定：よく洗浄したガラス基板にオクタデシルトリエトキシシラン（０．１６ｍＬ）のエタノール（２０ｍＬ）溶液を塗布した。

ガラス基板をスピンナーで回転させた後、１５０℃で１時間加熱した。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が４μｍであるＶＡ素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子にサイン波（０．５Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率（ε//）を測定した。

２）誘電率（ε⊥）の測定：よく洗浄したガラス基板にポリイミド溶液を塗布した。このガラス基板を焼成した後、得られた配向膜にラビング処理をした。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が９μｍであり、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（０．５Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率（ε⊥）を測定した。

[0176] （１０ａ）弾性定数（Ｋ；２５℃で測定；ｐＮ）

正の誘電率異方性：測定にはアジレント・テクノロジー社製のＨＰ４２８４Ａ型ＬＣＲメータを用いた。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が２０μｍである水平配向素子に試料を入れた。この素子に０ボルトから２０ボルトの電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。測定した静電容量（Ｃ）と印加電圧（Ｖ）の値を「液晶デバイスハンドブック」（日刊工業新聞社）、７５頁にある式（２．９８）、式（２．１０１）を用いてフィッティングし、式（２．９９）からK_{11}およびK_{33}の値を得た。次に１７１頁にある式（３．１８）に、先ほど求めたK_{11}およびK_{33}の値を用いてK_{22}を算出した。弾性定数Ｋは、このようにして求めたK_{11}、K_{22}およびK_{33}の平均値で表した。

[0177] （１０ｂ）弾性定数（K_{11}およびK_{33}；２５℃で測定；ｐＮ）

負の誘電率異方性：測定には（株）東陽テクニカ製のＥＣ－１型弾性定数測定器を用いた。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が２０μｍである垂直配向素子に試料を入れた。この素子に２０ボルトから０ボルトの電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。静電容量（Ｃ）と印加電圧（Ｖ）の値を、「液晶デバイスハンドブック」（日刊工業新聞社）、７５頁

にある式（２．９８）、式（２．１０１）を用いてフィッティングし、式（２．１００）から弾性定数の値を得た。

[0178] （１１ａ）しきい値電圧（Ｖｔｈ；２５℃で測定；Ｖ）

正の誘電率異方性：測定には大塚電子（株）製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプとした。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ＴＮ素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧（３２Ｈｚ、矩形波）は０Ｖから１０Ｖまで０．０２Ｖ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。

[0179] （１１ｂ）しきい値電圧（Ｖｔｈ；２５℃で測定；Ｖ）

負の誘電率異方性：測定には大塚電子（株）製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプとした。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が４μｍであり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード（normally black mode）のＶＡ素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子に印加する電圧（６０Ｈｚ、矩形波）は０Ｖから２０Ｖまで０．０２Ｖ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１０％になったときの電圧で表した。

[0180] （１２ａ）応答時間（τ；２５℃で測定；ｍｓ）

正の誘電率異方性：測定には大塚電子（株）製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプとした。ローパス・フィルター（Low-pass filter）は５ｋＨｚに設定した。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）

が５．０μｍであり、ツイスト角が８０度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）のＴＮ素子に試料を入れた。この素子に矩形波（６０Ｈｚ、５Ｖ、０．５秒）を印加した。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％であるとみなした。立ち上がり時間（τｒ：rise time；ミリ秒）は、透過率が９０％から１０％に変化するのに要した時間である。立ち下がり時間（τｆ：fall time；ミリ秒）は透過率１０％から９０％に変化するのに要した時間である。応答時間は、このようにして求めた立ち上がり時間と立ち下がり時間との和で表した。

[0181] （１２ｂ）応答時間（τ；２５℃で測定；ｍｓ）

負の誘電率異方性：測定には大塚電子（株）製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプとした。ローパス・フィルター（Low-pass filter）は５ｋＨｚに設定した。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．２μｍであり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード（normally black mode）のＰＶＡ素子に試料を入れた。この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子にしきい値電圧を若干超える程度の電圧を１分間印加し、次に５．６Ｖの電圧を印加しながら２３．５ｍＷ／ｃｍ^{2}の紫外線を８分間照射した。この素子に矩形波（６０Ｈｚ、１０Ｖ、０．５秒）を印加した。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％であるとみなした。応答時間は透過率９０％から１０％に変化するのに要した時間（立ち下がり時間；fall time；ミリ秒）で表した。

[0182] （１３）電圧保持率

アイグラフィックス（株）製ブラックライト、Ｆ４０Ｔ１０／ＢＬ（ピーク波長３６９ｎｍ）を用いて紫外線を照射することによって、重合性化合物を重合させた。この素子に６０℃でパルス電圧（１Ｖで６０マイクロ秒）を

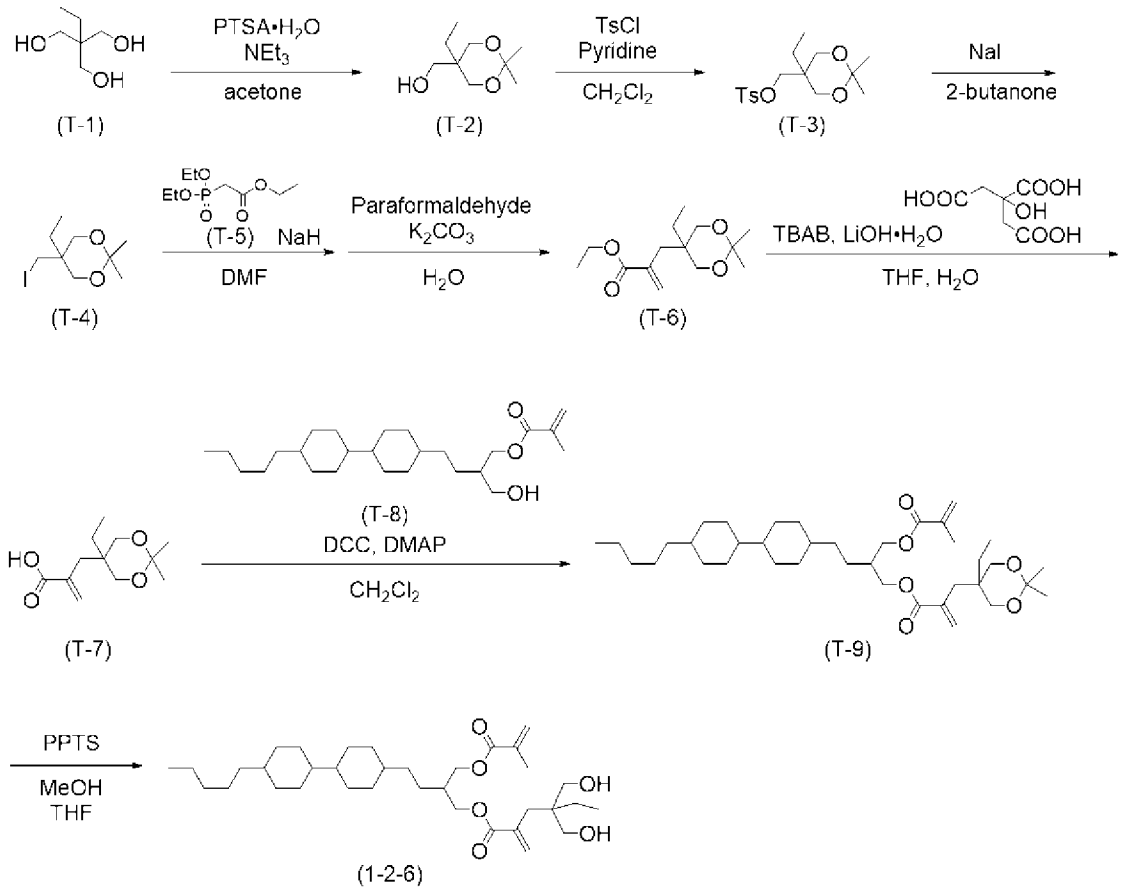
印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で１．６７秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Ａを求めた。面積Ｂは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Ｂに対する面積Ａの百分率で表した。

[0183] 原料

ソルミックス（登録商標）Ａ－１１は、エタノール（８５．５％）、メタノール（１３．４％）とイソプロパノール（ＩＰＡ）（１．１％）の混合物であり、日本アルコール販売（株）から入手した。

[0184] ［合成例１］

化合物（１－２－６）の合成



[0185] 第１工程

化合物（Ｔ－１）（１００．０ｇ）、ｐ－トルエンスルホン酸一水和物（ＰＴＳＡ・H_2O）（４．２５ｇ）、およびアセトン（３００ｍｌ）を反応器に入れ室温で５時間攪拌した後、トリエチルアミン（３．１２ｍｌ）を滴下

した。反応混合物を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝１：２）で精製して、化合物（Ｔ－２）（１３０．４ｇ；１００％）を得た。

[0186] 第２工程

化合物（Ｔ－２）（１０．０ｇ）、ジクロロメタン（２０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへトシルクロライド（１０．１ｇ）、ピリジン（５．５ｍｌ）を加え、４０℃へ加熱し２日間攪拌した。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。得られ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、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝３：１）で精製して、化合物（Ｔ－３）（１４．３ｇ；７６％）を得た。

[0187] 第３工程

化合物（Ｔ－３）（４８．１ｇ）、ヨウ化ナトリウム（５４．９ｇ）、および２－ブタノン（３００ｍｌ）を反応器に入れ、７０℃で加熱攪拌を４時間行った。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。得られ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、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝３：１）で精製して、化合物（Ｔ－４）（３８．９ｇ；９３％）を得た。

[0188] 第４工程

水素化ナトリウム（３２．６ｇ）、ＤＭＦ（１０００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。化合物（Ｔ－５）（１５９．３ｇ）のＤＭＦの溶液を滴下し、１時間攪拌した。その後、化合物（Ｔ－４）（１０１．０ｇ）を滴下し、１１０℃に加熱し４日間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。得られ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た。そこへ水（５００ｍｌ）、炭酸カリウム（９８．２ｇ）、パラホルムアルデヒド（４２．７ｇ）を加え、８０℃で６時間加熱攪拌を行った。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。得られた有機層を水、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、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝８：１）で精製して、化合物（Ｔ－６）（１１．４ｇ；１２％）を得た。

[0189] 第５工程

化合物（Ｔ－６）（１２．１ｇ）、テトラブチルアンモニウムブロミド（ＴＢＡＢ）（１．５ｇ）、水（１１４．７ｍｌ）、ＴＨＦ（３．８２ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ、水酸化リチウム・一水和物（３．９５ｇ）を加え、５０℃で７時間加熱攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで洗浄しさらに、クエン酸水溶液で洗浄してｐＨを４に調整した。得られた水層を酢酸エチルで抽出した。得られ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、化合物（Ｔ－７）（１０．５ｇ；９８％）を得た。

[0190] 第６工程

化合物（Ｔ－７）（３．９ｇ）、公知の方法で合成した化合物（Ｔ－８）（５．０ｇ）、Ｎ，Ｎ－ジシクロヘキシルカルボジイミド（ＤＣＣ）（３．８ｇ）、ジクロロメタン（５０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ、Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノピリジン（ＤＭＡＰ）（０．７５ｇ）を加え、室温で１２時間攪拌した。反応混合物を吸引ろ過した後ろ液を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。得られ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、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝７：１）で精製し、化合物（Ｔ－９）（６．１ｇ；８１％）を得た。

[0191] 第７工程

化合物（Ｔ－９）（０．５ｇ）、ＴＨＦ（７．５ｍｌ）、メタノール（７．５ｍｌ）、およびピリジニウムｐ－トルエンスルホナート（ＰＰＴＳ）（０．０４ｇ）を反応器に入れ、室温で１２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。得られ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、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝２：１）で精製して、化合物（１－２－６）（０．３ｇ；７１％）を得た。

[0192] 得られた化合物（１－２－６）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：６．４８（ｓ，１Ｈ）、６．１２（ｓ，１Ｈ）、５．７５（ｓ，１Ｈ）、５．６０（ｓ，１Ｈ）、４．２６－４．１４（ｍ，４Ｈ）、３．５５－３．５１（ｍ，２Ｈ）、３．４１－３．３７（ｍ，２Ｈ）、３．３３－３．３１（ｍ，２Ｈ）、２．４９（ｓ，１Ｈ）、２．１３－２．０８（ｍ，１Ｈ）、１．９７（ｓ，３Ｈ）、１．７７－１．７１（ｍ，８Ｈ）、１．４７－１．１２（ｍ，１７Ｈ）、１．０４－０．８４（ｍ，１６Ｈ）．

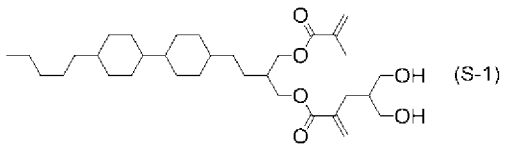
[0193] 転移温度：Ｃ　５０．７　Ｃ　５２．１６　Ｉ，

重合開始温度：２０６．８℃

[0194] ［比較例１］

相溶性の比較

比較化合物として下記の化合物（Ｓ－１）を選んだ。この化合物は公知の方法に従って合成した。

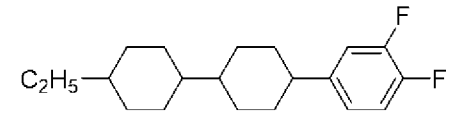


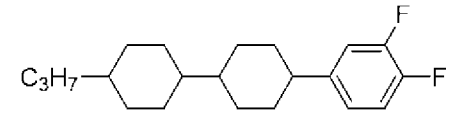
(S-1)

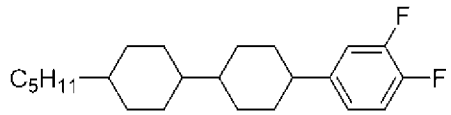
[0195] ^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：６．２５（Ｓ，１Ｈ）、６．１０（ｓ，１Ｈ）、５．６６（Ｓ，１Ｈ）、５．５８－５．５７（ｍ，１Ｈ）、４．２２－４．１０（ｍ，４Ｈ）、３．８０－３．７５（ｍ，２Ｈ）、３．６７－３．６２（ｍ，２Ｈ）、２．５５－２．５２（ｍ，２Ｈ）、２．３７（ｄ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，２Ｈ）、２．１０－２．０５（ｍ，１Ｈ）、１．９４（ｓ，３Ｈ）、１．９０－１．８６（ｍ，１Ｈ）、１．７５－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．４８－１．３７（ｍ，２Ｈ）、１．３２－０．７９（ｍ，２５Ｈ）．

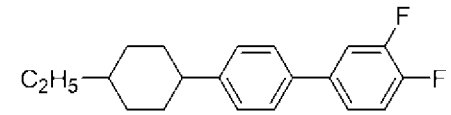
[0196] 化合物（１－２－６）と比較化合物（Ｓ－１）の液晶組成物への相溶性を比較した。評価には、下記の化合物（ｉ－１）～（ｉ－９）を含む母液晶（ｉ）を用いた。

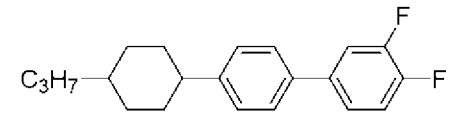
[0197] 母液晶（ｉ）の各成分の割合を重量％で示す。

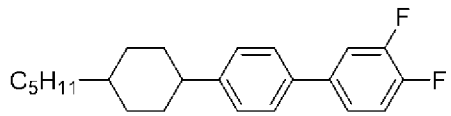

(i-1) 16.67%

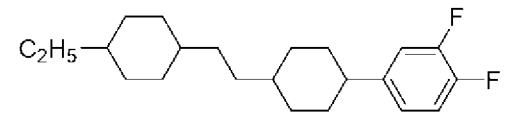

(i-2) 16.67%

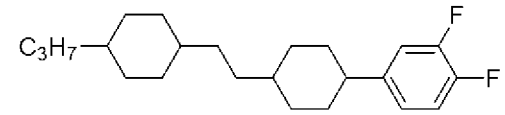

(i-3) 16.66%

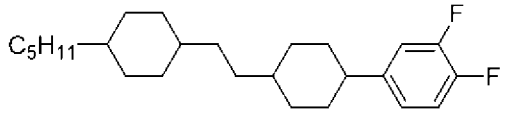

(i-4) 6.25%


(i-5) 6.25%


(i-6) 12.50%


(i-7) 10.00%

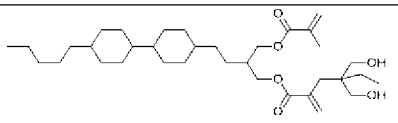
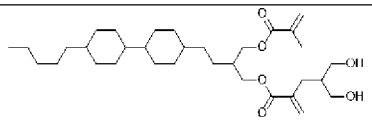

(i-8) 5.00%


(i-9) 10.00%

[0198] 化合物（１－２－６）または比較化合物（Ｓ－１）を、母液晶（ｉ）に３重量％から０．５重量％の割合で添加した試料を作成した。この試料を２５℃および－２０℃で７日間静置した後、目視により観察し、ネマチック相を

維持している場合は○、結晶またはスメクチック相が析出している場合は×と表した。

[0199] 表２．相溶性

	化合物（１－２－６）		化合物（Ｓ－１）	
添加量（重量％）				
	室温	－２０℃	室温	－２０℃
３．０	○	○	○	×
１．０	○	○	○	×
０．５	○	○	○	×

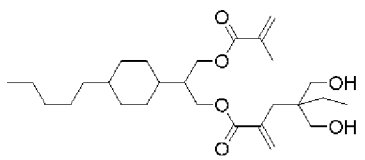
[0200] 溶解度を比較した結果、化合物（１－２－６）は母液晶（ｉ）に３重量％添加しても２５℃および－２０℃の両方でネマチック相を維持したのに対し、比較化合物（Ｓ－１）は３重量％添加した際－２０℃で結晶が析出した。これらの化合物は、同じ環構造を有し、複数の重合性基が結合している点で類似した化合物であるが、両者の相溶性は大きく異なる。これは、化合物（１－２－６）はエチル基を導入したことで、比較化合物（Ｓ－１）に比べて、液晶組成物への親和性が改善した為であると考察出来る。従って、本願化合物は大きな相溶性を有する優れた化合物であるといえる。

[0201] 合成例に記載された方法や、「２．化合物（１）の合成」の項を参考にしながら、以下に示す化合物を合成することが可能である。

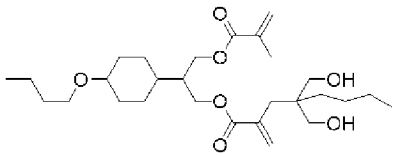
[0202]

No.

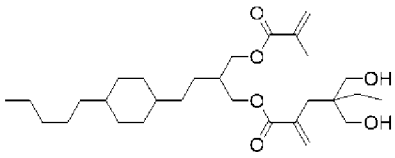
(1-1-1)



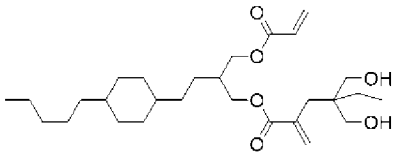
(1-1-2)



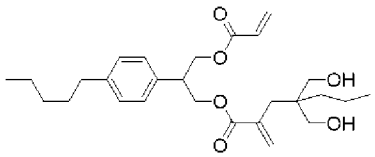
(1-1-3)



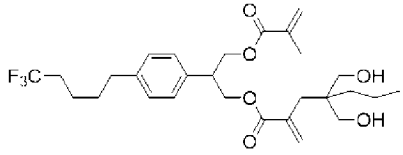
(1-1-4)



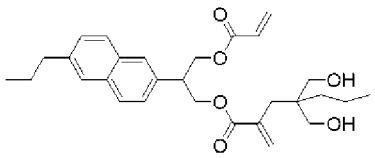
(1-1-5)



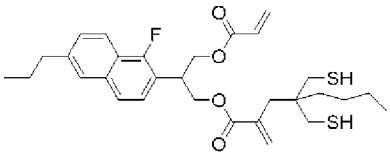
(1-1-6)



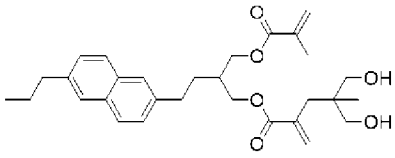
(1-1-7)



(1-1-8)

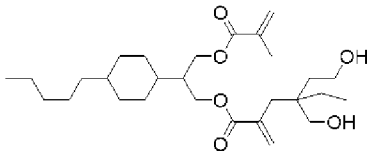


(1-1-9)

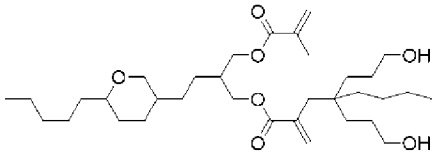


No.

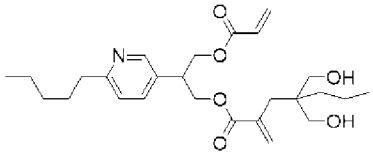
(1-1-10)



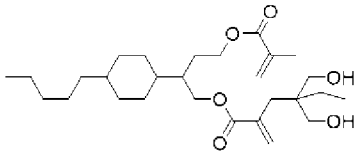
(1-1-11)



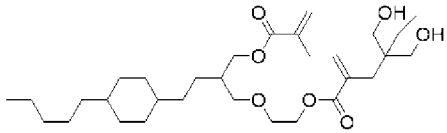
(1-1-12)



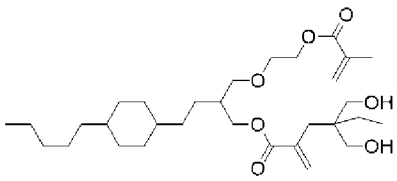
(1-1-13)



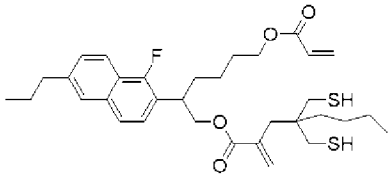
(1-1-14)



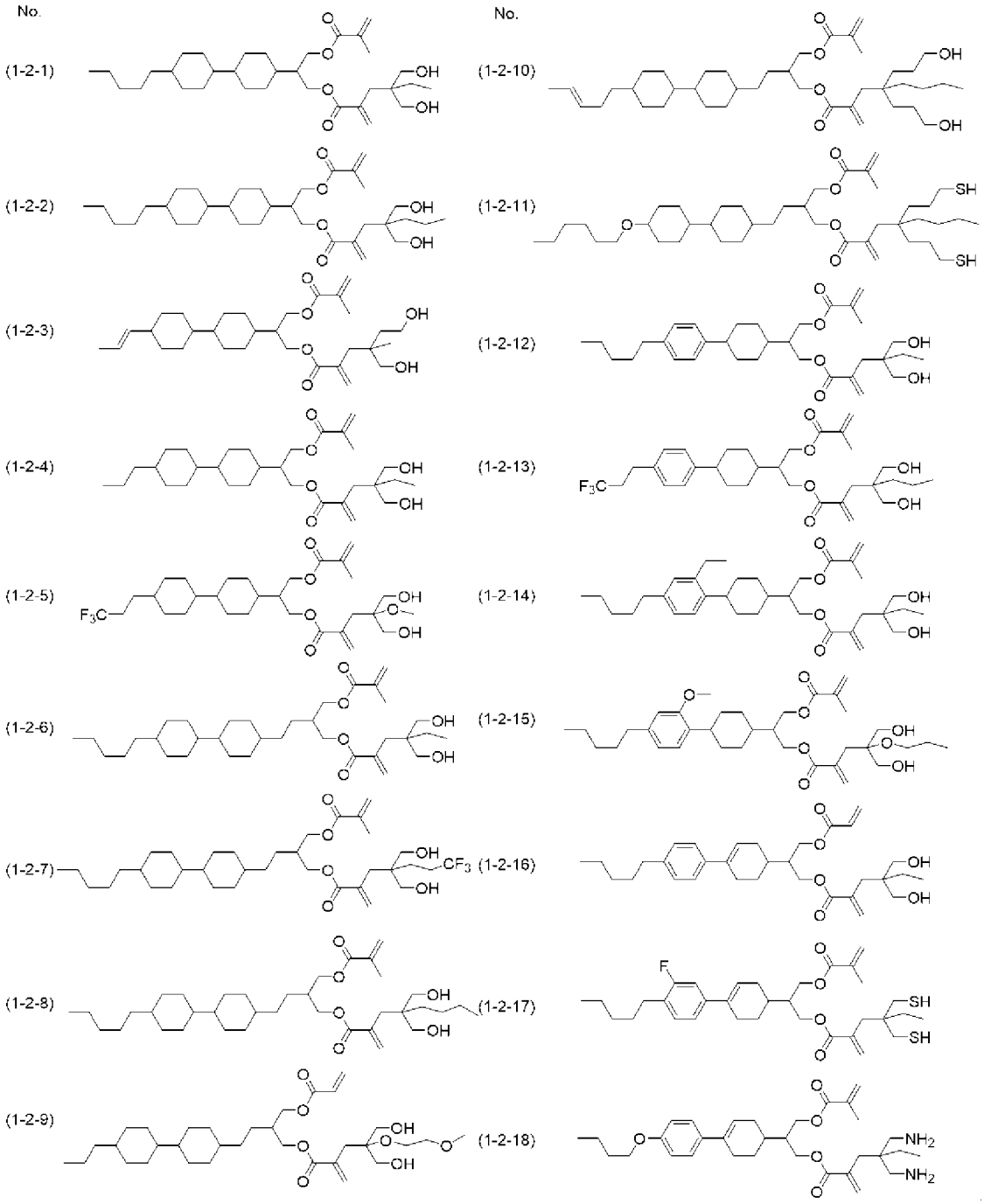
(1-1-15)



(1-1-16)



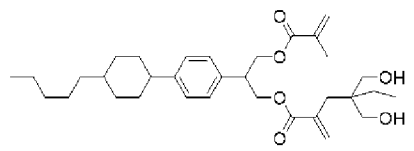
[0203]


No.
(1-2-1)
(1-2-2)
(1-2-3)
(1-2-4)
(1-2-5)
(1-2-6)
(1-2-7)
(1-2-8)
(1-2-9)
No.
(1-2-10)
(1-2-11)
(1-2-12)
(1-2-13)
(1-2-14)
(1-2-15)
(1-2-16)
(1-2-17)
(1-2-18)

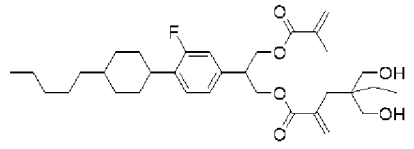
[0204]

No.

