(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
2013 年 8 月 8 日(08.08.2013)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2013/114780 A1

(51) 国際特許分類:
C09K 19/42 (2006.01) *C09K 19/30* (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01) *C09K 19/34* (2006.01)
C09K 19/16 (2006.01) *G02F 1/13* (2006.01)
C09K 19/20 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2012/084032

(22) 国際出願日: 2012 年 12 月 28 日(28.12.2012)

(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 2012-021649 2012 年 2 月 3 日(03.02.2012) 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 CORPORATION) [JP/JP]; 〒1000004 東京都千代田区大手町二丁目２番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 柳井 孝仁(YANAI Takayoshi); 〒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). 服部 憲和(HATTORI Norikatsu); 〒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). 前田 健永(MAEDA Taketo); 〒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, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, 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, 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, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告（条約第 21 条(3)）

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

(54) 発明の名称 : 液晶化合物、液晶組成物および液晶表示素子

(57) **Abstract**: Provided is a liquid crystal composition, which satisfies at least one of such characteristics as high upper limit temperature of a nematic phase, low lower limit temperature of a nematic phase, low viscosity, adequate optical anisotropy, large dielectric anisotropy, high resistivity, high stability with respect to ultraviolet light and high stability with respect to heat, or which has an adequate balance among at least two of the above-mentioned characteristics. Also provided is an AM element which has a short response time, high voltage holding ratio, high contrast ratio, long service life and the like. This liquid crystal composition has a nematic phase, and contains a specific compound that has a large dielectric anisotropy as a first component and a specific compound that has a low viscosity as a second component. This liquid crystal composition may also contain a specific compound that has a high upper limit temperature or a large dielectric anisotropy as a third component. The liquid crystal display element contains this composition.

(57) 要約: ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、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などの特性において、少なくとも１つの特性を充足する、または少なくとも２つの特性に関して適切なバランスを有する液晶組成物を提供する。短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などを有するＡＭ素子を提供する。 第一成分として大きな誘電率異方性を有する特定の化合物、および第二成分として小さな粘度を有する特定の化合物を含有し、第三成分として高い上限温度または大きな誘電率異方性を有する特定の化合物を含有してもよく、そしてネマチック相を有する液晶組成物、およびこの組成物を含有する液晶表示素子である。

WO 2013/114780 A1

明　細　書

発明の名称 ： 液晶化合物、液晶組成物および液晶表示素子

技術分野

[0001] 本発明は、主としてＡＭ（active matrix）素子などに適する液晶組成物およびこの組成物を含有するＡＭ素子などに関する。特に、誘電率異方性が正の液晶組成物に関し、この組成物を含有するＴＮ（twisted nematic）モード、ＯＣＢ（optically compensated bend）モード、ＩＰＳ（in-plane switching）モード、ＦＦＳ（Fringe Field Switching）、またはＰＳＡ（polymer sustained alignment）モードの素子などに関する。

背景技術

[0002] 液晶表示素子において、液晶の動作モードに基づいた分類は、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）、ＰＳＡ（polymer sustained alignment）モードなどである。素子の駆動方式に基づいた分類は、ＰＭ（passive matrix）とＡＭ（active matrix）である。ＰＭはスタティック（static）とマルチプレックス（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。ＴＦＴの分類は非晶質シリコン（amorphous silicon）および多結晶シリコン（polycrystal silicon）である。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は、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である。

[0003] これらの素子は適切な特性を有する液晶組成物を含有する。この液晶組成物はネマチック相を有する。良好な一般的特性を有するＡＭ素子を得るには組成物の一般的特性を向上させる。２つの一般的特性における関連を下記の

表１にまとめる。組成物の一般的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。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。したがって、組成物における小さな粘度が好ましい。低い温度における小さな粘度はより好ましい。組成物の弾性定数は素子のコントラストに関連する。素子においてコントラストを上げるためには、組成物における大きな弾性定数がより好ましい。

[0004]

表1. 組成物とAM素子における一般的特性

No	組成物の一般的特性	AM素子の一般的特性
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	コントラルト比が大きい、応答時間が短い

1）液晶セルに組成物を注入する時間が短縮できる

[0005] 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。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。ＴＮのようなモードの素子では、適切な値は約０．