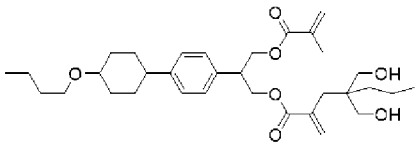
(1-2-19)



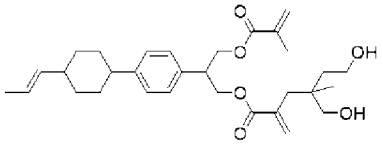
(1-2-20)



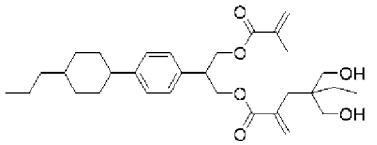
(1-2-21)



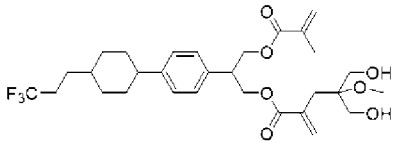
(1-2-22)



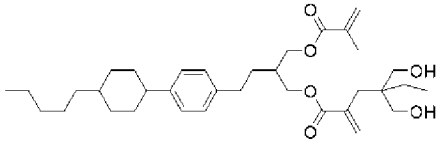
(1-2-23)



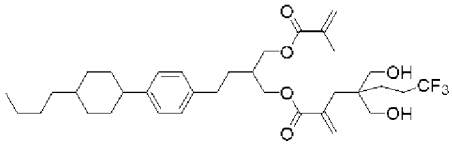
(1-2-24)



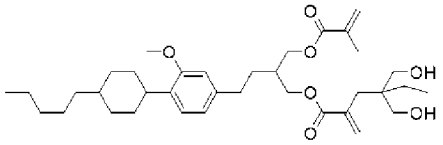
(1-2-25)



(1-2-26)

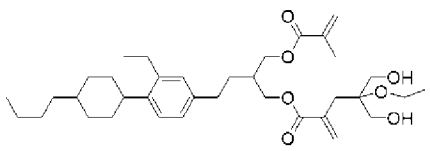


(1-2-27)

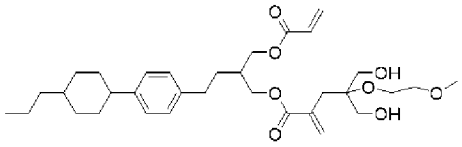


No.

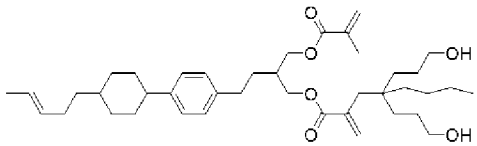
(1-2-28)



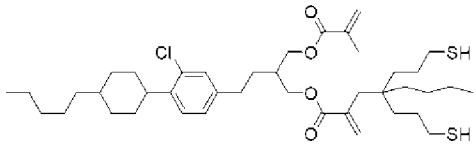
(1-2-29)



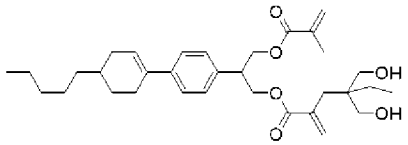
(1-2-30)



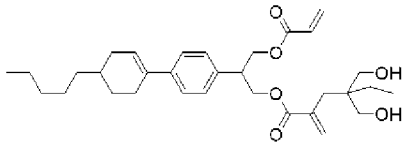
(1-2-31)



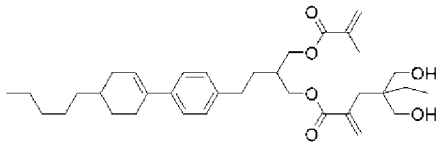
(1-2-32)



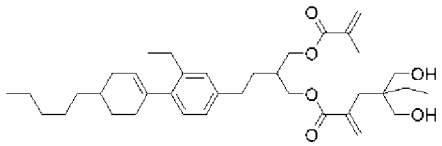
(1-2-33)



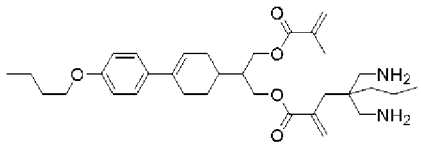
(1-2-34)



(1-2-35)



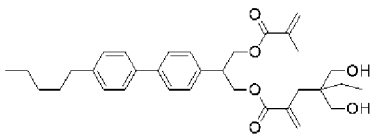
(1-2-36)



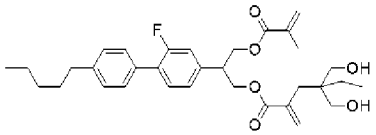
[0205]

No.

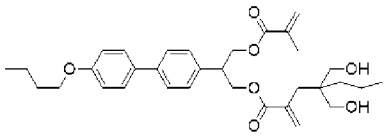
(1-2-37)



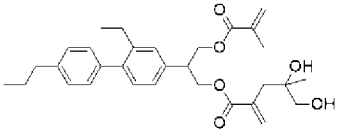
(1-2-38)



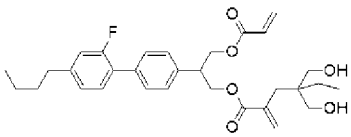
(1-2-39)



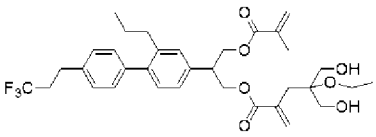
(1-2-40)



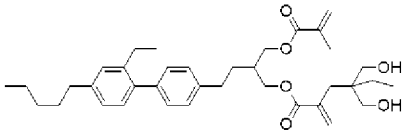
(1-2-41)



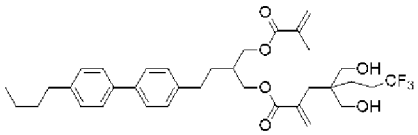
(1-2-42)



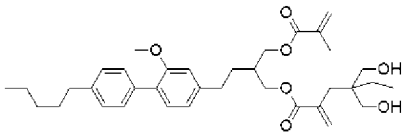
(1-2-43)



(1-2-44)

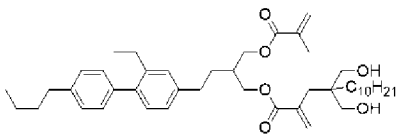


(1-2-45)

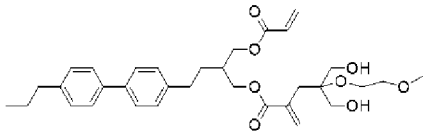


No.

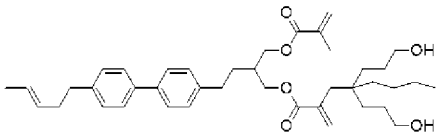
(1-2-46)



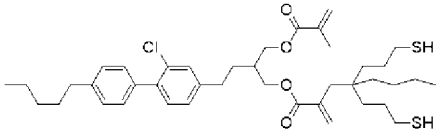
(1-2-47)



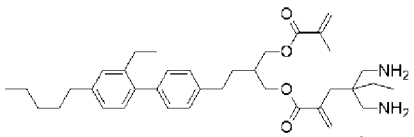
(1-2-48)



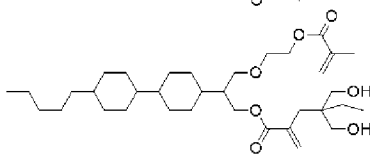
(1-2-49)



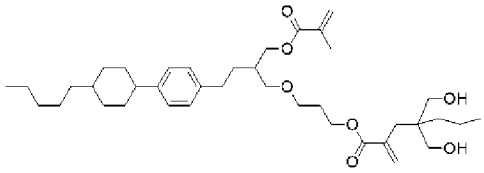
(1-2-50)



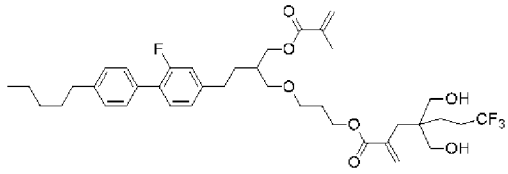
(1-2-51)



(1-2-52)



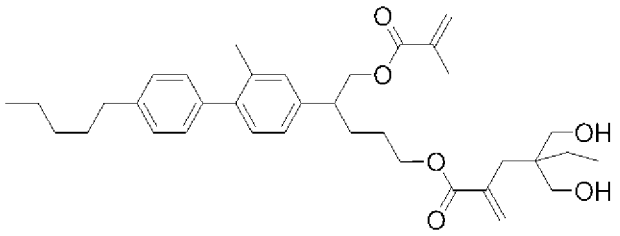
(1-2-53)



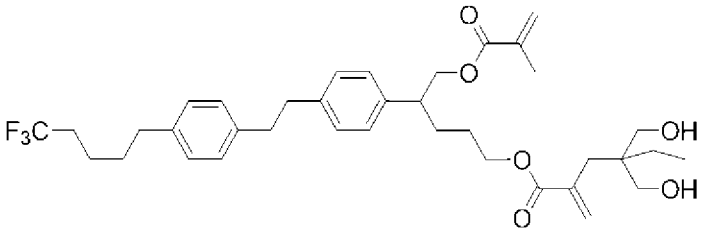
[0206]

No.

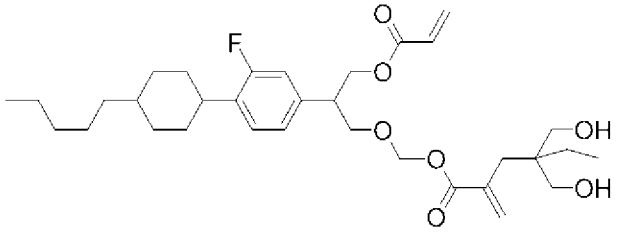
(1-2-54)



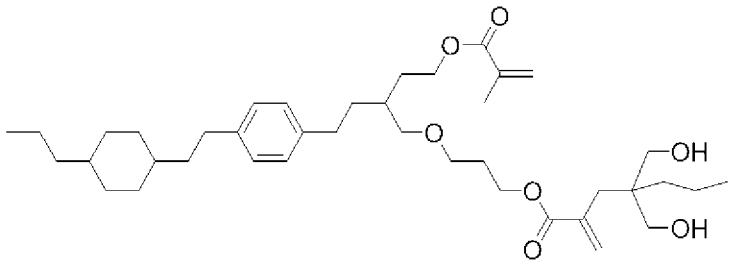
(1-2-55)



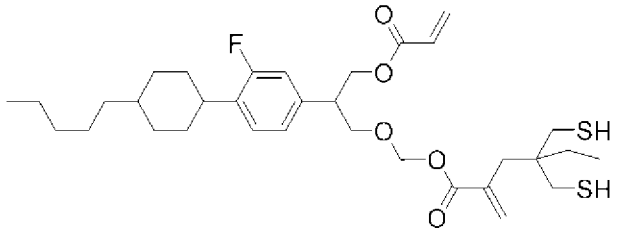
(1-2-56)



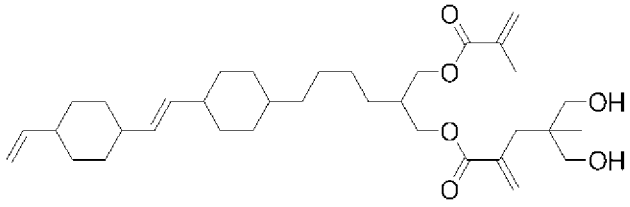
(1-2-57)



(1-2-58)



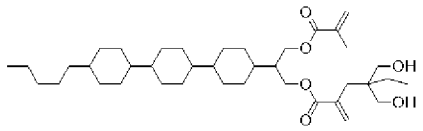
(1-2-59)



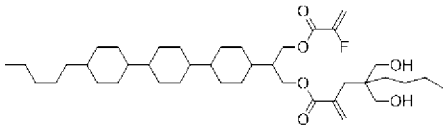
[0207]

No.

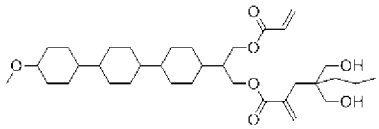
(1-3-1)



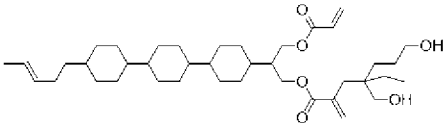
(1-3-2)



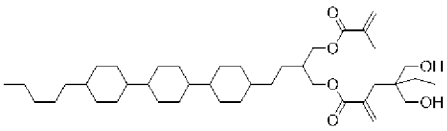
(1-3-3)



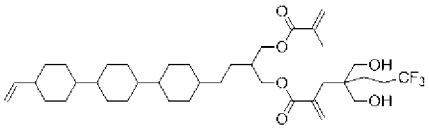
(1-3-4)



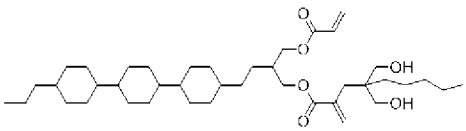
(1-3-5)



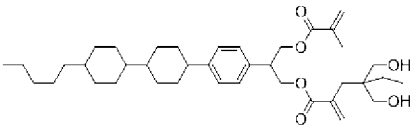
(1-3-6)



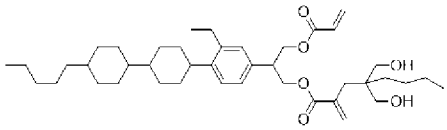
(1-3-7)



(1-3-8)

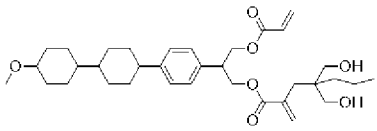


(1-3-9)

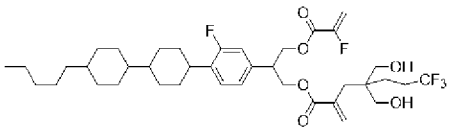


No.

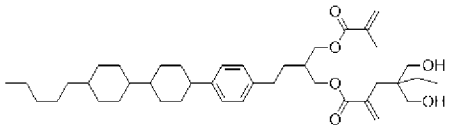
(1-3-10)



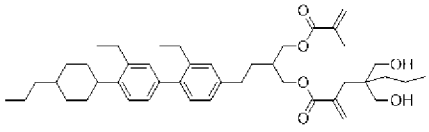
(1-3-11)



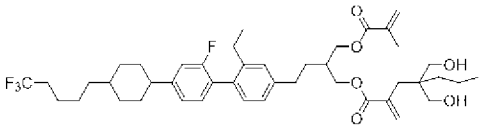
(1-3-12)



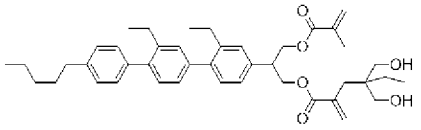
(1-3-13)



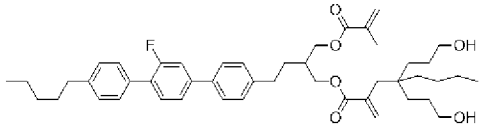
(1-3-14)



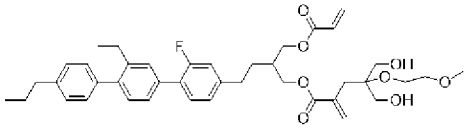
(1-3-15)



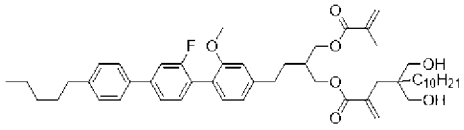
(1-3-16)



(1-3-17)



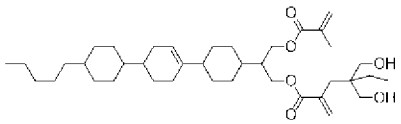
(1-3-18)



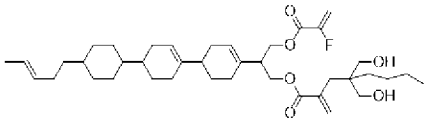
[0208]

No

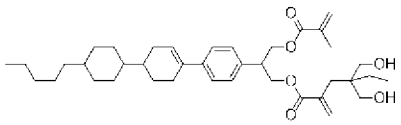
(1-3-19)



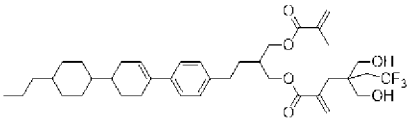
(1-3-20)



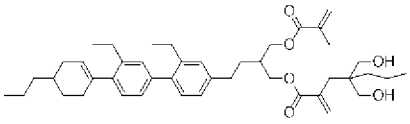
(1-3-21)



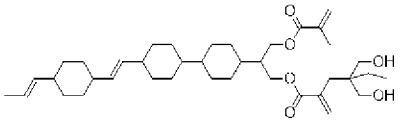
(1-3-22)



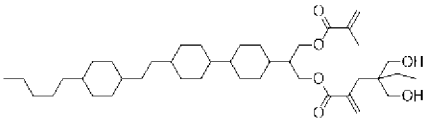
(1-3-23)



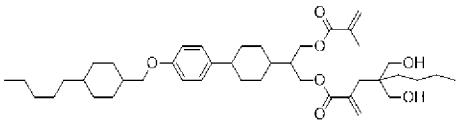
(1-3-24)



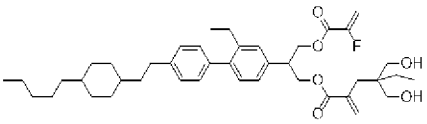
(1-3-25)



(1-3-26)

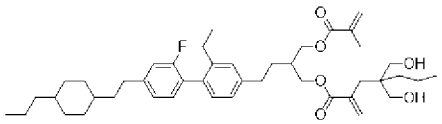


(1-3-27)

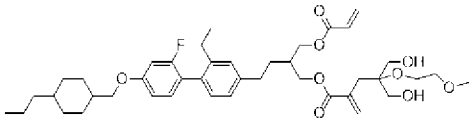


No.

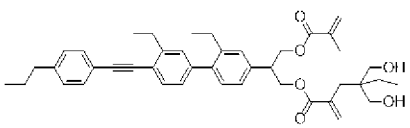
(1-3-28)



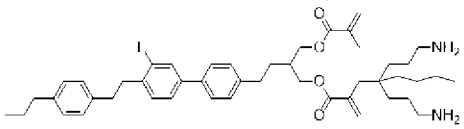
(1-3-29)



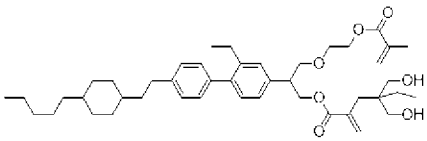
(1-3-30)



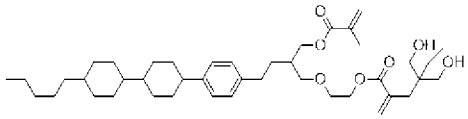
(1-3-31)



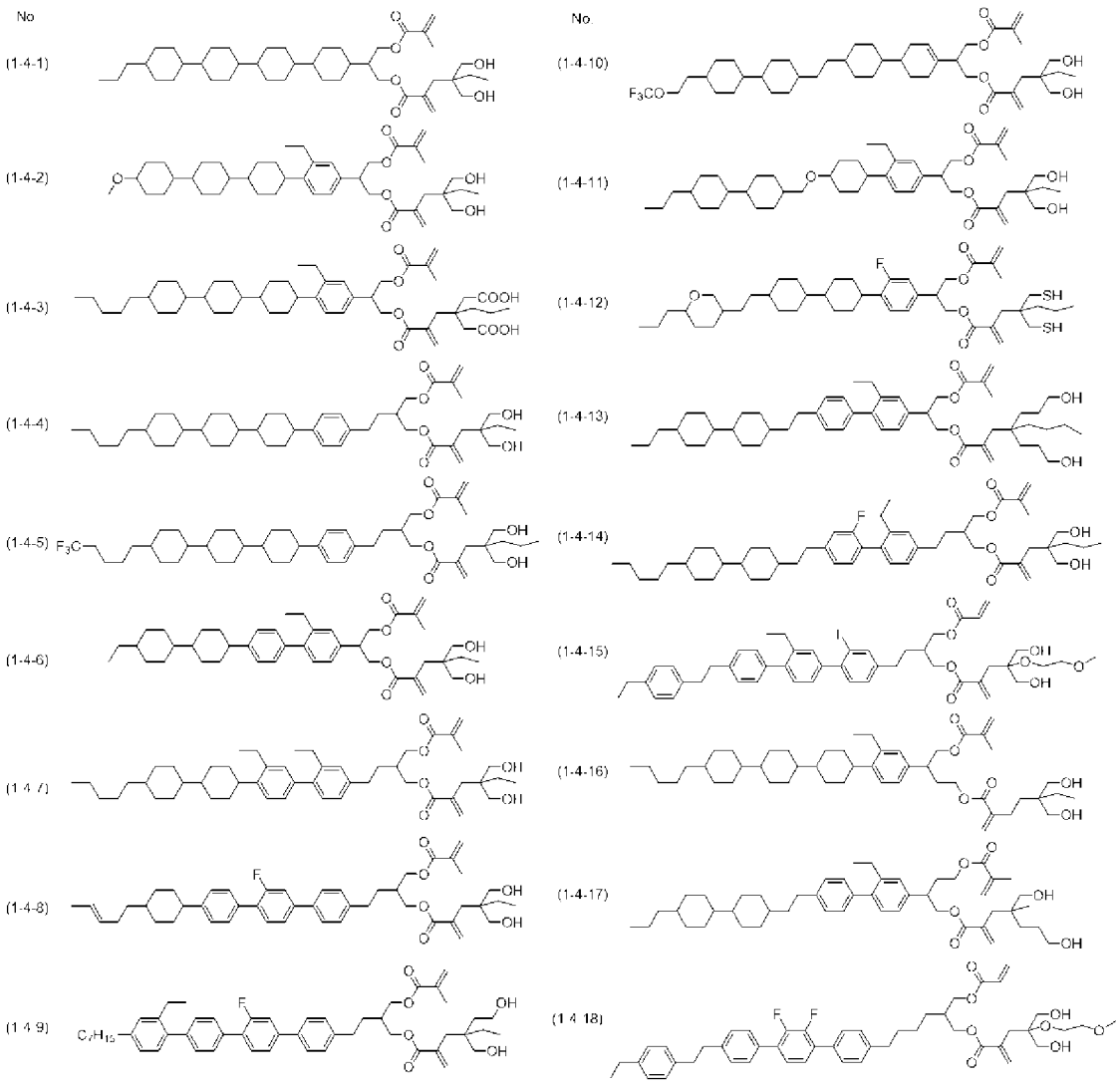
(1-3-32)



(1-3-33)



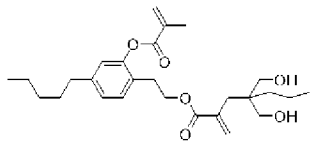
[0209]


No
(1-4-1)
(1-4-2)
(1-4-3)
(1-4-4)
(1-4-5)
(1-4-6)
(1-4-7)
(1-4-8)
(1-4-9)
No
(1-4-10)
(1-4-11)
(1-4-12)
(1-4-13)
(1-4-14)
(1-4-15)
(1-4-16)
(1-4-17)
(1-4-18)

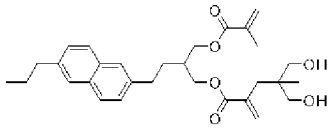
[0210]

No.

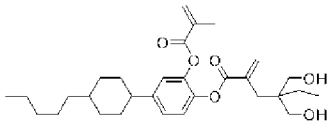
(1-5-1)



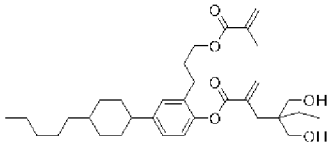
(1-5-2)



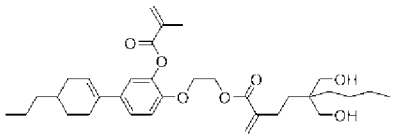
(1-5-3)



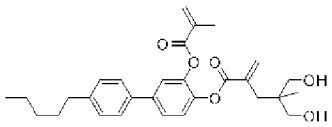
(1-5-4)



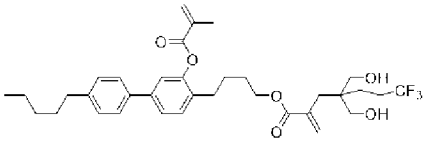
(1-5-5)



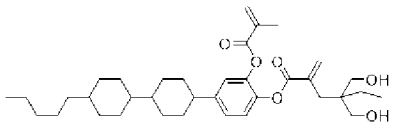
(1-5-6)



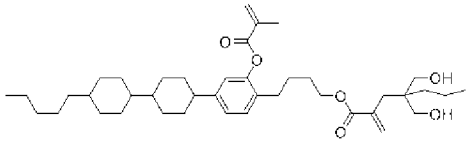
(1-5-7)



(1-5-8)

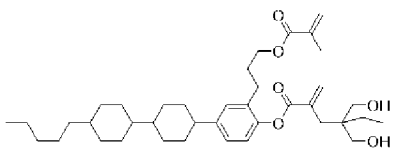


(1-5-9)

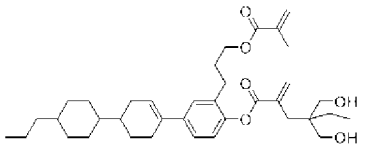


No.

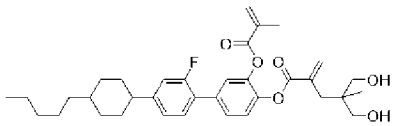
(1-5-10)



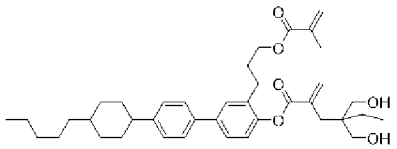
(1-5-11)



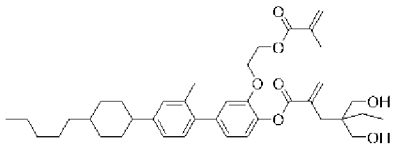
(1-5-12)



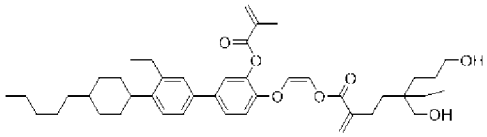
(1-5-13)



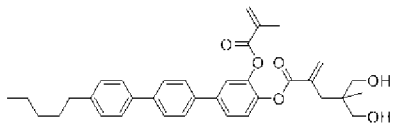
(1-5-14)



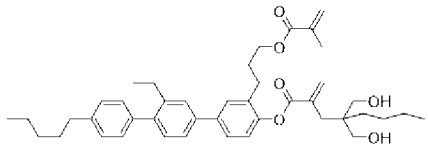
(1-5-15)



(1-5-16)



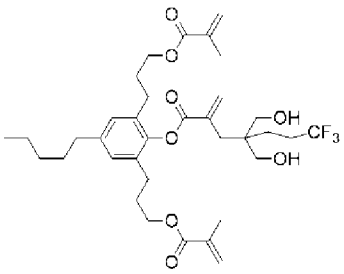
(1-5-17)



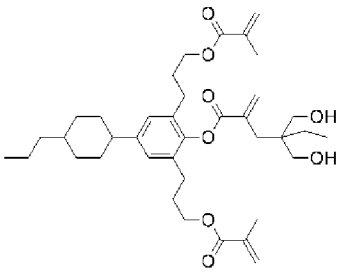
[0211]

No.

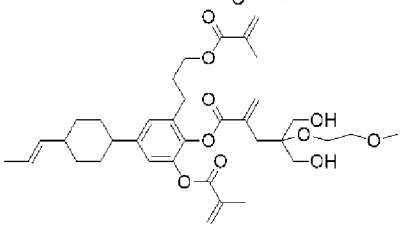
(1-5-18)



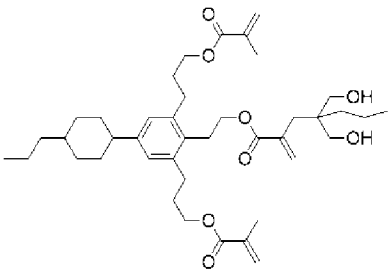
(1-5-19)



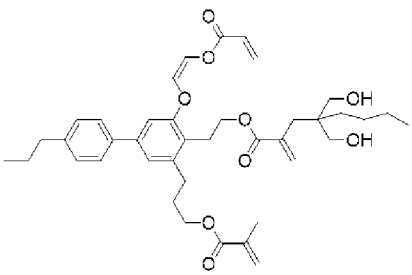
(1-5-20)



(1-5-21)

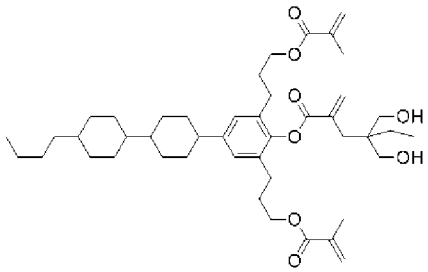


(1-5-22)

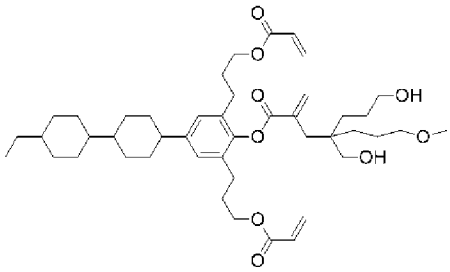


No.

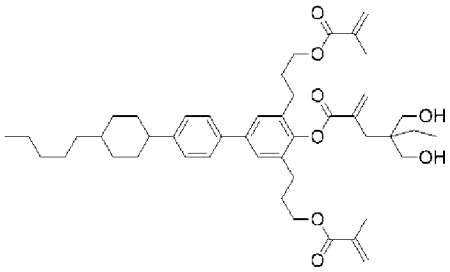
(1-5-23)



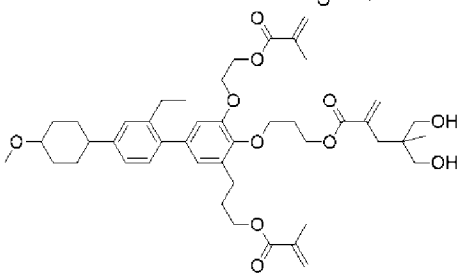
(1-5-24)



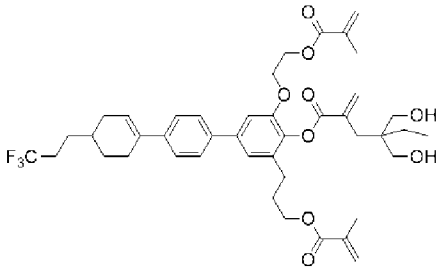
(1-5-25)



(1-5-26)



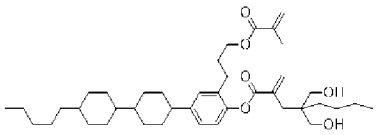
(1-5-27)



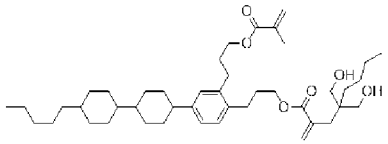
[0212]

No

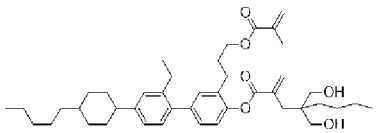
(1-6-1)



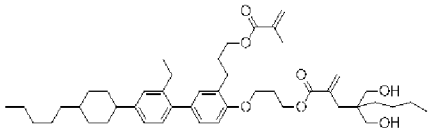
(1-6-2)



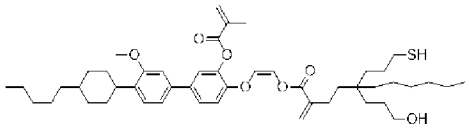
(1-6-3)



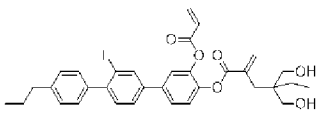
(1-6-4)



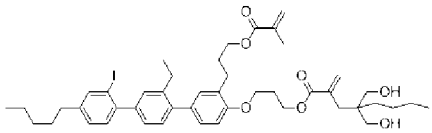
(1-6-5)



(1-6-6)

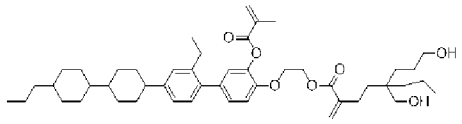


(1-6-7)

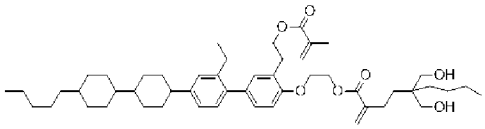


No

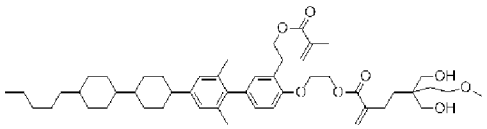
(1-6-8)



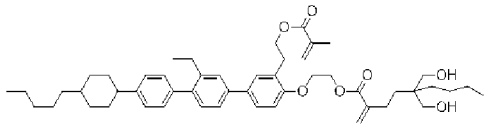
(1-6-9)



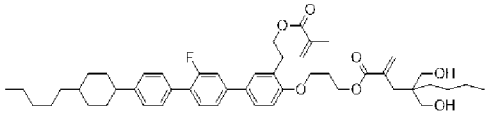
(1-6-10)



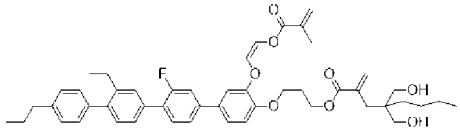
(1-6-11)



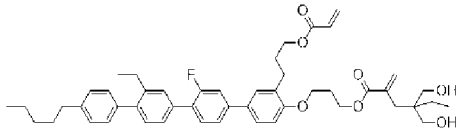
(1-6-12)



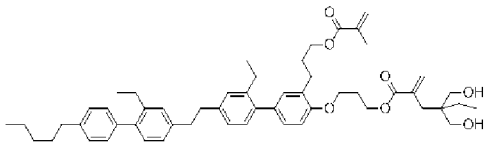
(1-6-13)



(1-6-14)



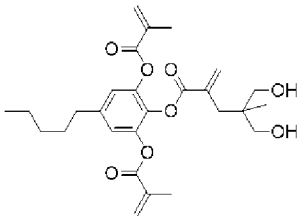
(1-6-15)



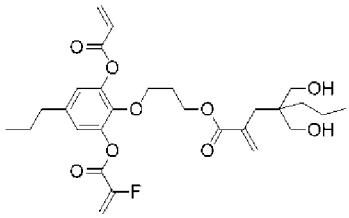
[0213]

No.

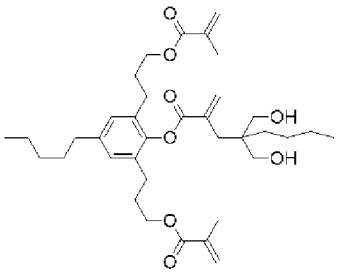
(1-7-1)



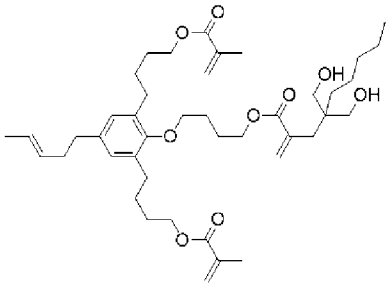
(1-7-2)



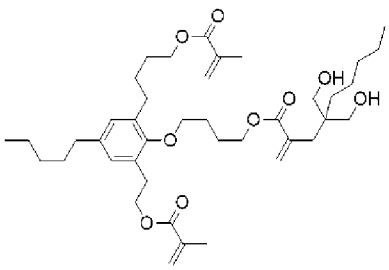
(1-7-3)



(1-7-4)

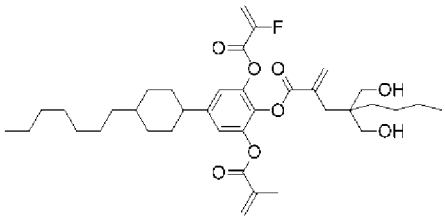


(1-7-5)

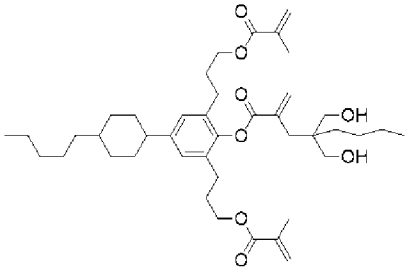


No.

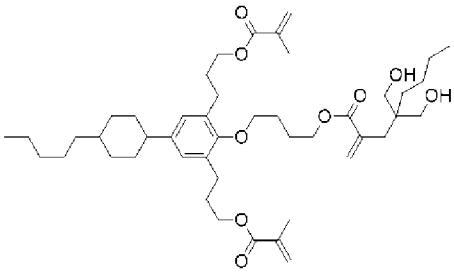
(1-7-6)



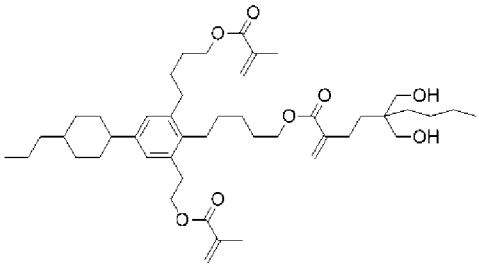
(1-7-7)



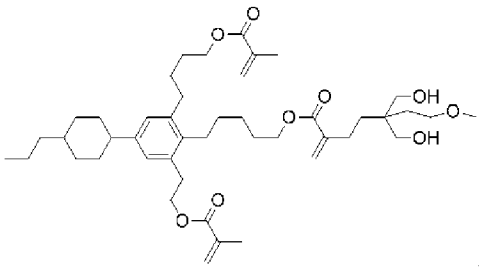
(1-7-8)



(1-7-9)



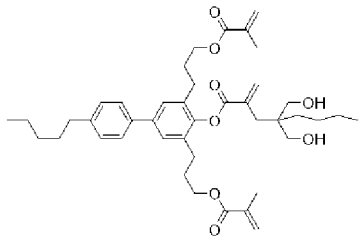
(1-7-10)



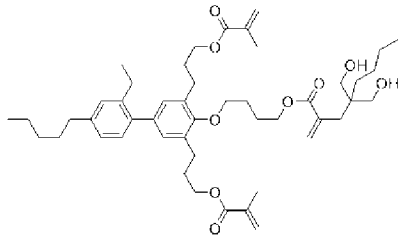
[0214]

No.

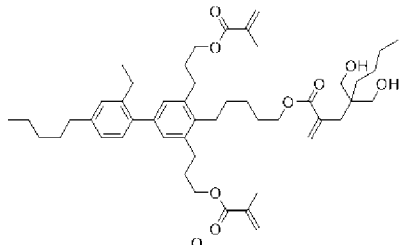
(1-7-11)



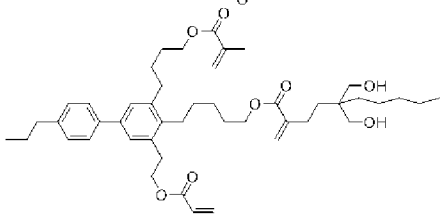
(1-7-12)



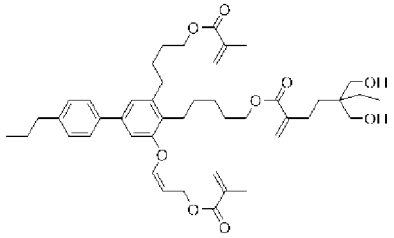
(1-7-13)



(1-7-14)

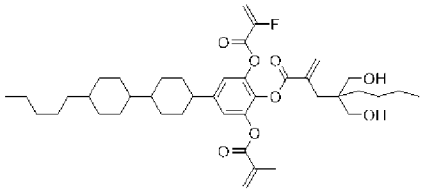


(1-7-15)

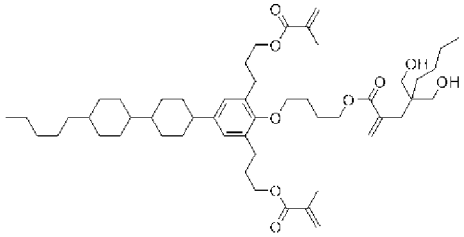


No.

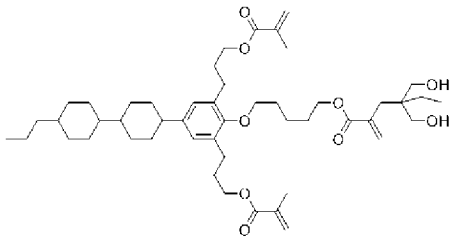
(1-7-16)



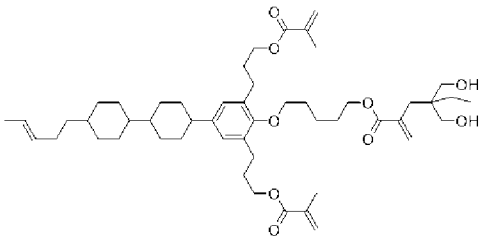
(1-7-17)



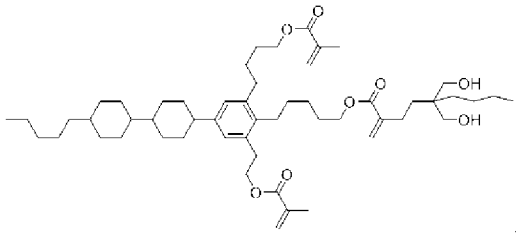
(1-7-18)



(1-7-19)



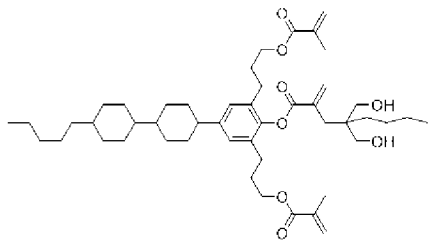
(1-7-20)



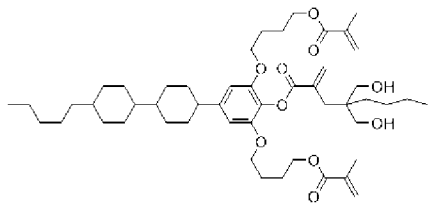
[0215]

No.

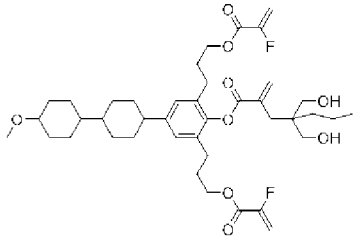
(1-7-21)



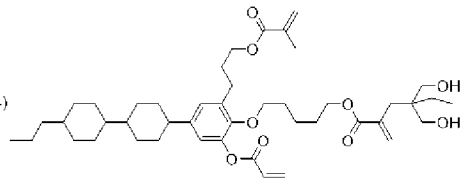
(1-7-22)



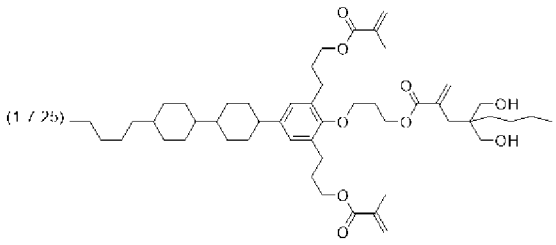
(1-7-23)



(1-7-24)

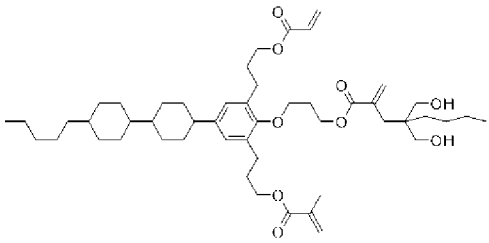


(1-7-25)

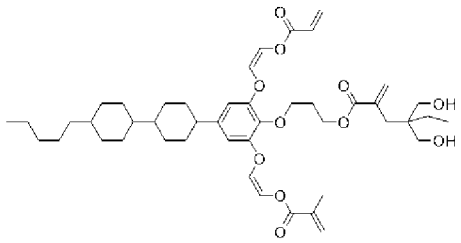


No.

(1-7-26)



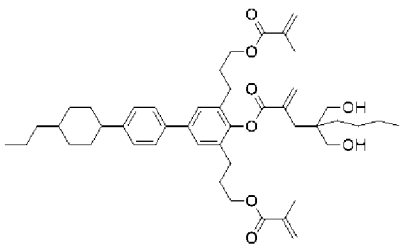
(1-7-27)



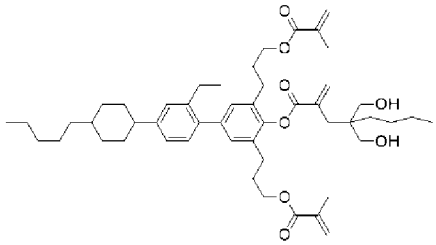
[0216]

No.

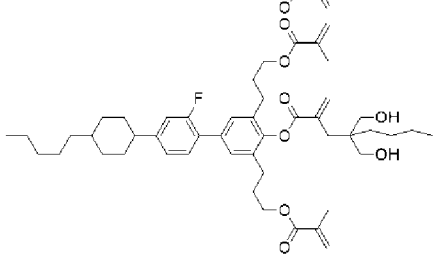
(1-8-1)



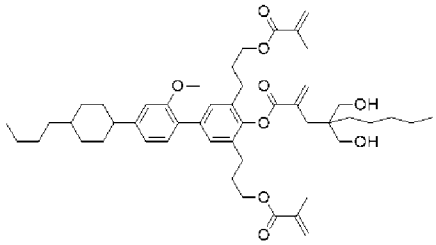
(1-8-2)



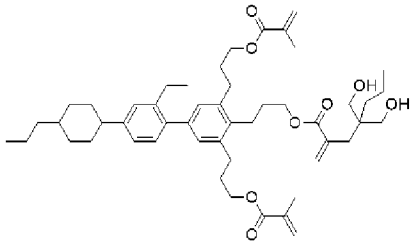
(1-8-3)



(1-8-4)

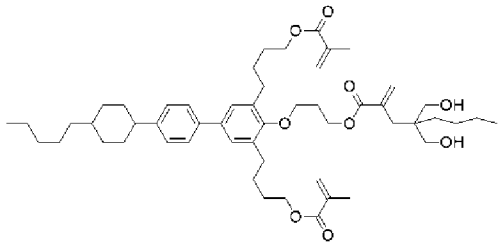


(1-8-5)

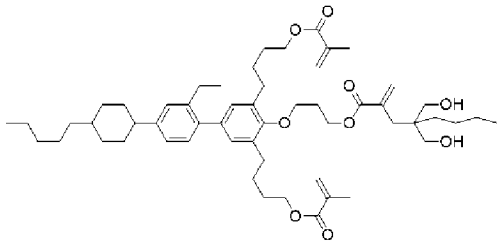


No.

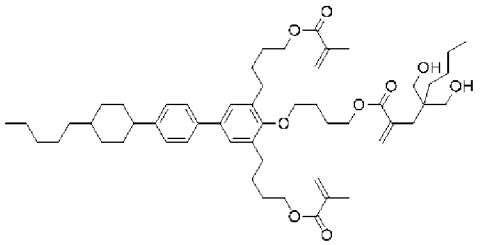
(1-8-6)



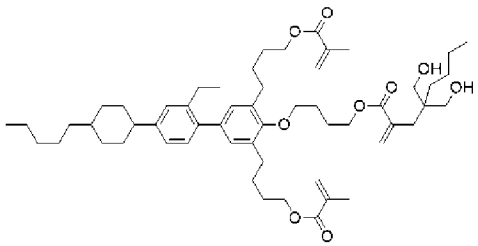
(1-8-7)



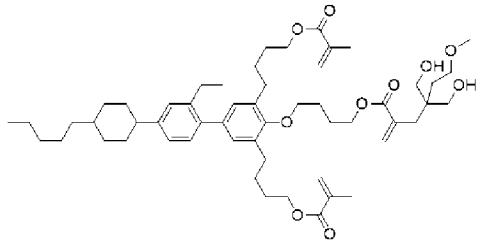
(1-8-8)



(1-8-9)



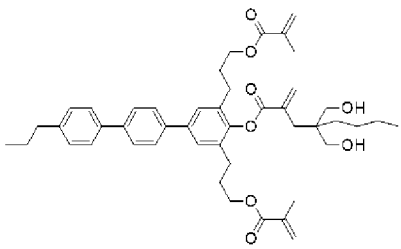
(1-8-10)



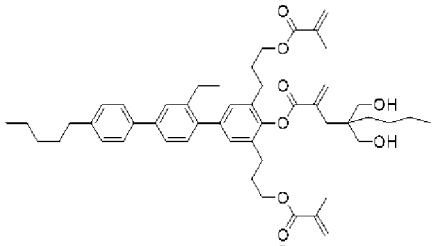
[0217]

No.

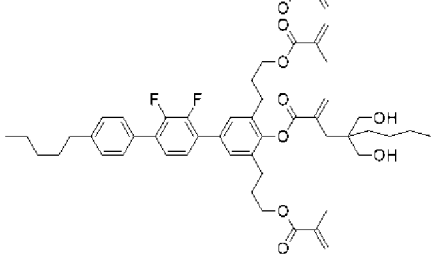
(1-8-11)



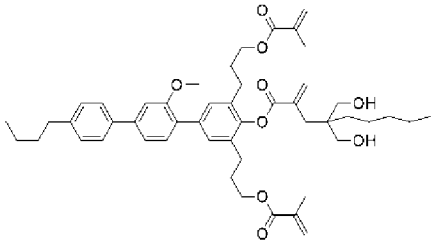
(1-8-12)



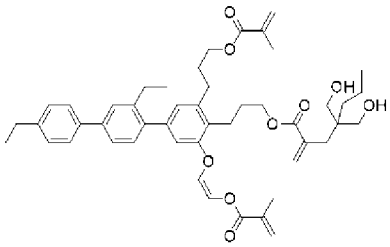
(1-8-13)



(1-8-14)

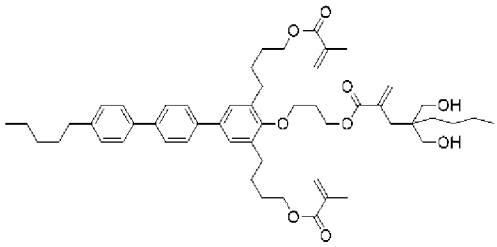


(1-8-15)

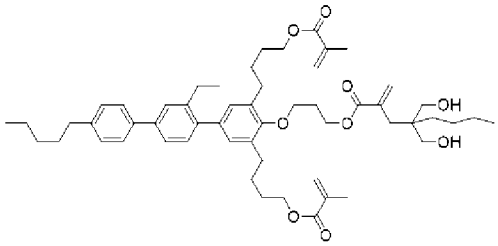


No.

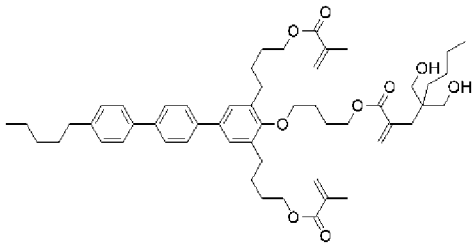
(1-8-16)



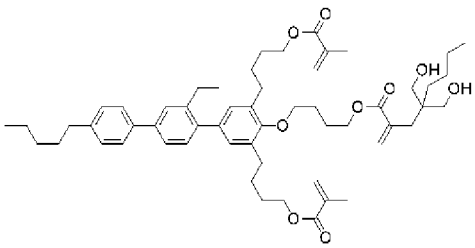
(1-8-17)



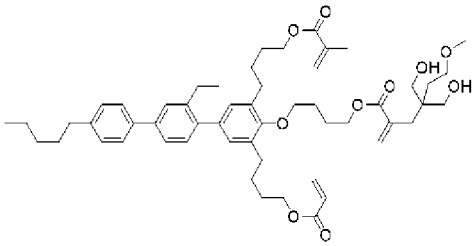
(1-8-18)



(1-8-19)



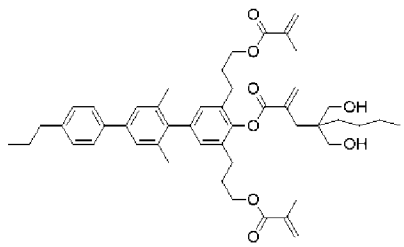
(1-8-20)



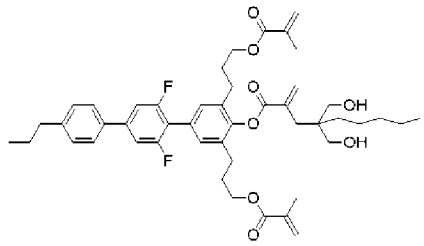
[0218]

No.

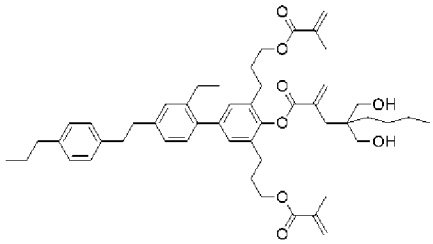
(1-8-21)



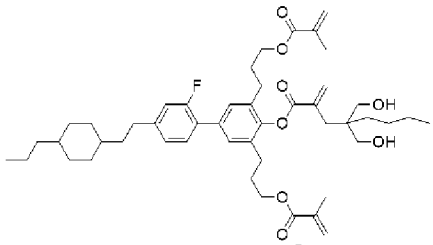
(1-8-22)



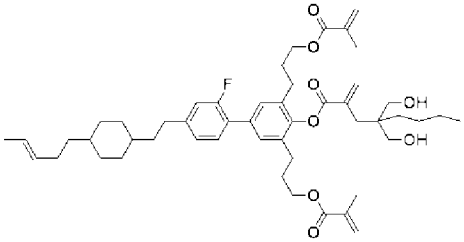
(1-8-23)



(1-8-24)

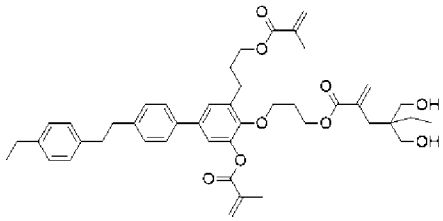


(1-8-25)

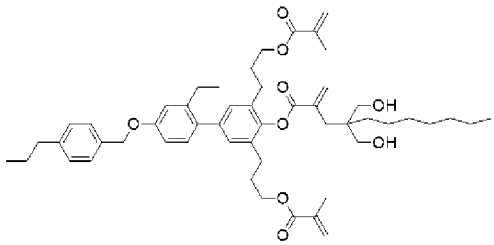


No.

(1-8-26)



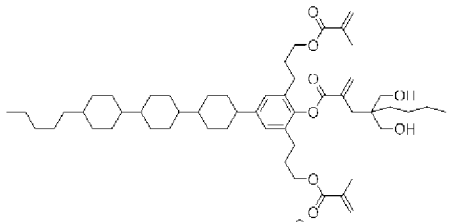
(1-8-27)



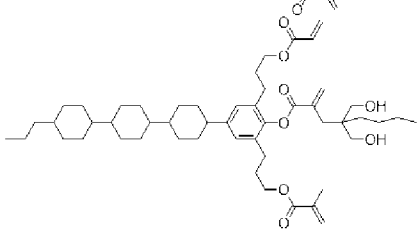
[0219]

No

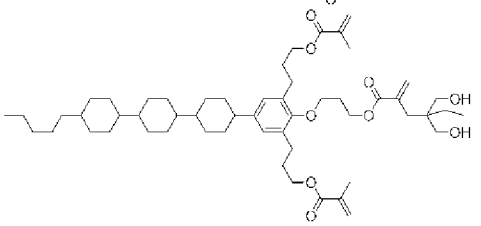
(1-9-1)



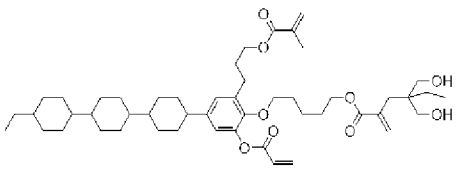
(1-9-2)



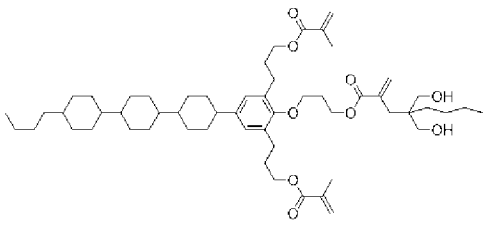
(1-9-3)



(1-9-4)

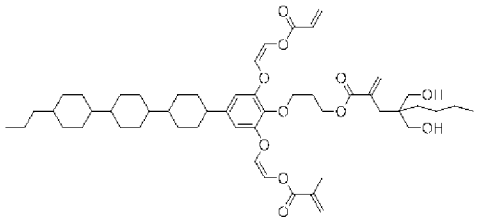


(1-9-5)

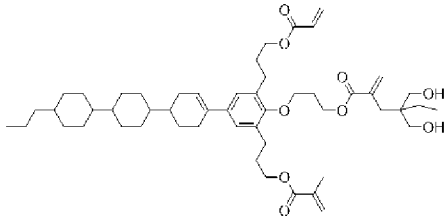


No

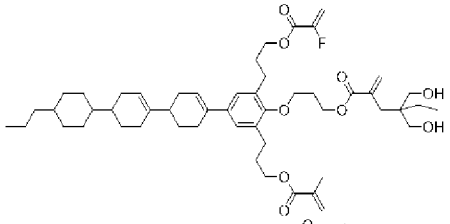
(1-9-6)



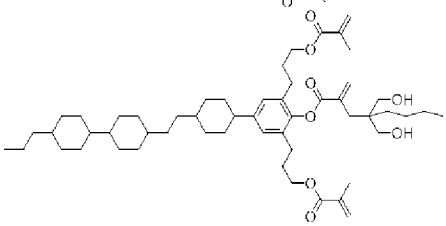
(1-9-7)



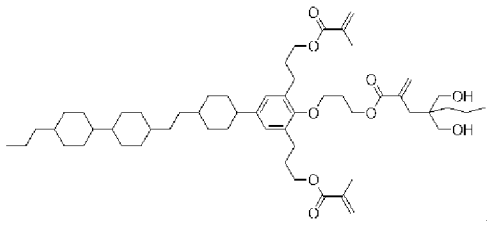
(1-9-8)



(1-9-9)



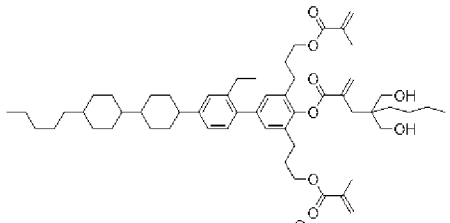
(1-9-10)



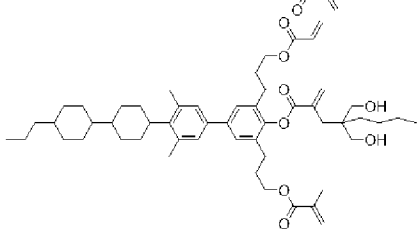
[0220]

No

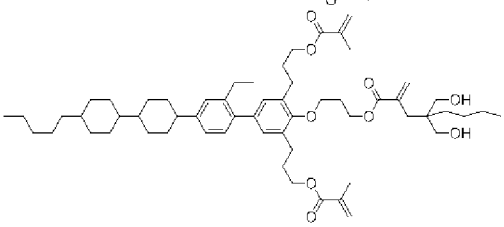
(1-9-11)



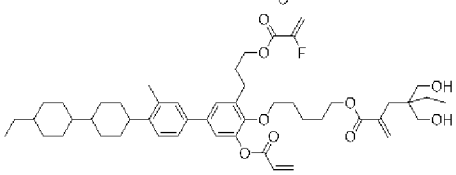
(1-9-12)



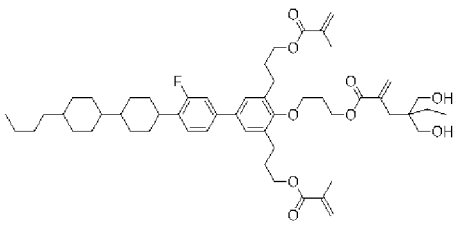
(1-9-13)



(1-9-14)

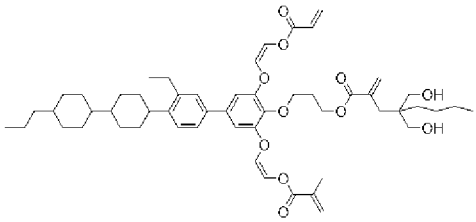


(1-9-15)

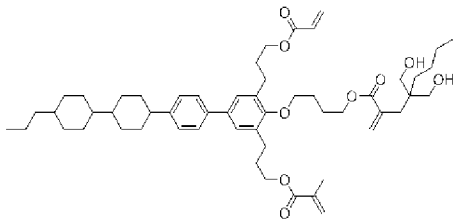


No.

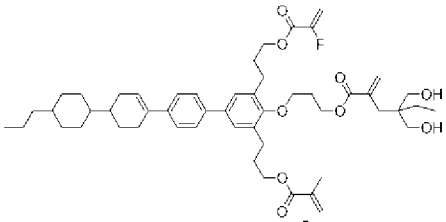
(1-9-16)



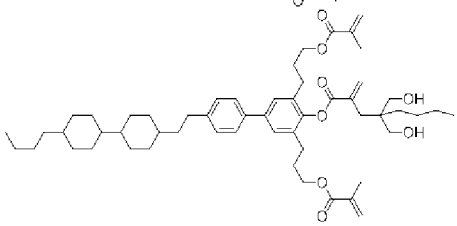
(1-9-17)



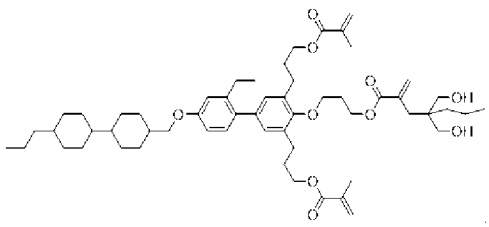
(1-9-18)



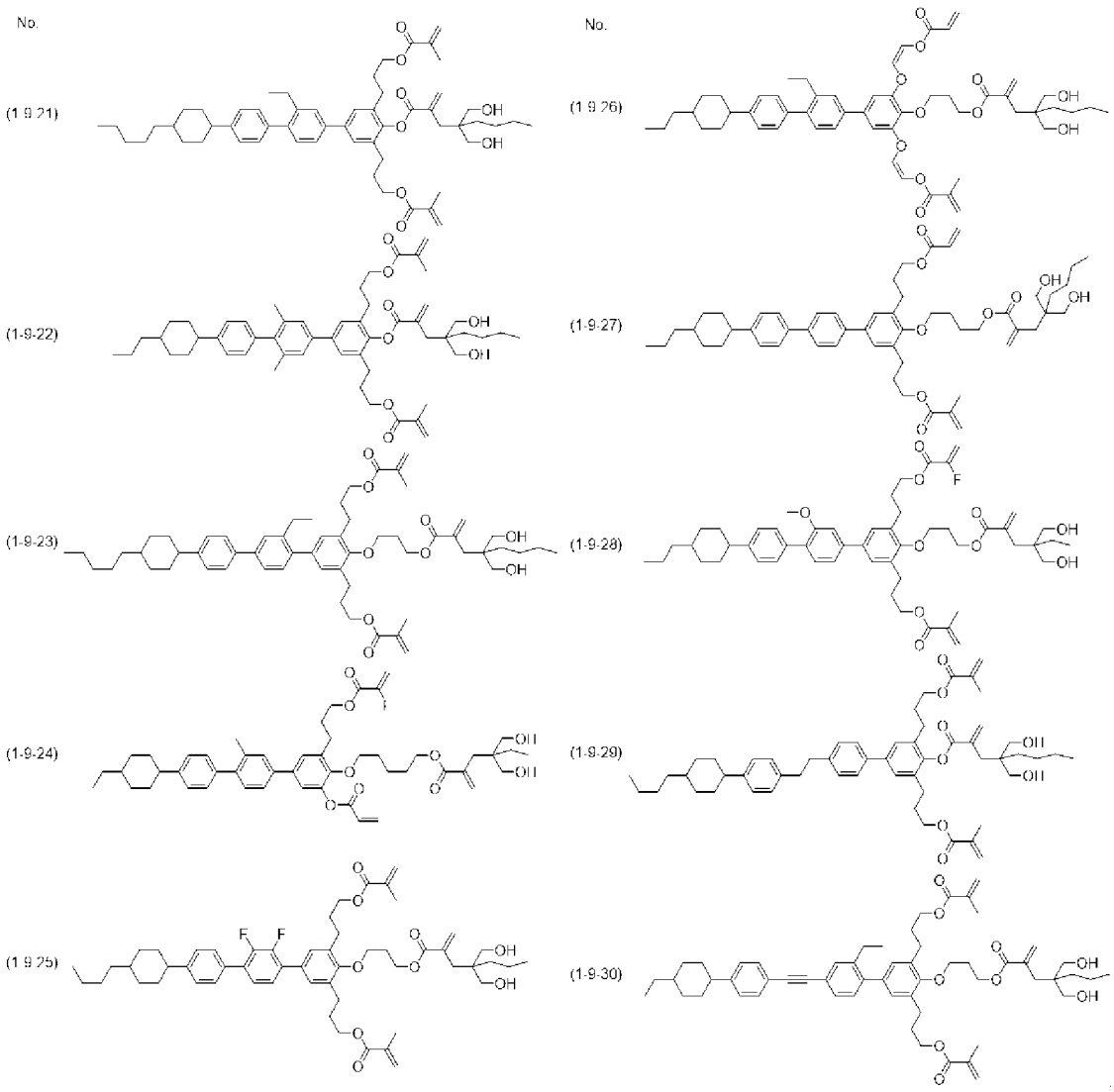
(1-9-19)



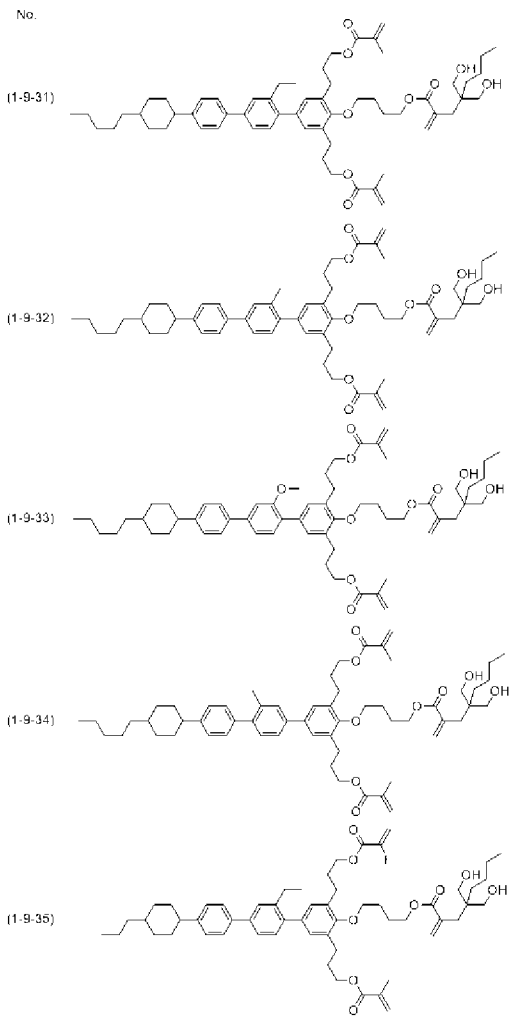
(1-9-20)

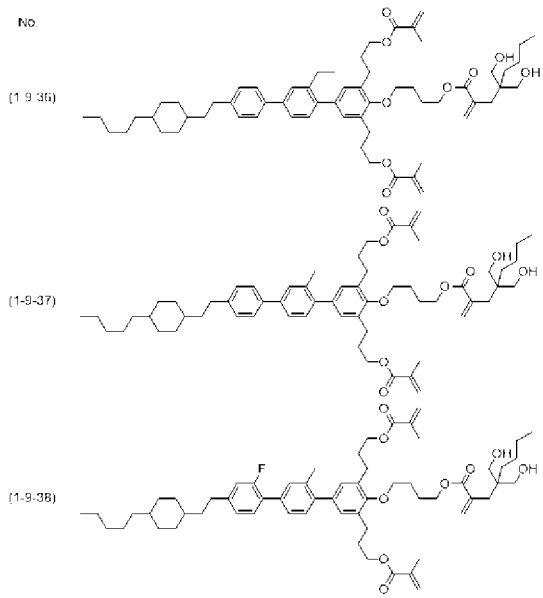


[0221]

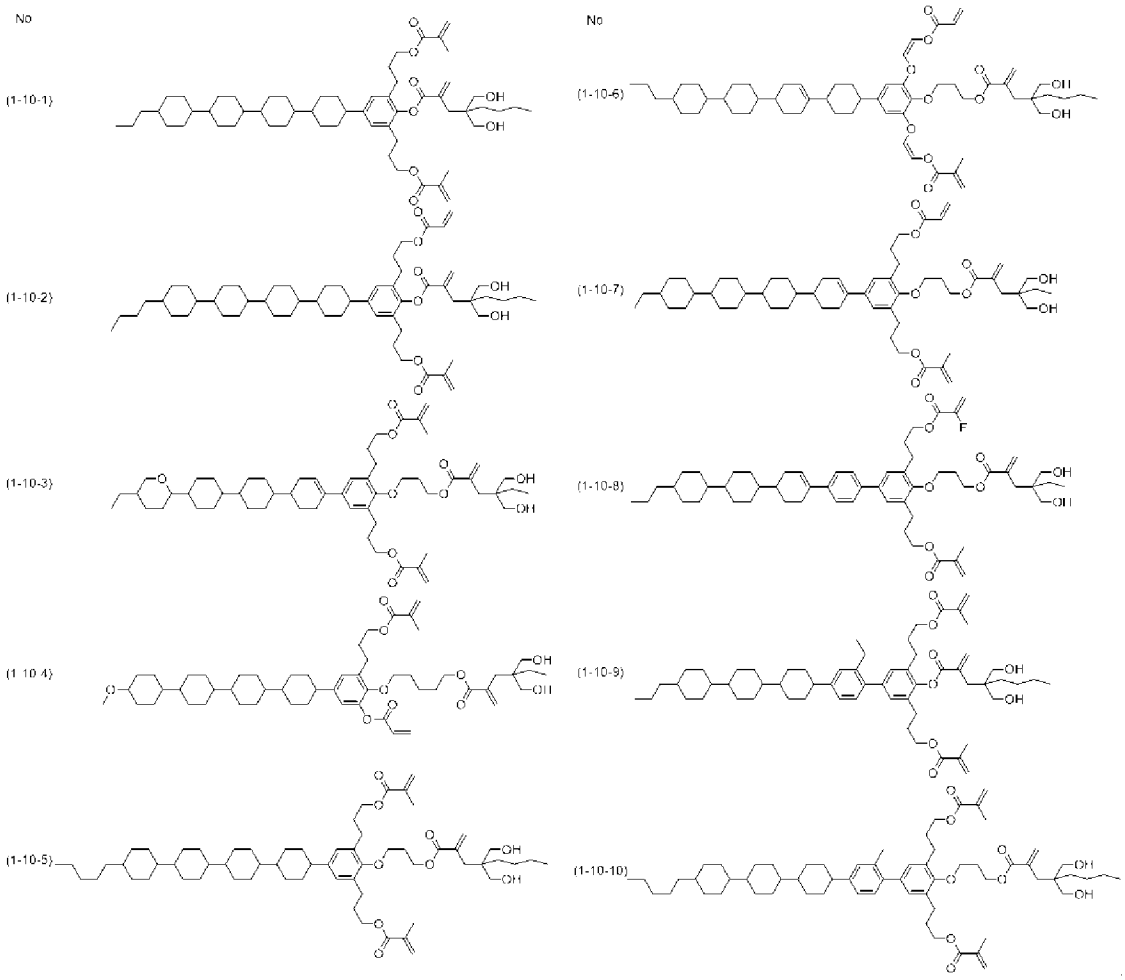


[0222]

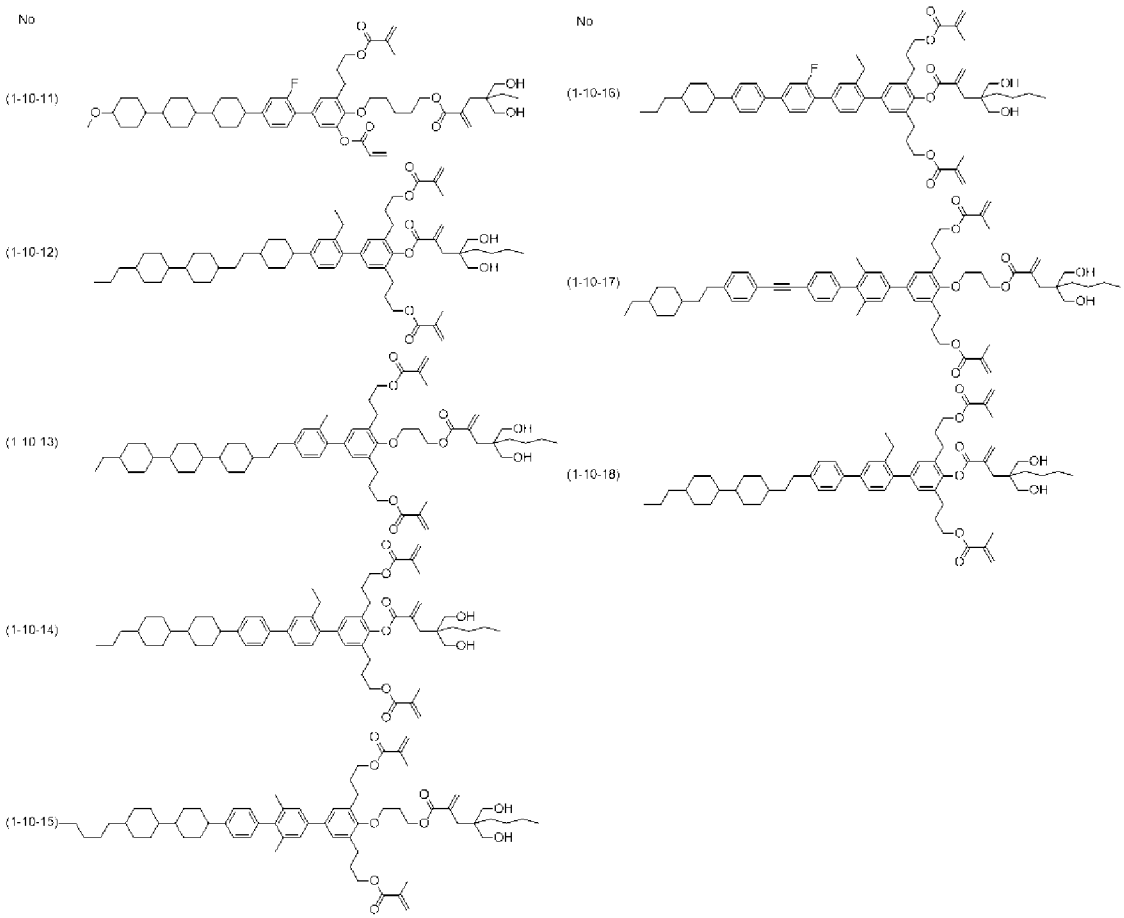




[0223]



[0224]



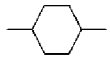
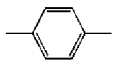
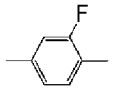
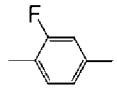
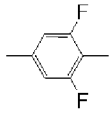
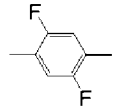
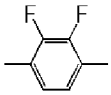
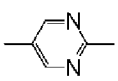
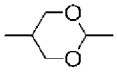
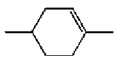
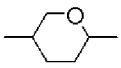
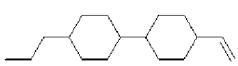
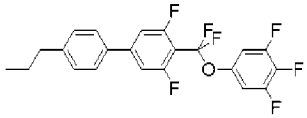
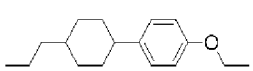
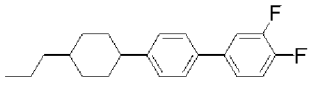
[0225] ２．組成物の実施例

実施例における化合物は、下記の表３の定義に基づいて記号により表した。表３において、１，４－シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。記号の後にあるかっこ内の番号は化合物の番号に対応する。（－）の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合（百分率）は、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）である。最後に、液晶組成物の特性値をまとめた。特性は、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。

[0226]

表3. 記号を用いた化合物の表記法

R-(A1)-Z1-・・・・・-Zn-(An)-R'

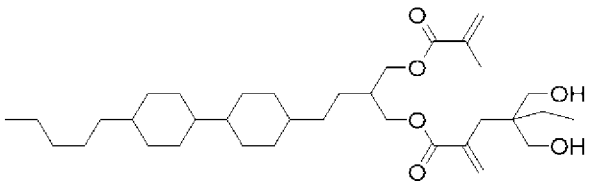
1) 左末端基 R-	記号	4) 環構造 -An-	記号
C_nH_{2n+1}-	n-		H
$C_nH_{2n+1}O$-	nO-		
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}$-	mOn-		B
CH_2=CH-	V-		
C_nH_{2n+1}-CH=CH-	nV-		B(F)
CH_2=CH-C_nH_{2n}-	Vn-		
C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-	mVn-		B(2F)
CF_2=CH-	VFF-		
CF_2=CH-C_nH_{2n}-	VFFn-		B(F,F)
2) 右末端基 -R'	**記号**		
-C_nH_{2n+1}	-n		B(2F,5F)
-OC_nH_{2n+1}	-On		
-$COOCH_3$	-EMe		B(2F,3F)
-CH=CH_2	-V		
-CH=CH-C_nH_{2n+1}	-Vn		Py
-C_nH_{2n}-CH=CH_2	-nV		
-C_mH_{2m}-CH=CH-C_nH_{2n+1}	-mVn		G
-CH=CF_2	-VFF		
-F	-F		ch
-Cl	-CL		
-OCF_3	-OCF3		dh
-OCF_2H	-OCF2H		
-CF_3	-CF3		
-OCH=CH-CF_3	-OVCF3		
-C≡N	-C		
3) 結合基 -Zn-	**記号**		
-C_nH_{2n}-	n		
-COO-	E		
-CH=CH-	V		
-CH_2O-	1O		
-OCH_2-	O1		
-CF_2O-	X		
-C≡C-	T		
5) 表記例			
例1 3-HH-V		**例2 3-BB(F,F)XB(F,F)-F**	
			
例3 3-HB-O2		**例4 3-HBB(F)-F**	
			

[0227] [使用例１]

１－ＢＢ－３ （２－８） ６％

１－ＢＢ－５	（２－８）	７％
２－ＢＴＢ－１	（２－１０）	３％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	７％
３－ＨＨＢ－３	（３－１）	１２％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（３－１）	６％
３－ＨＨＢ－Ｆ	（６－１）	４％
２－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	８％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	８％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	７％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３）	５％
３－ＨＨＥＢ－Ｆ	（６－１０）	４％
５－ＨＨＥＢ－Ｆ	（６－１０）	４％
２－ＨＢ－Ｃ	（８－１）	６％
３－ＨＢ－Ｃ	（８－１）	１３％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－６）を１重量％の割合で添加した。



(1-2-6)

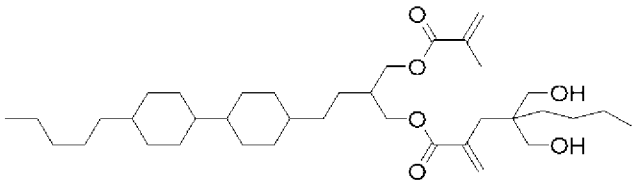
ＮＩ＝９５．６℃；η＝１７．９ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１０７；Δε＝５．１．

[0228] ［使用例２］

３－ＨＨ－４	（２－１）	１１％
５－ＨＢ－Ｏ２	（２－５）	４％
７－ＨＢ－１	（２－５）	２％
５－ＨＢＢ（Ｆ）Ｂ－２	（４－５）	５％
５－ＨＢＢ（Ｆ）Ｂ－３	（４－５）	５％
３－ＨＢ－ＣＬ	（５－２）	１３％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３）	３％

３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	２４％
４－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	１６％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	１７％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－８）を３重量％の割合で添加した。



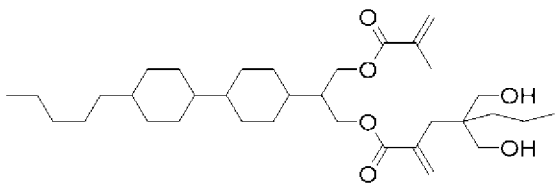
(1-2-8)

ＮＩ＝７０．６℃；η＝２０．８ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１１５；Δε＝６．０．

[0229] ［使用例３］

１Ｖ２－ＨＨ－１	（２－１）	３％
１Ｖ２－ＨＨ－３	（２－１）	４％
７－ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（５－４）	３％
２－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	８％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	１２％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	１０％
２－ＨＢＢ－Ｆ	（６－２２）	４％
３－ＨＢＢ－Ｆ	（６－２２）	２％
５－ＨＢＢ－Ｆ	（６－２２）	４％
２－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２３）	９％
３－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２３）	１０％
５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２３）	１６％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	５％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	１０％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－２）を５重量％の割合で添加した。



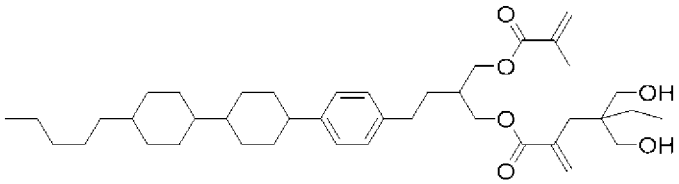
(1-2-2)

ＮＩ＝８５．１℃；η＝２５．３ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１１１；Δε＝５．７．

[0230] ［使用例４］

２－ＨＨ－３	（２－１）	８％
３－ＨＨ－４	（２－１）	８％
１０１－ＨＢＢＨ－５	（４－１）	４％
５－ＨＢ－ＣＬ	（５－２）	１５％
３－ＨＨＢ－Ｆ	（６－１）	４％
３－ＨＨＢ－ＣＬ	（６－１）	３％
４－ＨＨＢ－ＣＬ	（６－１）	４％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	１０％
４－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	９％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	９％
７－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	８％
５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２３）	４％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	２％
４－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	３％
５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	３％
３－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－１５）	３％
４－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－１５）	３％

上記の組成物に下記の化合物（１－３－１２）を３．５重量％の割合で添加した。



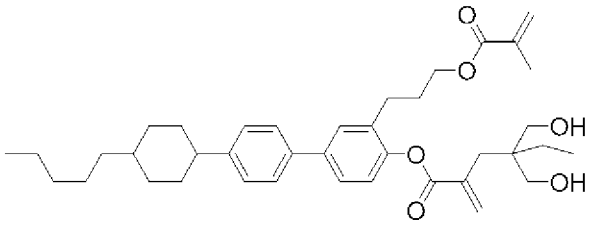
(1-3-12)

ＮＩ＝１１４．４℃；η＝１８．７ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０９１；Δε＝３．７．

[0231] ［使用例５］

Ｖ－ＨＢＢ－２	（３－４）	１０％
１Ｏ１－ＨＢＢＨ－４	（４－１）	３％
１Ｏ１－ＨＢＢＨ－５	（４－１）	５％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３）	９％
３－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１５）	１０％
４－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１５）	６％
５－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１５）	８％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	１０％
５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	２１％
３－Ｈ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２７）	１０％
５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	４％
３－ＨＨ２ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－１５）	２％
５－ＨＨＥＢＢ－Ｆ	（７－１７）	２％

上記の組成物に下記の化合物（１－５－１３）を５重量％の割合で添加した。



(1-5-13)

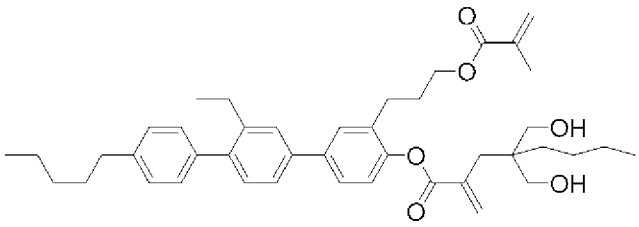
ＮＩ＝１０６．７℃；η＝３２．６ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１２３；Δε＝８．３．

[0232] ［使用例６］

５－ＨＢＢＨ－３	（４－１）	３％
３－ＨＢ（Ｆ）ＢＨ－３	（４－２）	３％
５－ＨＢ－Ｆ	（５－２）	１２％
６－ＨＢ－Ｆ	（５－２）	９％
７－ＨＢ－Ｆ	（５－２）	７％
２－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（６－１）	７％

３－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（６－１）	４％
４－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（６－１）	７％
５－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（６－１）	８％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＯＣＦ２Ｈ	（６－３）	６％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＯＣＦ３	（６－３）	３％
３－ＨＨ２Ｂ－ＯＣＦ３	（６－４）	４％
５－ＨＨ２Ｂ－ＯＣＦ３	（６－４）	４％
３－ＨＨ２Ｂ（Ｆ）－Ｆ	（６－５）	３％
３－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２３）	５％
５－ＨＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２３）	１５％

上記の組成物に下記の化合物（１－５－１７）を４重量％の割合で添加した。



(1-5-17)

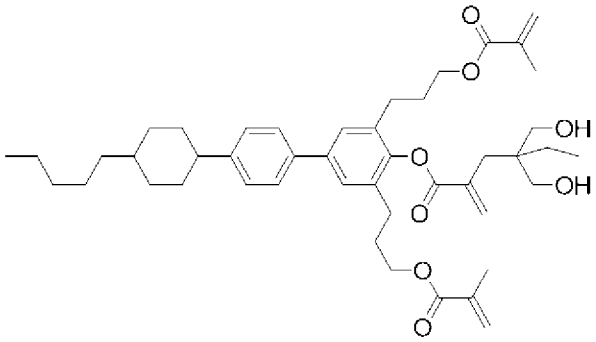
ＮＩ＝８６．０℃；η＝１４．６ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０９２；Δε＝４．３．

[0233] ［使用例７］

２－ＨＨ－５	（２－１）	２％
３－ＨＨ－４	（２－１）	７％
５－Ｂ（Ｆ）ＢＢ－２	（３－８）	４％
５－ＨＢ－ＣＬ	（５－２）	１１％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３）	８％
３－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１２）	５％
４－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１２）	８％
５－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１２）	３％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	２０％

５－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２４）	１５％
２－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３９）	３％
３－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３９）	３％
５－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３９）	５％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	６％

上記の組成物に下記の化合物（１－５－２５）を２重量％の割合で添加した。



(1-5-25)

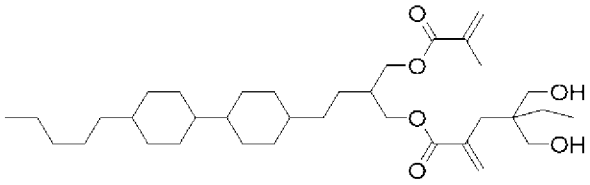
ＮＩ＝７７．１℃；η＝２２．４ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１０８；Δε＝８．５．

[0234] ［使用例８］

Ｖ２－ＨＨＢ－１	（３－１）	４％
３－ＨＢ－ＣＬ	（５－２）	３％
５－ＨＢ－ＣＬ	（５－２）	７％
３－ＨＨＢ－ＯＣＦ３	（６－１）	５％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	７％
Ｖ－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	４％
３－Ｈ２ＨＢ－ＯＣＦ３	（６－１３）	５％
５－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１５）	５％
５－Ｈ４ＨＢ－ＯＣＦ３	（６－１９）	１５％
５－Ｈ４ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－２１）	７％
３－Ｈ４ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（６－２１）	８％
５－Ｈ４ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（６－２１）	１０％

２－Ｈ２ＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２６）	５％
３－Ｈ２ＢＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２６）	１０％
３－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３９）	５％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－６）を０．５重量％の割合で添加した。



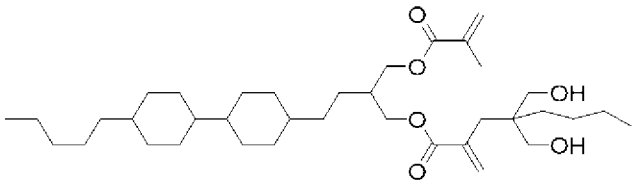
(1-2-6)

ＮＩ＝７２．８℃；η＝２５．０ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０９８；Δε＝８．２．

[0235] ［使用例９］

３－ＨＨ－４	（２－１）	５％
３－ＨＨ－５	（２－１）	１０％
３－ＨＢ－Ｏ２	（２－５）	１５％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	５％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（３－１）	８％
５－ＨＢ－ＣＬ	（５－２）	１７％
７－ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（５－４）	３％
２－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	８％
３－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	８％
５－ＨＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（６－２）	５％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３）	６％
３－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１５）	５％
４－Ｈ２ＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１５）	５％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－８）を０．７重量％の割合で添加した。



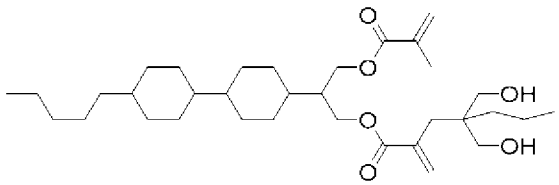
(1-2-8)

ＮＩ＝７１．９℃；η＝１４．１ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０７５；Δε＝２．９．

[0236] ［使用例１０］

３－ＨＨ－４	（２－１）	１２％
３－ＨＨ－５	（２－１）	７％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	１３％
５－ＨＢ－ＣＬ	（５－２）	３％
７－ＨＢ（Ｆ）－Ｆ	（５－３）	７％
２－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３）	２％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－３）	７％
３－ＨＨＥＢ－Ｆ	（６－１０）	８％
５－ＨＨＥＢ－Ｆ	（６－１０）	８％
３－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１２）	５％
４－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１２）	１０％
３－ＧＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１０９）	６％
４－ＧＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１０９）	５％
５－ＧＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１０９）	７％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－２）を０．３重量％の割合で添加した。



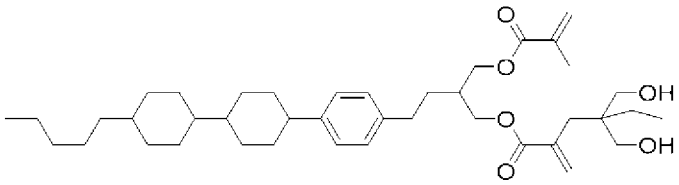
(1-2-2)

ＮＩ＝８７．１℃；η＝２１．７ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０７１；Δε＝５．９．

[0237] ［使用例１１］

３－ＨＨ－ＶＦＦ	（２－１）	８％
５－ＨＨ－ＶＦＦ	（２－１）	２２％
２－ＢＴＢ－１	（２－１０）	１０％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	４％
ＶＦＦ－ＨＨＢ－１	（３－１）	１０％
ＶＦＦ２－ＨＨＢ－１	（３－１）	９％
３－Ｈ２ＢＴＢ－２	（３－１７）	５％
３－Ｈ２ＢＴＢ－３	（３－１７）	５％
３－Ｈ２ＢＴＢ－４	（３－１７）	３％
３－ＨＢ－Ｃ	（８－１）	１８％
１Ｖ２－ＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｃ	（８－１５）	６％

上記の組成物に下記の化合物（１－３－１２）を０．２重量％の割合で添加した。



(1-3-12)

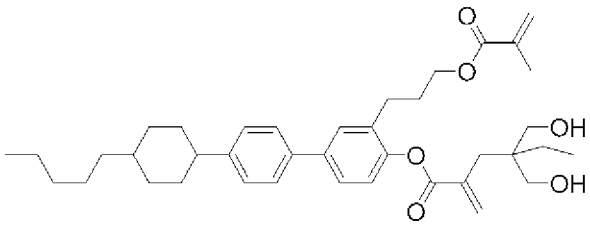
ＮＩ＝８０．８℃；η＝１０．８ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１３０；Δε＝６．６．

[0238] ［使用例１２］

３－ＨＨ－Ｖ	（２－１）	３０％
３－ＨＨ－Ｖ１	（２－１）	５％
５－ＨＨ－Ｖ	（２－１）	１０％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	５％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（３－１）	４％
２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－３	（３－６）	５％
３－ＨＨＥＨ－５	（３－１３）	３％
１Ｖ２－ＢＢ－Ｆ	（５－１）	３％

３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－９７）	８％
３－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１１４）	５％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	２％
３－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－３２）	４％
５－ＨＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	４％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	４％
５－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	３％

上記の組成物に下記の化合物（１－５－１３）を１．５重量％の割合で添加した。



(1-5-13)

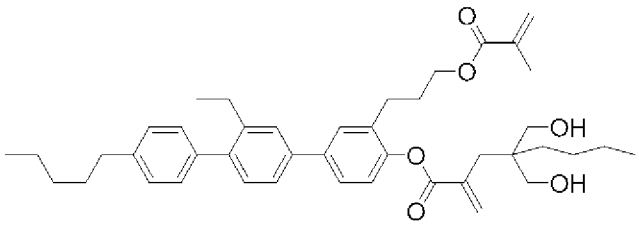
ＮＩ＝７８．０℃；η＝１２．１ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０９７；Δε＝５．５．

[0239] ［使用例１３］

３－ＨＨ－Ｖ	（２－１）	２５％
３－ＨＨ－Ｖ１	（２－１）	１０％
Ｖ－ＨＨ－Ｖ１	（２－１）	９％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	４％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（３－１）	５％
１－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－２Ｖ	（３－６）	４％
３－ＨＨＥＨ－５	（３－１３）	３％

１Ｖ２－ＢＢ－Ｆ	（５－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－９７）	６％
３－ＨＨＸＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（６－１００）	２％
３－ＧＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１１３）	４％
３－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１１６）	４％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	３％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	５％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	５％
５－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	３％
３－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５７）	５％

上記の組成物に下記の化合物（１－５－１７）を０．５重量％の割合で添加した。



(1-5-17)

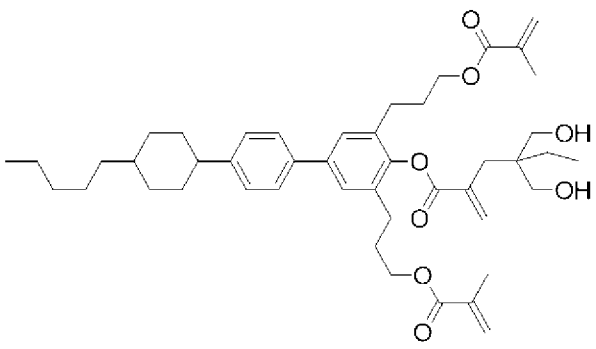
ＮＩ＝８１．５℃；η＝１３．３ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１０６；Δε＝７．３．

[0240] ［使用例１４］

３－ＨＨ－Ｖ	（２－１）	３０％
３－ＨＨ－Ｖ１	（２－１）	１０％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	５％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（３－１）	３％
３－ＨＢＢ－２	（３－４）	６％

Ｖ２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－１	（３－６）	５％
３－ＨＨＥＨ－３	（３－１３）	３％
３－ＨＨＥＨ－５	（３－１３）	３％
１Ｖ２－ＢＢ－Ｆ	（５－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－９７）	４％
３－ＧＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１１３）	３％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	３％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－３８）	３％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ）－Ｆ	（７－４６）	４％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	２％
５－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	３％
３－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５７）	３％
４－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５７）	５％
５－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５７）	２％

上記の組成物に下記の化合物（１－５－２５）を４重量％の割合で添加した。



(1-5-25)

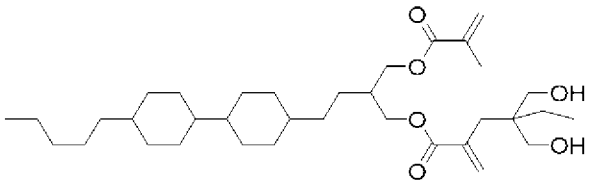
ＮＩ＝８１．９℃；η＝１３．５ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０９２；Δε＝

５．８．

[0241] ［使用例１５］

３－ＨＨ－Ｖ	（２－１）	３０％
３－ＨＨ－Ｖ１	（２－１）	８％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	４％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（３－１）	５％
Ｖ２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－１	（３－６）	４％
３－ＨＨＥＨ－５	（３－１３）	４％
３－ＨＨＥＢＨ－３	（４－６）	３％
１Ｖ２－ＢＢ－Ｆ	（５－１）	４％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－６９）	５％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－９７）	３％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	３％
５－ＨＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４１）	４％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５６）	５％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	３％
５－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４７）	４％
２－ｄｈＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５０）	３％
３－ｄｈＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５０）	２％
３－ＧＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５５）	２％
４－ＧＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５５）	４％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－６）を３重量％の割合で添加した。



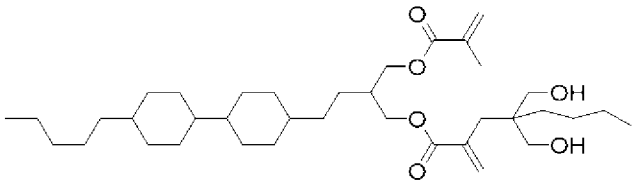
(1-2-6)

ＮＩ＝８４．６℃；η＝１９．３ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１０２；Δε＝５．６．

[0242] ［使用例１６］

３－ＨＨ－Ｖ	（２－１）	２５％
３－ＨＨ－Ｖ１	（２－１）	１０％
３－ＨＨＢ－１	（３－１）	５％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（３－１）	７％
Ｖ２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－１	（３－６）	５％
３－ＨＨＥＨ－５	（３－１３）	３％
１Ｖ２－ＢＢ－Ｆ	（５－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（６－６９）	３％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－９７）	５％
３－ＨＨＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１００）	５％
３－ＧＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（６－１１３）	３％
３－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）－Ｆ	（６－１１５）	３％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－６）	２％
５－ＨＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－４１）	５％
３－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５７）	３％
３－ＧＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５８）	４％
４－ＧＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５８）	２％
５－ＧＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（７－５８）	２％
３－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）－Ｆ	（７－５９）	３％

上記の組成物に下記の化合物（１－２－８）を１重量％の割合で添加した。



(1-2-8)

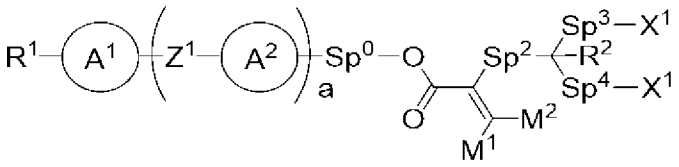
ＮＩ＝８３．５℃；η＝１６．６ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．０９８；Δε＝６．２．

産業上の利用可能性

[0243] 化合物（１）を含む液晶組成物は、液晶プロジェクター、液晶テレビなどの表示素子に用いることができる。

請求の範囲

[請求項1] 式（１）で表される化合物。



(1)

式（１）において、

Ｒ[1]は、水素または炭素数１から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、－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環Ａ[1]および環Ａ[2]は独立して、１，２－シクロプロピレン、１，３－シクロブチレン、１，３－シクロペンチレン、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘプチレン、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、またはピリジン－２，５－ジイルであり、この環Ａ[1]および環Ａ[2]において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ａは、０、１、２、３、または４であり；

Ｚ[1]は独立して、単結合または炭素数１から６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、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｓｐ^0、Ｓｐ^2、Ｓｐ^3、およびＳｐ^{4}は独立して、単結合または炭素数１から１５のアルキレンであり、このＳｐ^0、Ｓｐ^2、Ｓｐ^3、およびＳｐ^{4}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素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、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

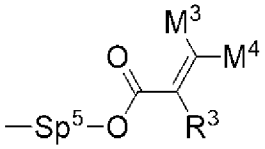
Ｒ^{2}は、炭素数１から１０のアルキルであり、このＲ^{2}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｘ^{1}は独立して、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－ＯＲ^4、－Ｎ（Ｒ^4）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、または－Ｓｉ（Ｒ^4）$_3$であり；

－ＯＲ^4、－Ｎ（Ｒ^4）$_2$、および－Ｓｉ（Ｒ^4）$_3$において、

Ｒ^{4}は水素または炭素数１から１０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、－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、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環Ａ^{2}またはＳｐ^{0}において、少なくとも１つの水素は、式（１－ａ）で表される基で置き換えられている；



(1-a)

式（１－ａ）において、

Ｓｐ^{5}は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{5}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－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、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｍ^{3}、およびＭ^{4}は独立して、水素、フッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

Ｒ^{3}は、炭素数１から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－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－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

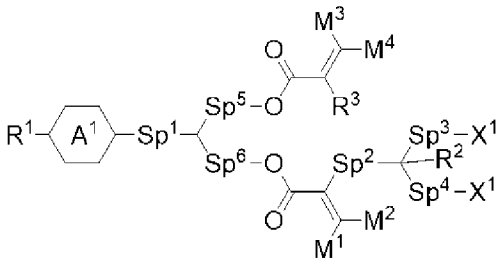
[請求項2] 式（１）において、

Ｚ^{1}が独立して、単結合、－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－、－（ＣＨ$_{2}$）$_{4}$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＦ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＨ$_{2}$－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；

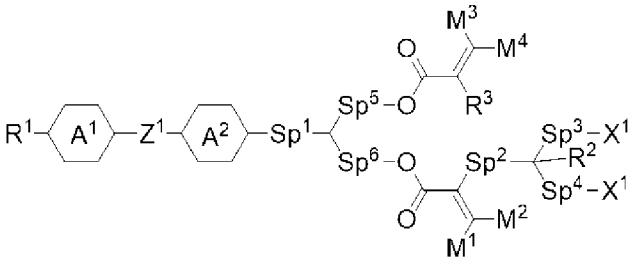
環Ａ^{1}および環Ａ^{2}が独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、またはピリジン－２，５－ジイルであり、この環Ａ^{1}および環Ａ^{2}において、少なく

とも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；環Ａ^{2}またはＳｐ^{0}において、少なくとも１つの水素は、式（１－ａ）で置き換えられている、請求項１に記載の化合物。

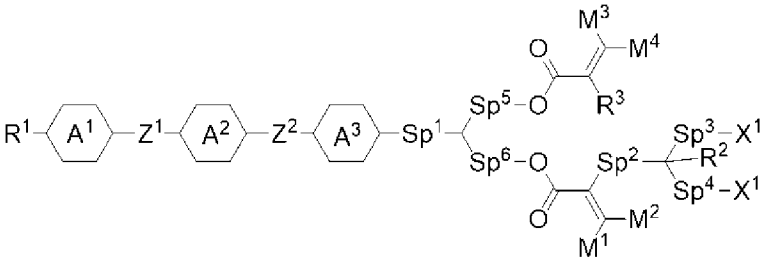
[請求項3] 式（１－１）から式（１－８）のいずれか１つで表される、請求項１または２に記載の化合物。



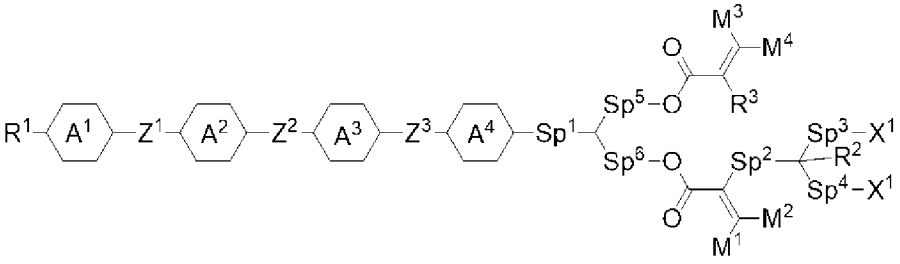
(1-1)



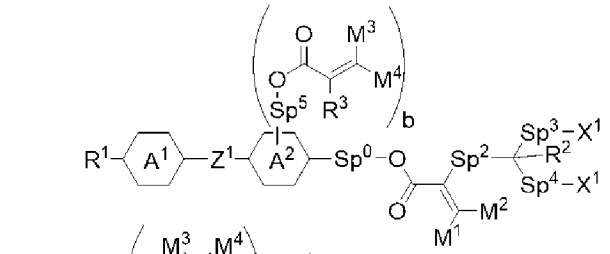
(1-2)



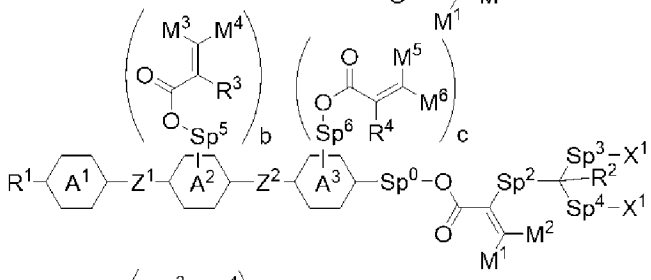
(1-3)



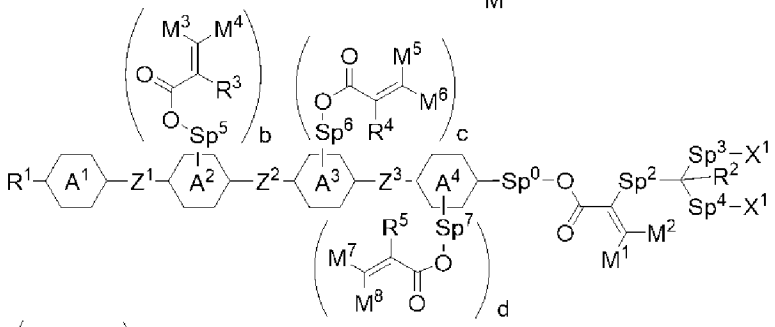
(1-4)



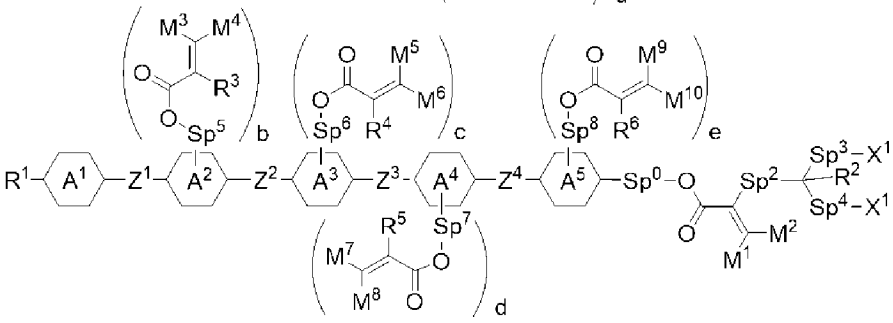
(1-5)



(1-6)



(1-7)



(1-8)

式（１－１）から式（１－８）において、

Ｒ[1]は、炭素数１から１５のアルキル、炭素数２から１５のアルケニル、炭素数１から１４のアルコキシ、または炭素数２～１４のアルケニルオキシであり、このＲ[1]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；

環Ａ[1]から環Ａ[5]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、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり、この環Ａ[1]から環Ａ[5]において、少なくとも１つの水素は、フッ素、炭素数１から１０のアルキル、炭素

数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシ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；

ｂからｅは独立して、０、１、２、３、または４であり、それらの合計は１、２、３、または４であり；

Z^1からZ^4は独立して、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；

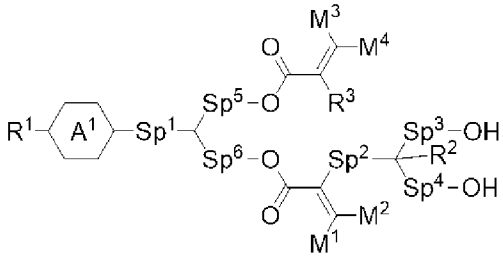
Sp^0からSp^8は独立して、単結合または炭素数１から７のアルキレンであり、このSp^0からSp^8において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、または－ＯＣＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

M^1からM^{10}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

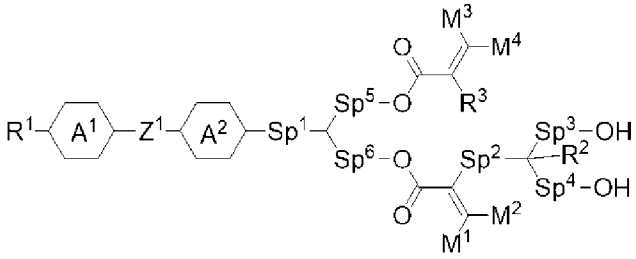
R^2からR^6は独立して、炭素数１から１０のアルキルであり、このR^2からR^6において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

X^1は独立して、－ＯＨ、－NH_2、または－ＳＨである。

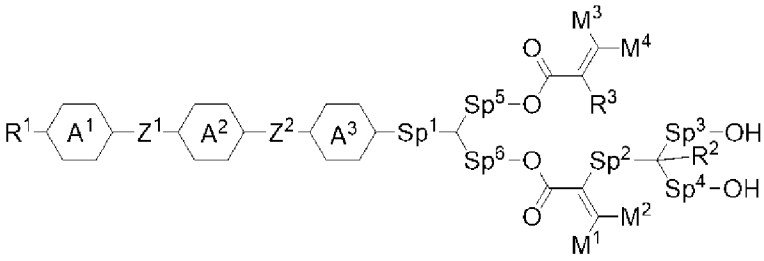
[請求項4] 式（１－９）から式（１－１６）のいずれか１つで表される、請求項１から３のいずれか１項に記載の化合物。



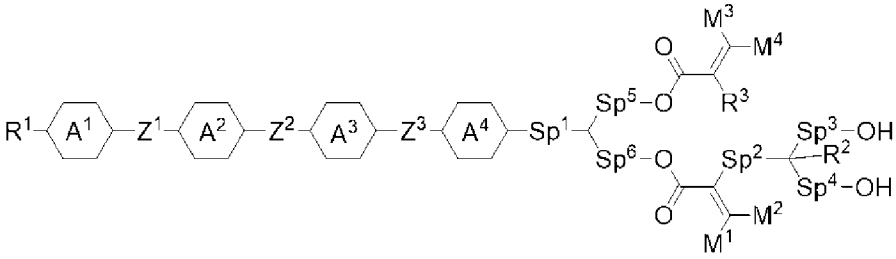
(1-9)



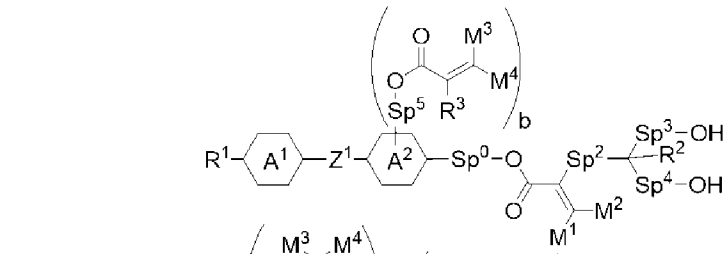
(1-10)



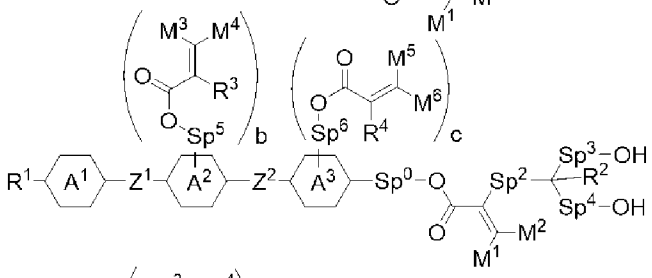
(1-11)



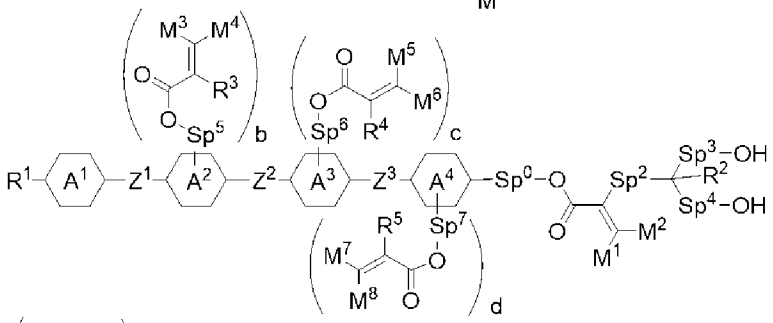
(1-12)



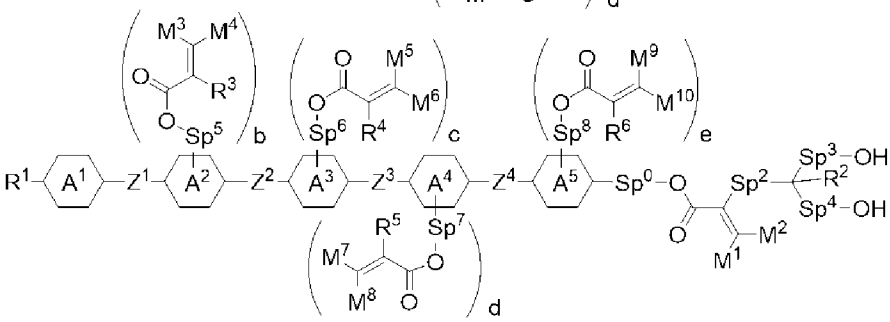
(1-13)



(1-14)



(1-15)



(1-16)

式（１－９）から式（１－１６）において、

Ｒ[1]は、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、または炭素数１から９のアルコキシであり；

環Ａ[1]から環Ａ[5]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、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、または１，３－ジオキサン－２，５－ジイルであり、この環Ａ[1]から環Ａ[5]において、少なくとも１つの水素は、フッ素、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシで置き換えられてもよく；

ｂからｅは独立して、０、１、２、３、または４であり、それらの合計は１、２、３、または４であり；

Z^1からZ^4は独立して、単結合、－（CH_2）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－CH_2O－、または－OCH_2－であり；

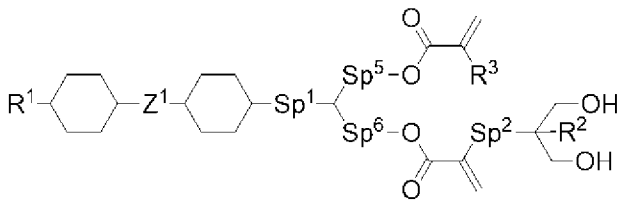
Sp^0からSp^8は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^0からSp^8において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく；

M^1からM^{10}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

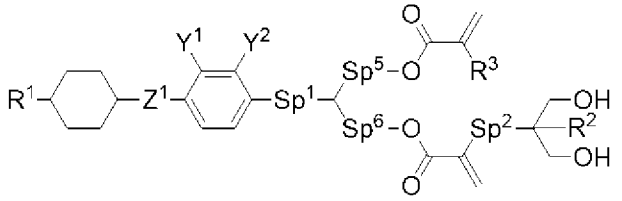
R^2は、炭素数１から３のアルキルであり；

R^3からR^6は独立して、炭素数１から１０のアルキル、または炭素数１から９のアルコキシである。

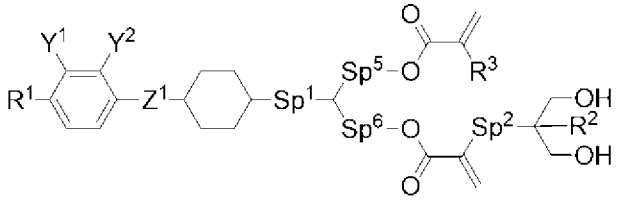
[請求項5] 式（１－１７）から式（１－５３）のいずれか１つで表される、請求項１から４のいずれか１項に記載の化合物。



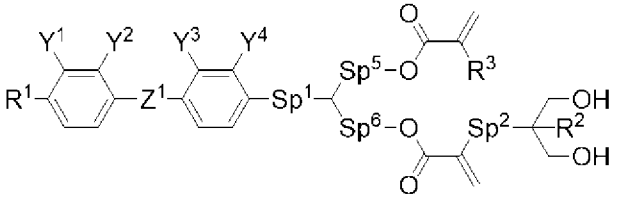
(1-17)



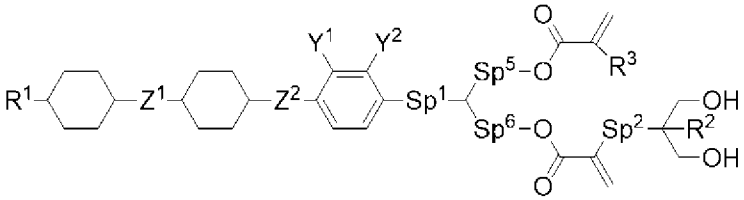
(1-18)



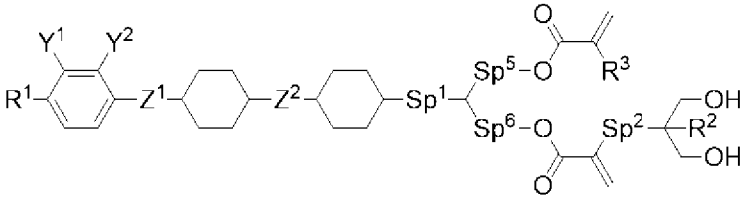
(1-19)



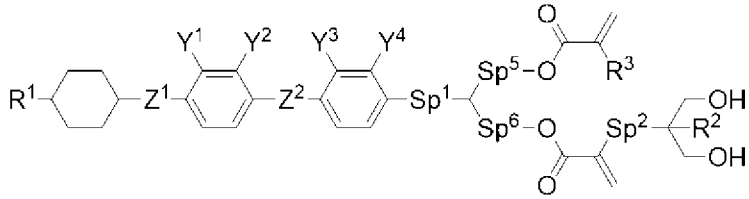
(1-20)



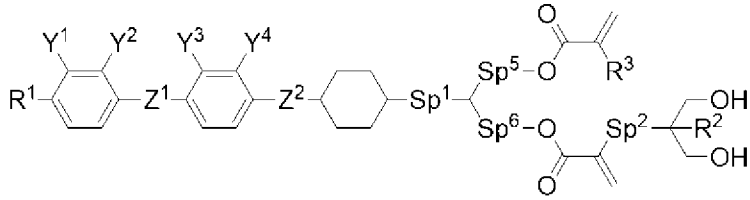
(1-21)



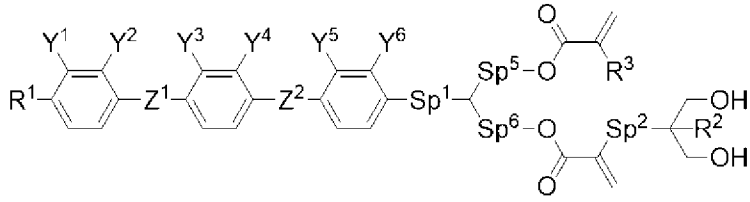
(1-22)



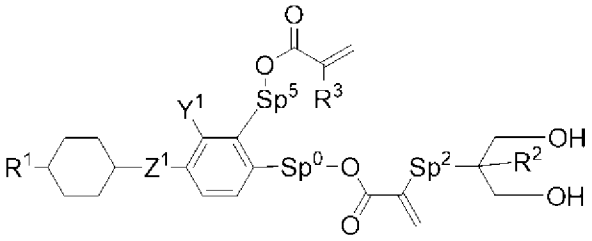
(1-23)



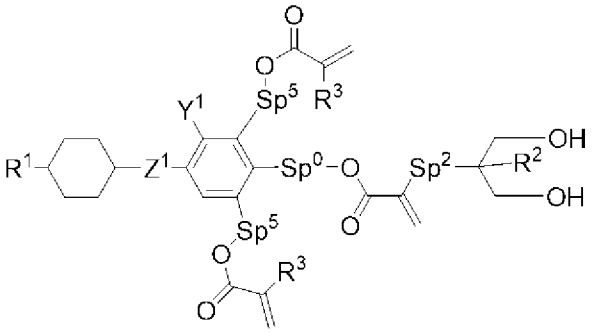
(1-24)



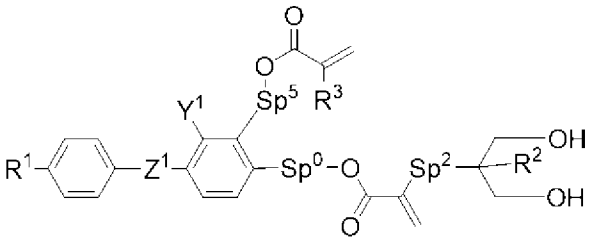
(1-25)



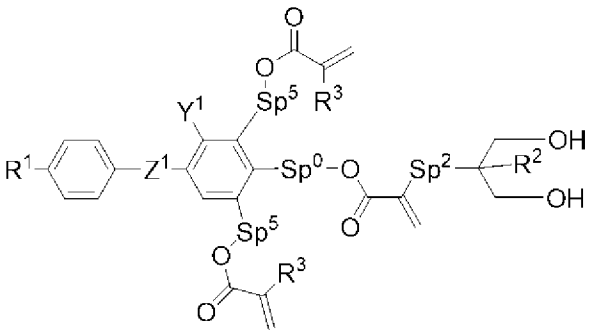
(1-26)



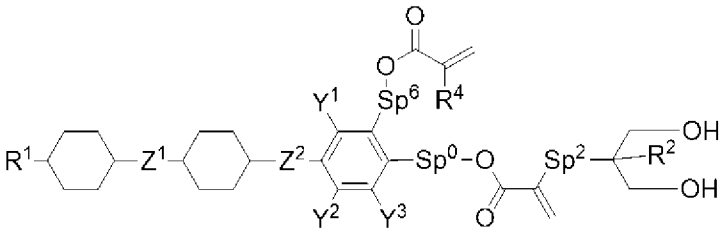
(1-27)



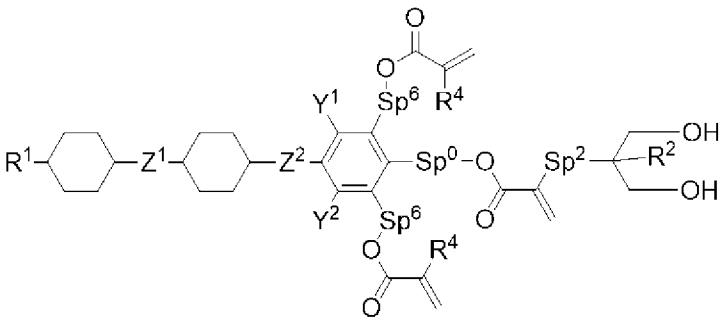
(1-28)



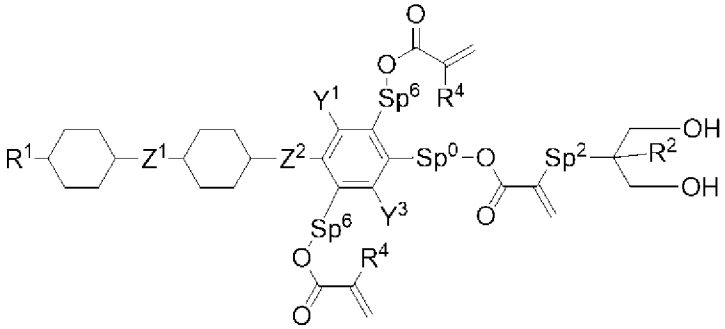
(1-29)



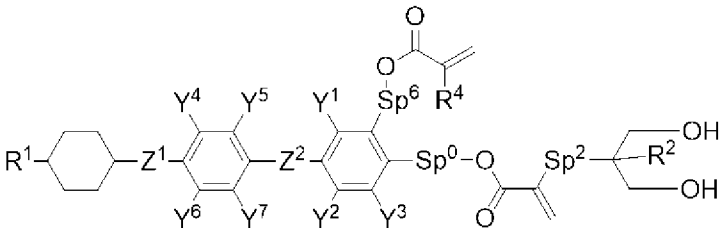
(1-30)



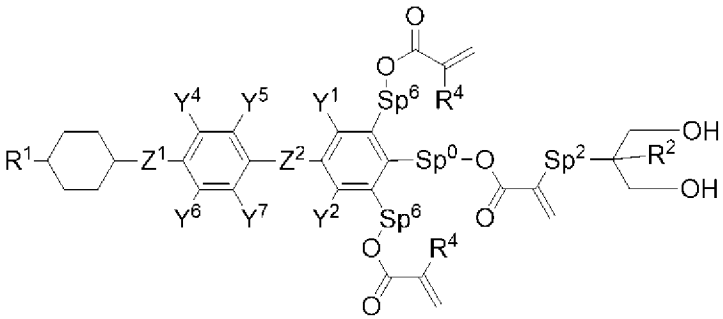
(1-31)



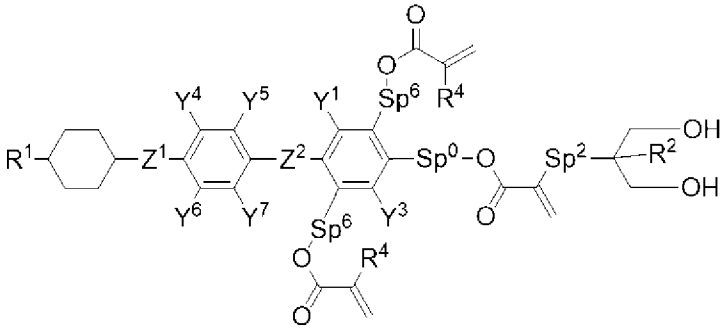
(1-32)



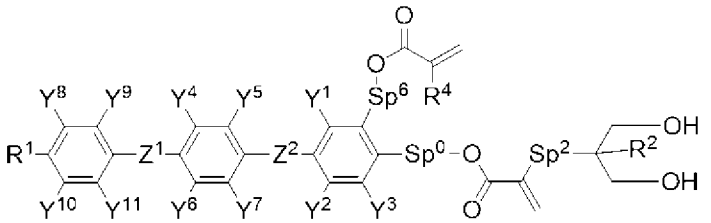
(1-33)



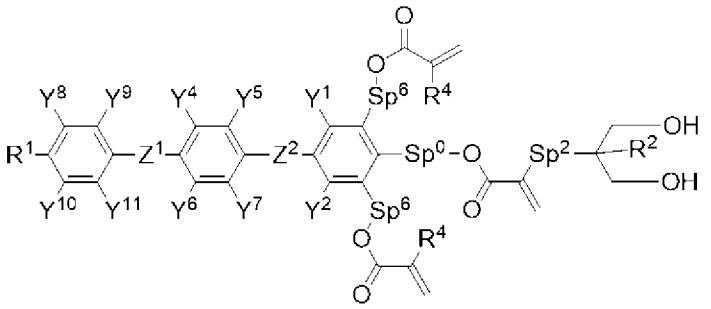
(1-34)



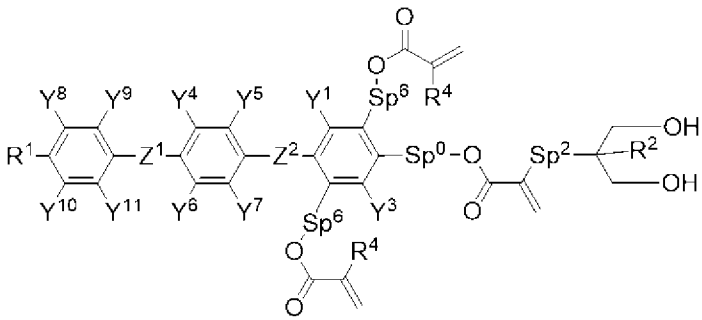
(1-35)



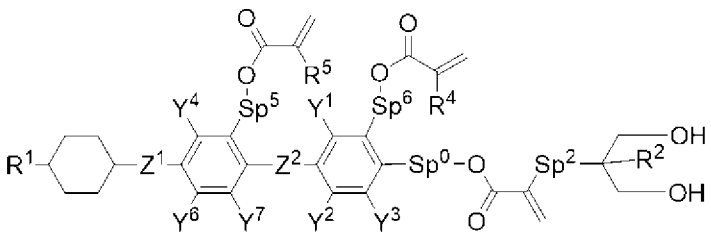
(1-36)



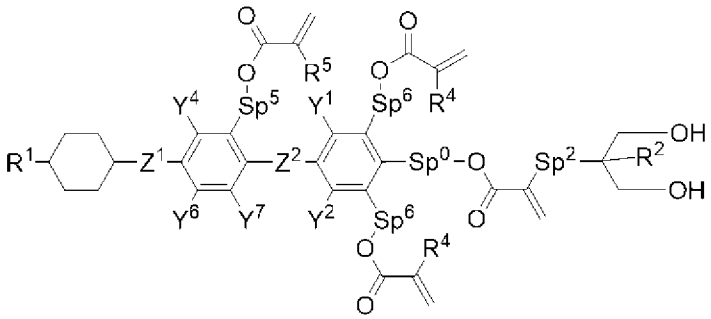
(1-37)



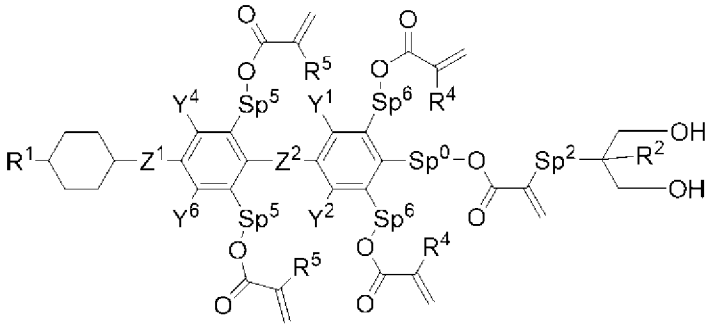
(1-38)



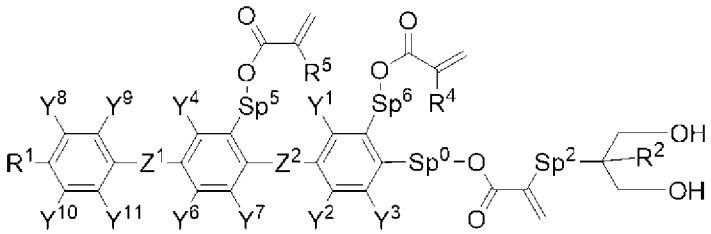
(1-39)



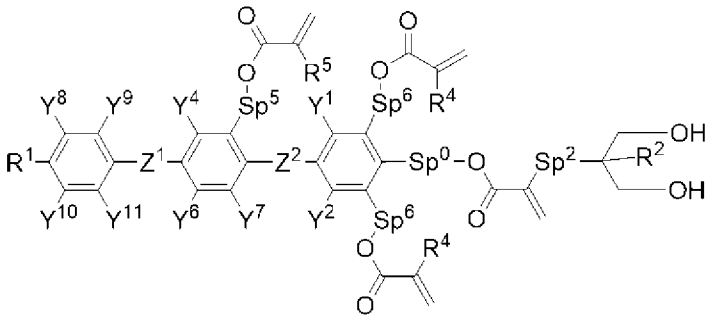
(1-40)



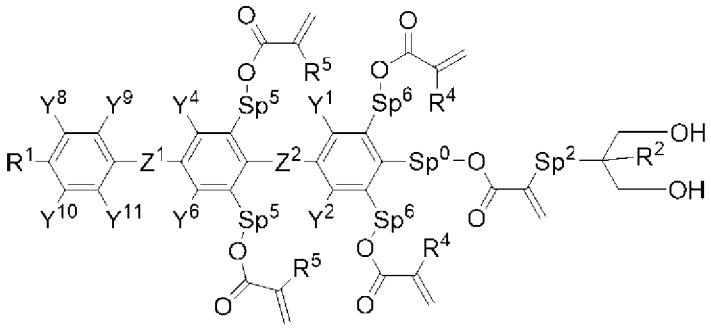
(1-41)



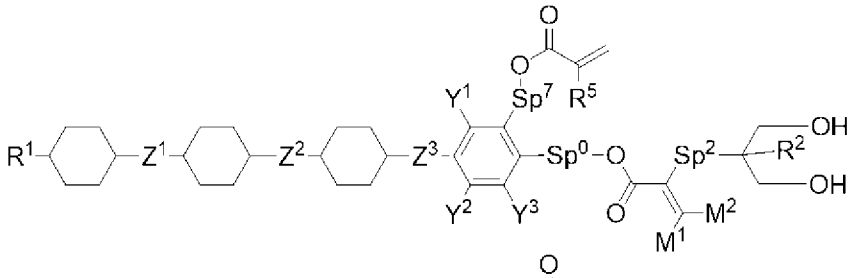
(1-42)



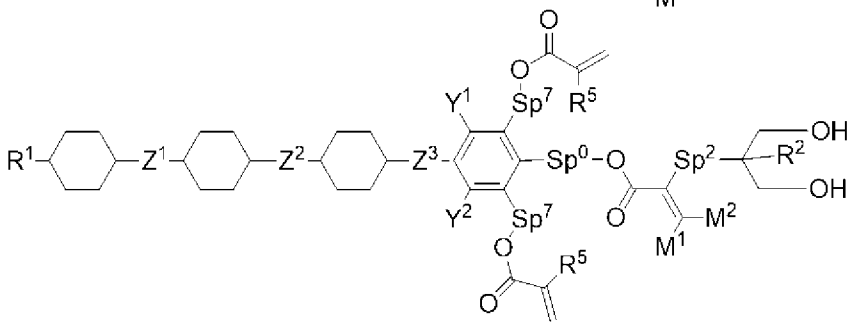
(1-43)



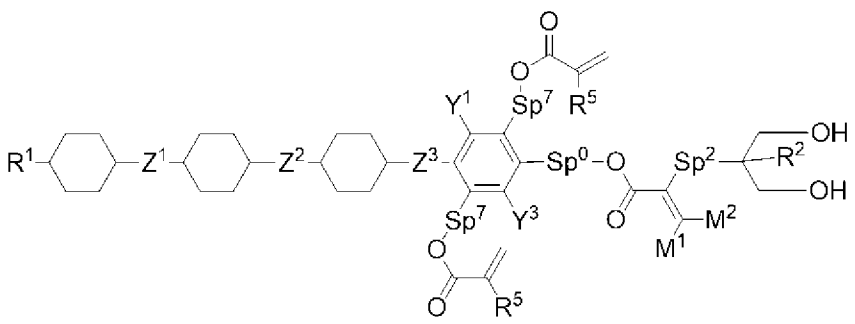
(1-44)



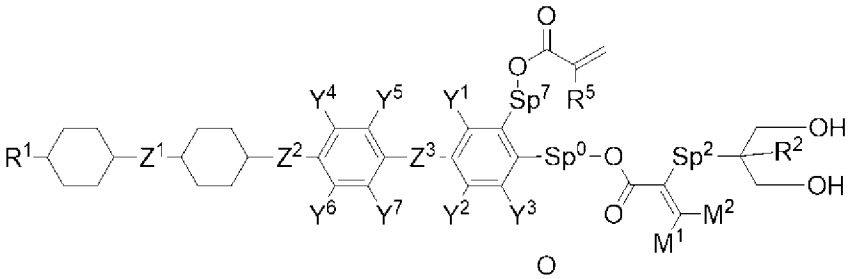
(1-45)



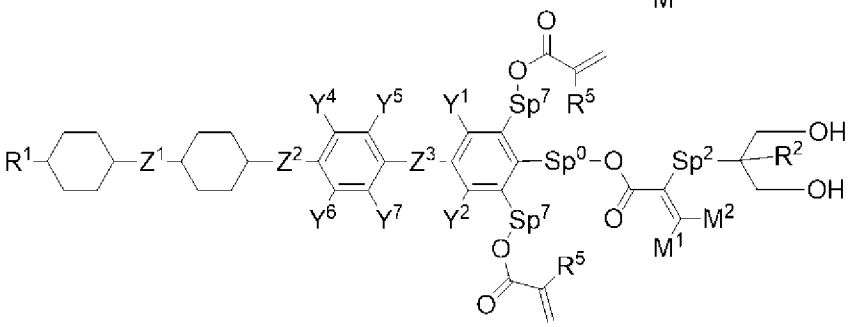
(1-46)



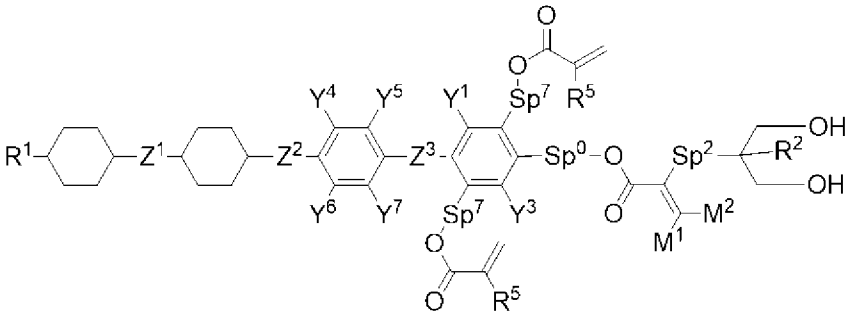
(1-47)



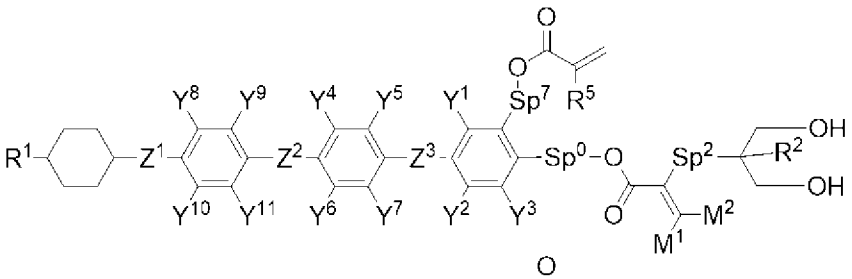
(1-48)



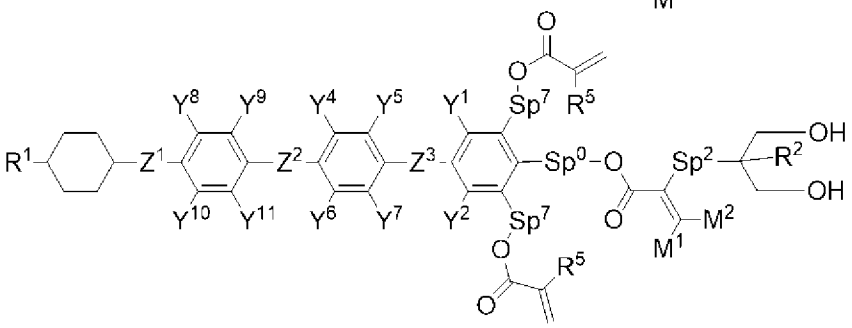
(1-49)



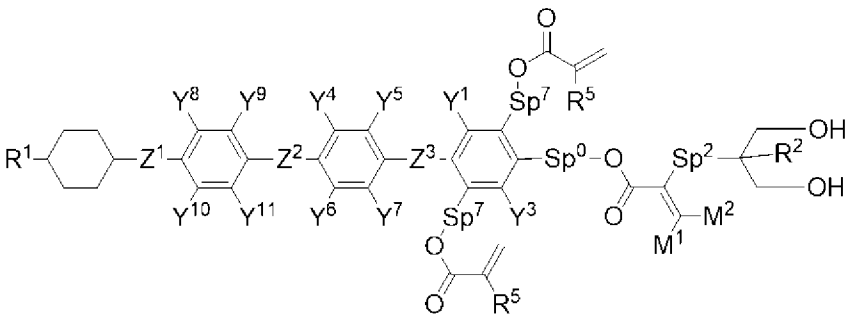
(1-50)



(1-51)



(1-52)



(1-53)

式（１－１７）から式（１－５３）において、

R^1は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

Z^1からZ^3は独立して、単結合または－（CH_2）$_2$－であり；

Sp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7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；

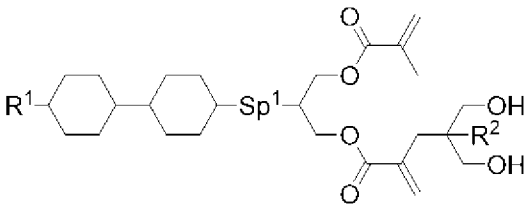
Y^1からY^{11}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシであり；

R^2は、炭素数１から１０のアルキル、または炭素数１から９のアルコキシであり；

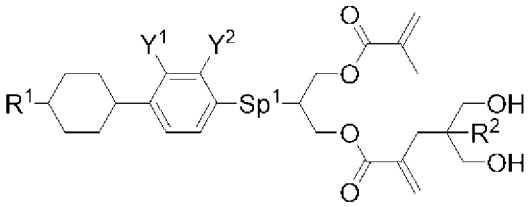
R^3、R^4、およびR^5は独立して、炭素数１から３のアルキルであり；

M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。

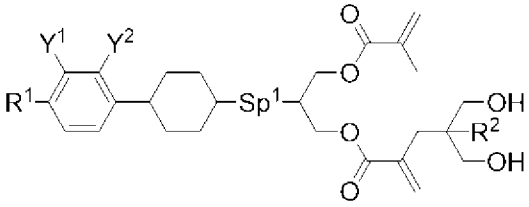
[請求項6] 式（１－５４）から式（１－８８）のいずれか１つで表される、請求項１から５のいずれか１項に記載の化合物。



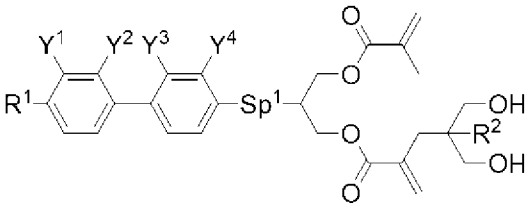
(1-54)



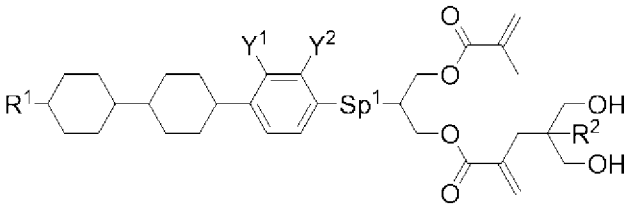
(1-55)



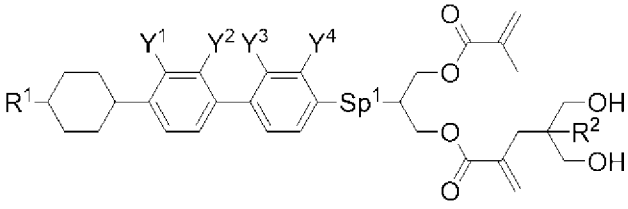
(1-56)



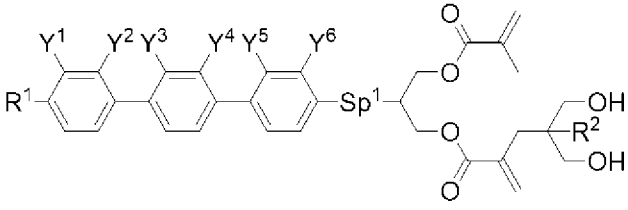
(1-57)



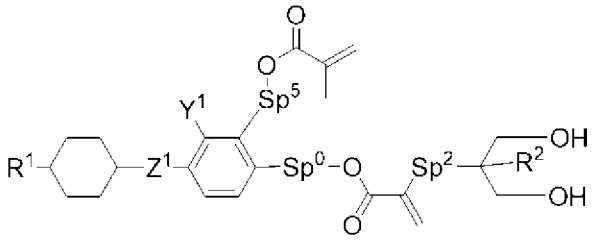
(1-58)



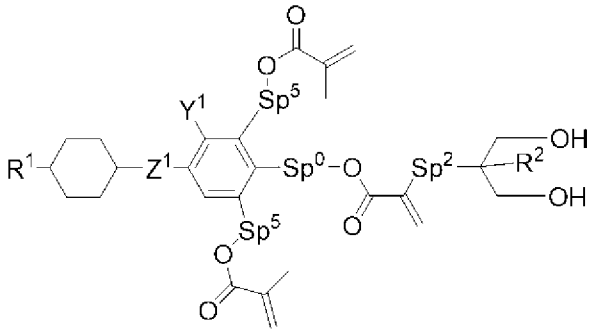
(1-59)



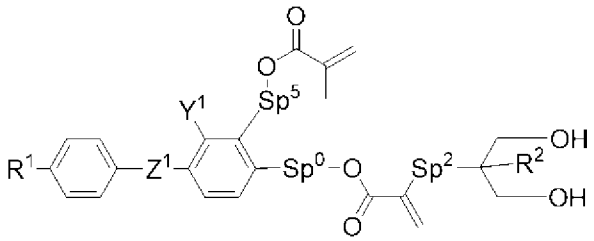
(1-60)



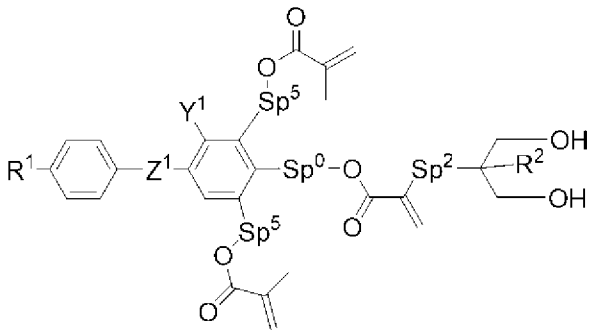
(1-61)



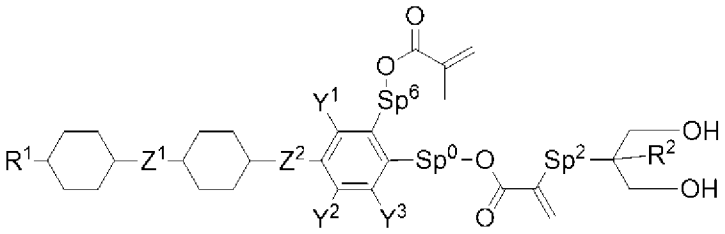
(1-62)



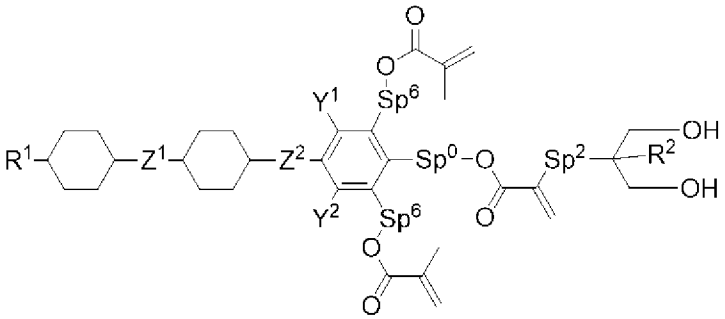
(1-63)



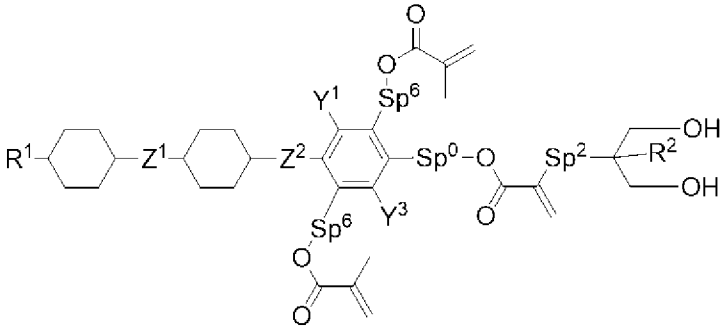
(1-64)



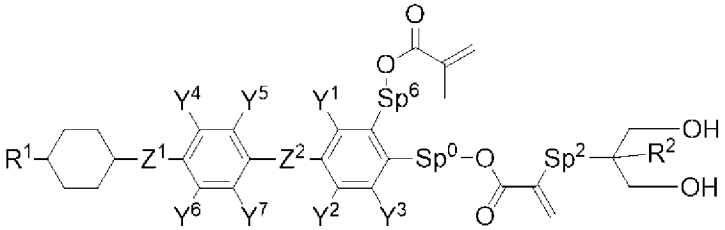
(1-65)



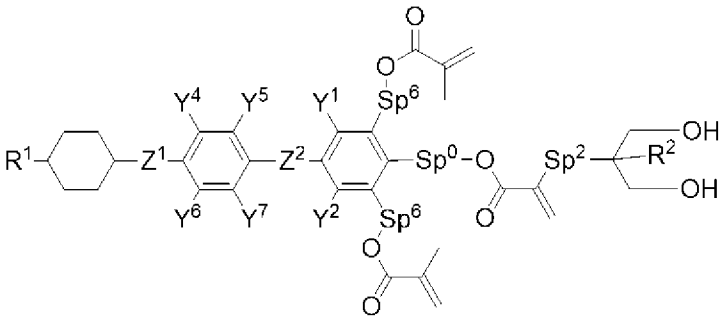
(1-66)



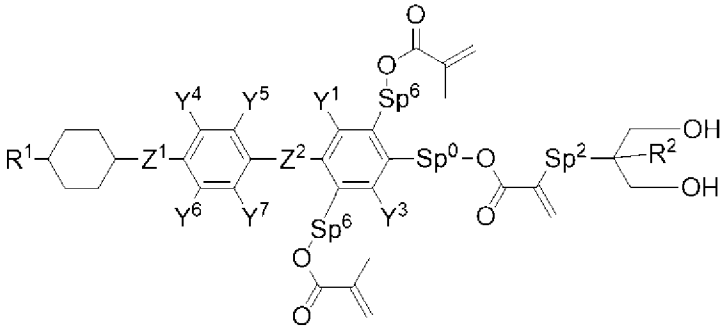
(1-67)



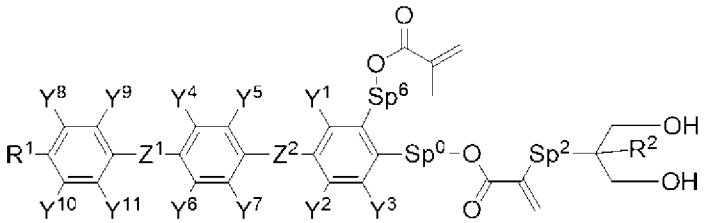
(1-68)



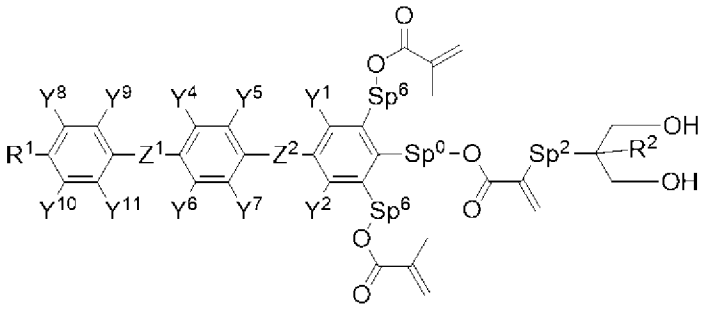
(1-69)



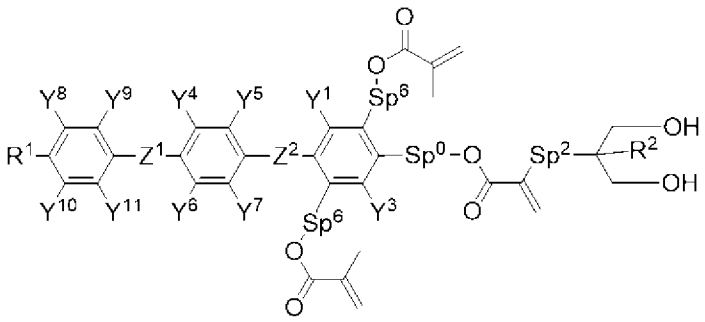
(1-70)



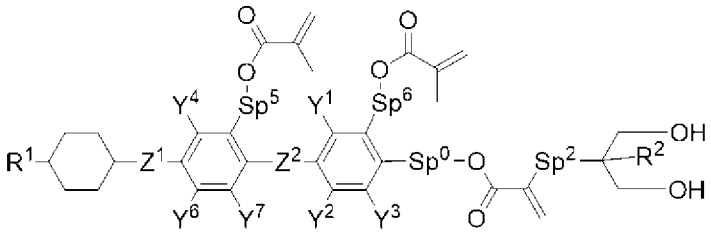
(1-71)



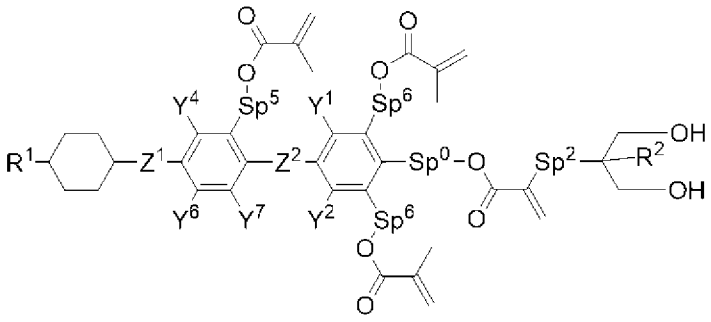
(1-72)



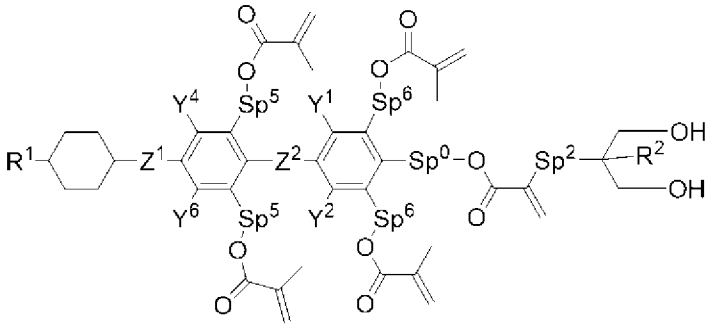
(1-73)



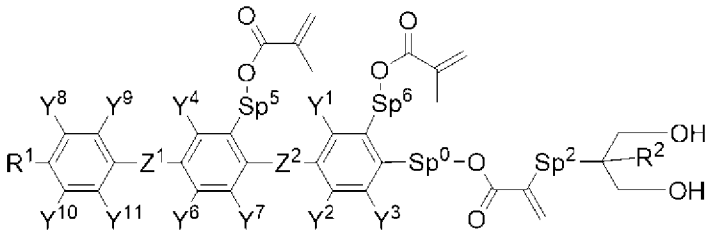
(1-74)



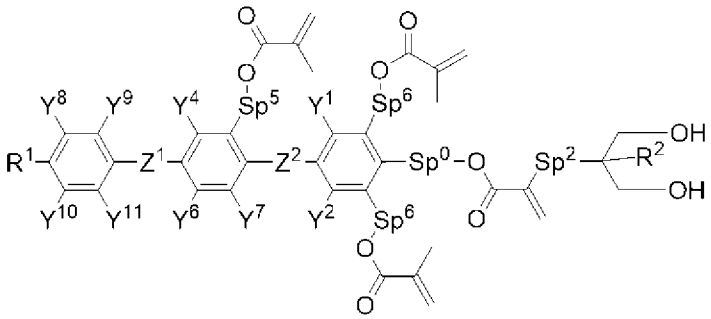
(1-75)



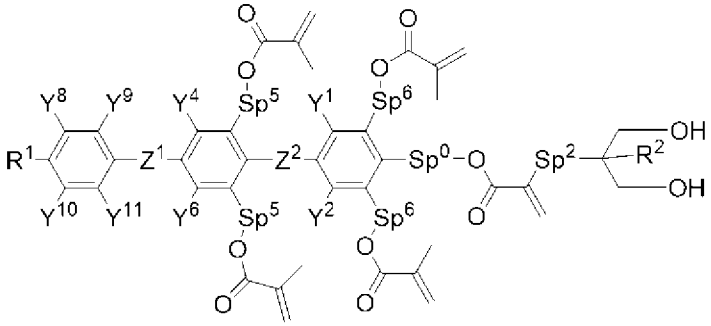
(1-76)



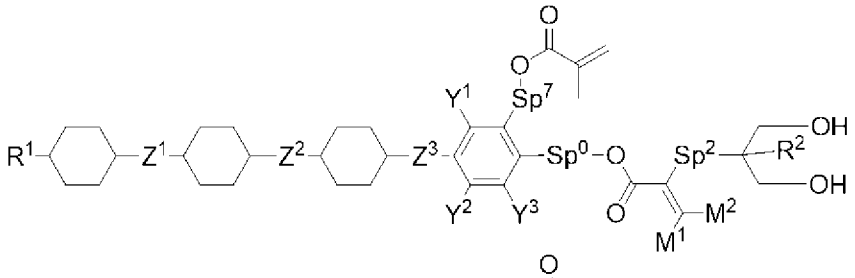
(1-77)



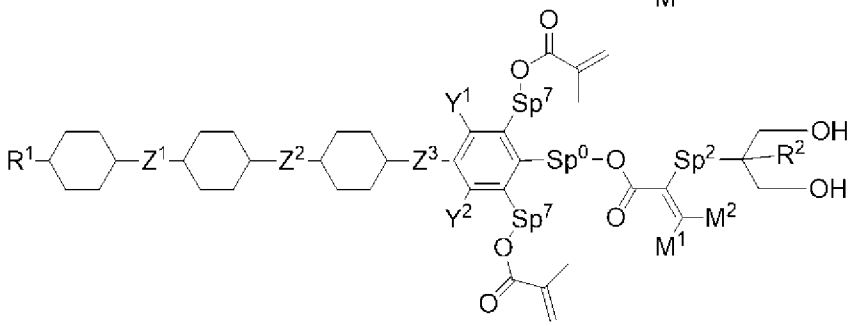
(1-78)



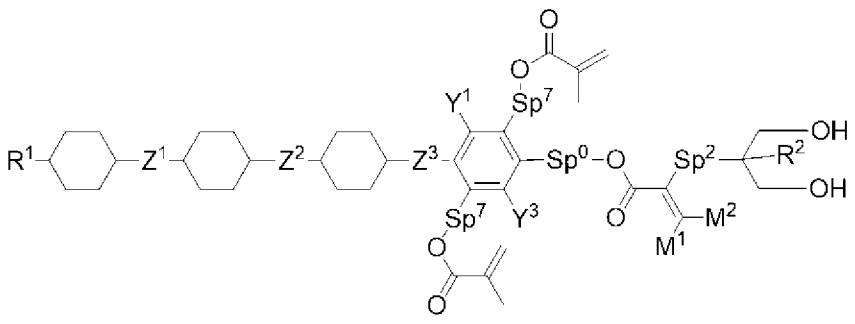
(1-79)



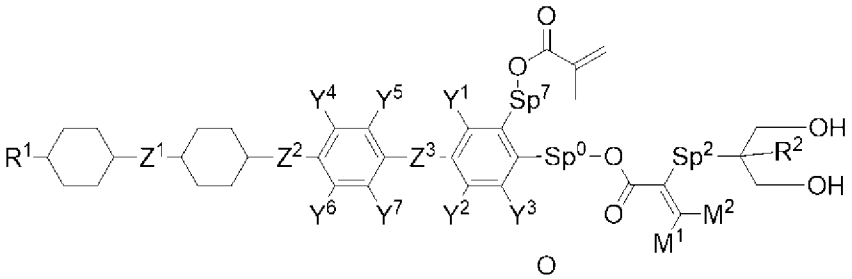
(1-80)



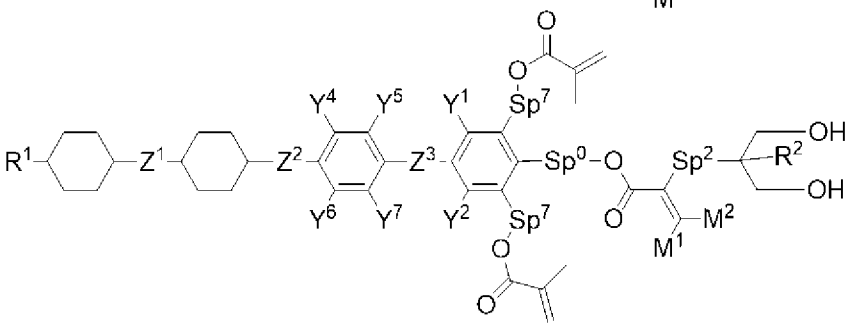
(1-81)



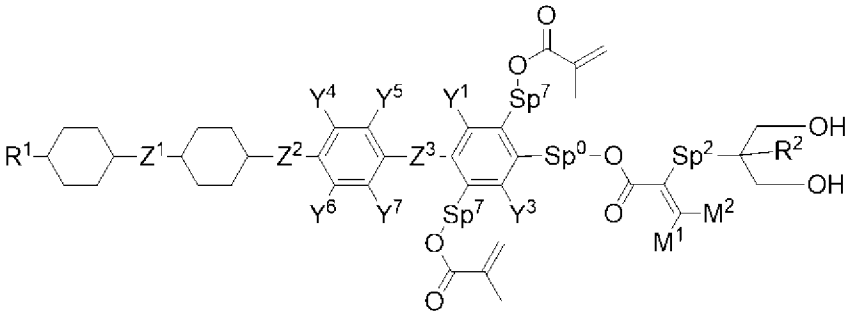
(1-82)



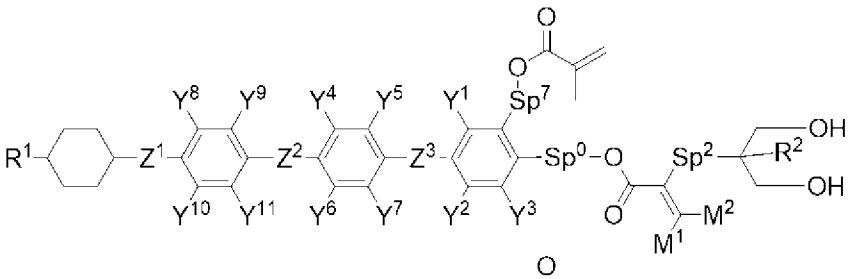
(1-83)



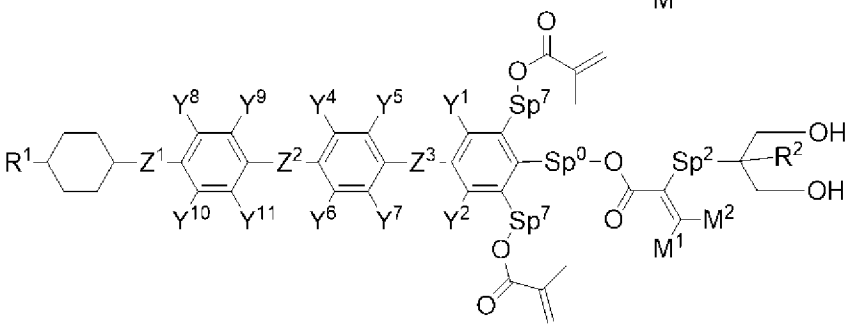
(1-84)



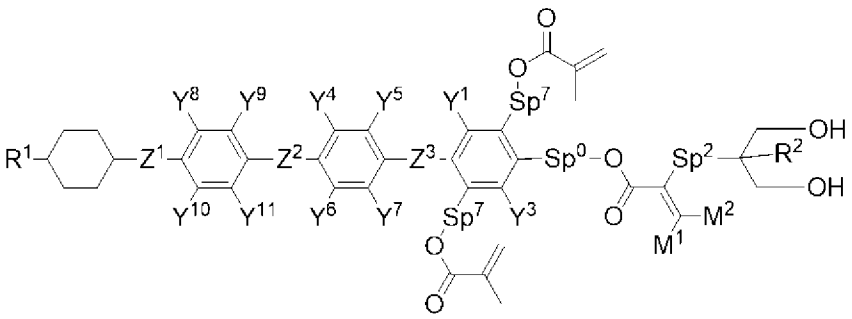
(1-85)



(1-86)



(1-87)



(1-88)

式（１－５４）から式（１－８８）において、

R^1は、炭素数１～１０のアルキルであり；

Z^1およびZ^2は独立して、単結合または－（CH_2）$_2$－であり；

Y^1からY^{11}は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり、

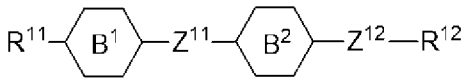
Sp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このSp^0、Sp^1、Sp^2、Sp^5、Sp^6、およびSp^7において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

R^2は、炭素数１～１０のアルキルである。

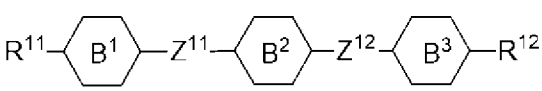
M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。

[請求項7] 請求項１から６のいずれか１項に記載の化合物の少なくとも１つを含有する液晶組成物。

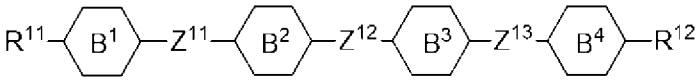
[請求項8] 式（２）から（４）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有する、請求項７に記載の液晶組成物。



(2)



(3)



(4)

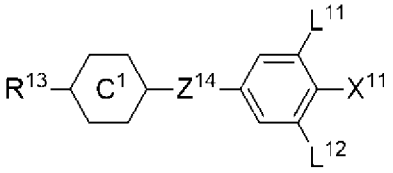
式（２）から（４）において、

R^{11}およびR^{12}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このR^{11}およびR^{12}において、少なくとも１つの－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；

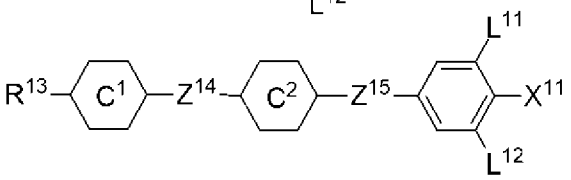
環Ｂ[1]、環Ｂ[2]、環Ｂ[3]、および環Ｂ[4]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２，５－ジフルオロ－１，４－フェニレン、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

Ｚ[11]、Ｚ[12]、およびＺ[13]は独立して、単結合、－ＣＯＯ－、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、または－Ｃ≡Ｃ－である。

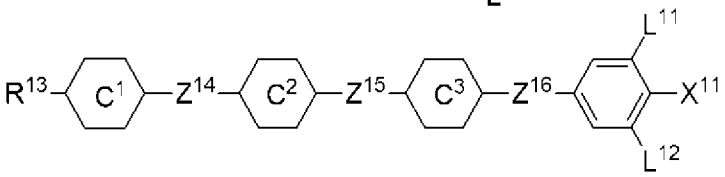
[請求項9] 式（５）から（７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有する、請求項７または８に記載の液晶組成物。



(5)



(6)



(7)

式（５）から（７）において、

Ｒ[13]は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から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$_2$Ｆ、－ＯＣＦ$_2$ＣＨＦ$_2$、または－ＯＣＦ$_2$ＣＨＦＣＦ$_3$であり；

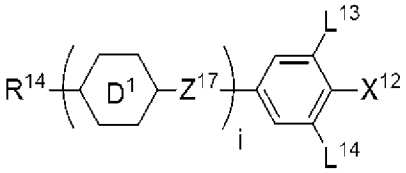
環Ｃ[1]、環Ｃ[2]、および環Ｃ[3]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェ

ニレンであり；

Z^{14}、Z^{15}、およびZ^{16}は独立して、単結合、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CH_2O－、－OCH_2－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2CH_2－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、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10] 式（８）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有する、請求項７から９のいずれか１項に記載の液晶組成物。



(8)

式（８）において、

R^{14}は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から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≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎであり；

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

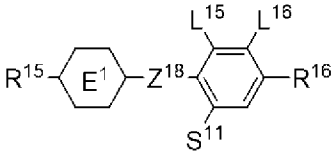
Z^{17}は、単結合、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CH_2O－、－OCH_2－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2CH_2－、または－Ｃ≡Ｃ－であり；

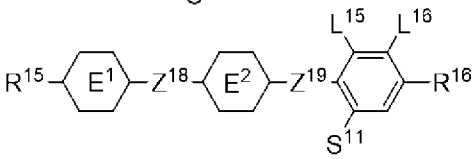
L^{13}およびL^{14}は独立して、水素またはフッ素であり；

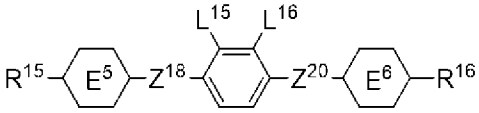
ｉは、１、２、３、または４である。

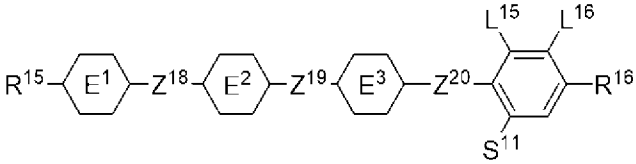
[請求項11] 式（１１）から（１９）で表される化合物の群から選択された少な

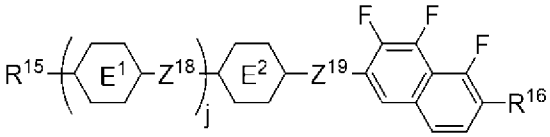
くとも１つの化合物を含有する、請求項７から１０のいずれか１項に記載の液晶組成物。

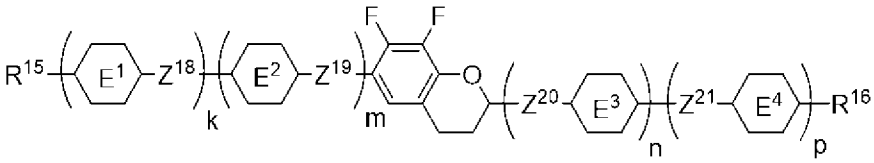

(11)

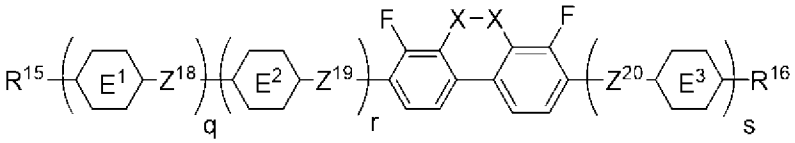

(12)

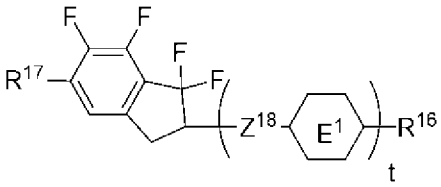

(13)

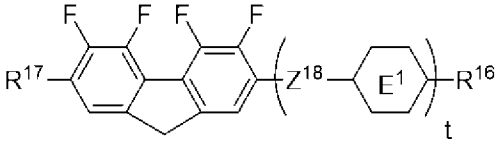

(14)


(15)


(16)


(17)


(18)


(19)

式（１１）から（１９）において、

Ｒ１５、Ｒ１６、およびＲ１７は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このＲ１５、Ｒ１６、

およびR^{17}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、そしてR^{17}は、水素またはフッ素であってもよく；

環E^1、環E^2、環E^3、および環E^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、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた１，４－フェニレンであり；

環E^5および環E^6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，テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、またはデカヒドロナフタレン－２，６－ジイルであり；

Z^{18}、Z^{19}、Z^{20}、およびZ^{21}は独立して、単結合、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CH_2O－、－OCH_2－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2CH_2－、－$CF_2OCH_2CH_2$－、または－$OCF_2CH_2CH_2$－であり；

L^{15}およびL^{16}は独立して、フッ素または塩素であり；

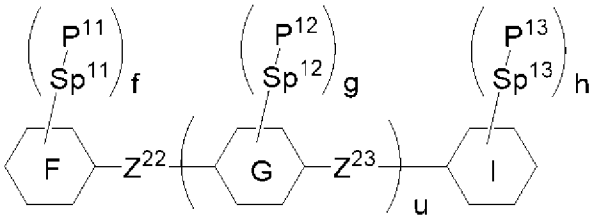
S^{11}は、水素またはメチルであり；

Ｘは、－ＣＨＦ－または－CF_2－であり；

ｊ、ｋ、ｍ、ｎ、ｐ、ｑ、ｒ、およびｓは独立して、０または１であり、ｋ、ｍ、ｎ、およびｐの和は、１または２であり、ｑ、ｒ、およびｓの和は、０、１、２、または３であり、

ｔは、１、２、または３である。

[請求項12] 式（１）で表される化合物以外の、式（２０）で表される少なくとも１つの重合性化合物を含有する、請求項７から１１のいずれか１項に記載の液晶組成物。



(20)

式（２０）において、

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、この環Ｆおよび環Ｉにおいて、少なくとも１つの水素は、ハロゲン、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から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から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、フェナントレン－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、この環Ｇにおいて、少なくとも１つの水素は、ハロゲン、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から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から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から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、－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$_2$ＣＨ$_2$－は、－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、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；

Ｐ^{11}、Ｐ^{12}、およびＰ^{13}は独立して、重合性基であり；

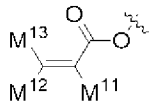
Ｓｐ^{11}、Ｓｐ^{12}、およびＳｐ^{13}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{11}、Ｓｐ^{12}、およびＳｐ^{13}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

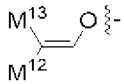
ｕは、０、１、または２であり；

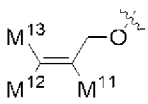
ｆ、ｇ、およびｈは独立して、０、１、２、３、または４であり、そしてｆ、ｇ、およびｈの和は、１以上である。

[請求項13] 式（２０）において、

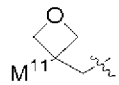
Ｐ^{11}、Ｐ^{12}、およびＰ^{13}が独立して、式（Ｐ－１）から式（Ｐ－５）で表される重合性基の群から選択された基である、請求項１２に記載の液晶組成物。


(P-1)


(P-2)


(P-3)


(P-4)

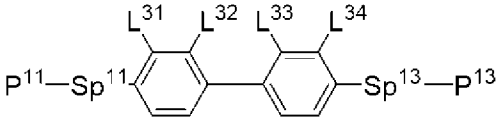

(P-5)

式（Ｐ－１）から式（Ｐ－５）において、

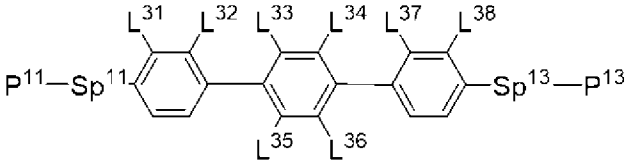
Ｍ^{11}、Ｍ^{12}、およびＭ^{13}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。

[請求項14] 式（２０）で表される重合性化合物が、式（２０－１）から式（２

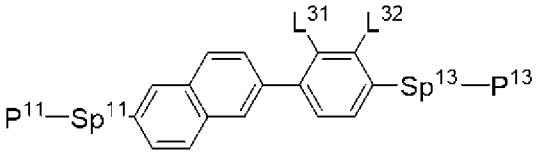
０－７）で表される重合性化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である、請求項１２または１３に記載の液晶組成物。



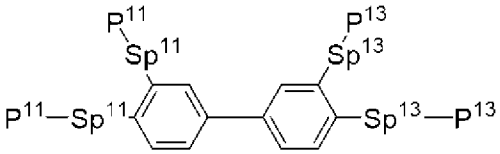
(20-1)



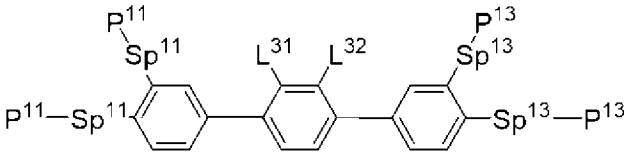
(20-2)



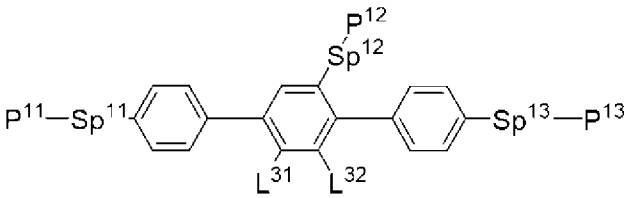
(20-3)



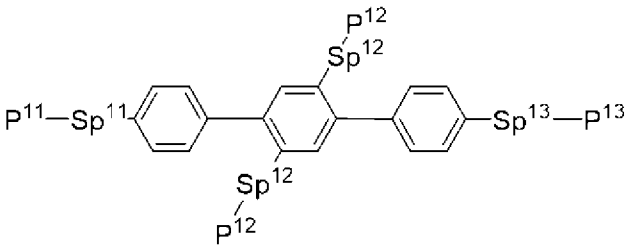
(20-4)



(20-5)



(20-6)



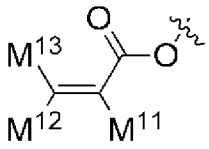
(20-7)

式（２０－１）から式（２０－７）において、

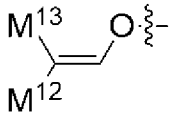
Ｌ^{31}、Ｌ^{32}、Ｌ^{33}、Ｌ^{34}、Ｌ^{35}、Ｌ^{36}、Ｌ^{37}、およびＬ^{38}は独立して、水素、フッ素、またはメチルであり；

Ｓｐ^{11}、Ｓｐ^{12}、およびＳｐ^{13}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{11}、Ｓｐ^{12}、およびＳｐ^{13}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－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$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

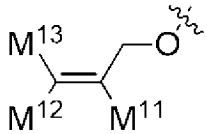
Ｐ^{11}、Ｐ^{12}、およびＰ^{13}は独立して、式（Ｐ－１）から式（Ｐ－３）で表される重合性基の群から選択された基であり、



(P-1)



(P-2)



(P-3)

式（Ｐ－１）から式（Ｐ－３）において、

Ｍ^{11}、Ｍ^{12}、およびＭ^{13}は独立して、水素、フッ素、炭素数１から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から５のアルキルである。

[請求項15] 式（１）または式（２０）で表される化合物とは異なる重合性化合物、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、色素、および消泡剤の群から選択された少なくとも１つを含有する、請求項７から１４のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[請求項16] 請求項７から１５のいずれか１項に記載の液晶組成物、および請求項７から１５のいずれか１項に記載の液晶組成物の少なくとも一部が

重合したものからなる群より選択された少なくとも１つを含有する液晶表示素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2019/039073

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
Int.Cl. 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)
Int.Cl. C07C69/732, C07C69/734, C07C229/30, C07C321/18, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/16, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/38, C09K19/54, C09K19/56, G02F1/13, G02F1/1337, G02F1/139

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

Published examined utility model applications of Japan	1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2019
Registered utility model specifications of Japan	1996-2019
Published registered utility model applications of Japan	1994-2019

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
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.
A	WO 2018/25974 A1 (JNC CORPORATION, JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) 08 February 2018, claims 1-14 & CN 109563409 A & TW 201816080 A	1-16
A	WO 2017/209161 A1 (JNC CORPORATION, JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) 07 December 2017, claim 1 & US 2019/0292463 A1 (claim 1) & EP 3466918 A1 & CN 109195943 A & KR 10-2019-0013786 A & TW 201742911 A	1-16

☒ 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 16 December 2019 (16.12.2019)	Date of mailing of the international search report 24 December 2019 (24.12.2019)
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/JP2019/039073

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2016/129490 A1 (JNC CORPORATION, JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) 18 August 2016, claim 1 & US 2017/0369418 A1 (claim 1) & EP 3257839 A1 & CN 107108457 A & KR 10-2017-0116006 A & TW 201638317 A	1-16
E,A	JP 2019-199461 A (JNC CORPORATION, JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) 21 November 2019, claims 1-17 (Family: none)	1-16

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2019/039073

CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07C69/732(2006.01)i, C07C69/734(2006.01)i, C07C229/30(2006.01)i, C07C321/18(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/16(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, C09K19/38(2006.01)i, C09K19/54(2006.01)i, C09K19/56(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i, G02F1/139(2006.01)i

It cannot be considered that a compound other than that X^1 is -OH among compounds represented by formula (1) of the invention in claim 1 is substantially set forth in the description, and thus a meaningful search cannot be carried out.

Therefore, the international search report was written limiting to a compound that X^1 is -OH among compounds represented by formula (1) of the invention in claim 1.

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１９／０３９０７３

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.　C07C69/732, C07C69/734, C07C229/30, C07C321/18, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/16, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/38, C09K19/54, C09K19/56, G02F1/13, G02F1/1337, G02F1/139

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	１９７１－２０１９年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１９年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１９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）

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
A	WO 2018/25974 A1 (ＪＮＣ株式会社、ＪＮＣ石油化学株式会社) 2018.02.08, 請求項１－１４ & CN 109563409 A & TW 201816080 A	1-16
A	WO 2017/209161 A1 (ＪＮＣ株式会社、ＪＮＣ石油化学株式会社) 2017.12.07, 請求項１ & US 2019/0292463 A1 (claim 1) & EP 3466918 A1 & CN 109195943 A & KR 10-2019-0013786 A & TW 201742911 A	1-16

☑　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	国際調査報告の発送日
１６．１２．２０１９	２４．１２．２０１９

国際調査機関の名称及びあて先
日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ）
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）　４Ｈ　３７７１
桜田　政美
電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３４４３

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 2016/129490 A1（ＪＮＣ株式会社、ＪＮＣ石油化学株式会社） 2016.08.18, 請求項１ & US 2017/0369418 A1 (claim 1) & EP 3257839 A1 & CN 107108457 A & KR 10-2017-0116006 A & TW 201638317 A	1-16
E, A	JP 2019-199461 A（ＪＮＣ株式会社、ＪＮＣ石油化学株式会社） 2019.11.21, 請求項１－１７ (ファミリーなし)	1-16

発明の属する分野の分類
C07C69/732(2006.01)i, C07C69/734(2006.01)i, C07C229/30(2006.01)i, C07C321/18(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/16(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, C09K19/38(2006.01)i, C09K19/54(2006.01)i, C09K19/56(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i, G02F1/139(2006.01)i

請求項１に係る発明の式（１）で表される化合物のうち、X^1が－ＯＨ以外のものである化合物については、明細書に実質的に記載されたものとはいえず、有意義な調査を行うことができない。

そのため、国際調査報告は、請求項１に係る発明の式（１）で表される化合物のうち、X^1が－ＯＨであるものに限定して作成した。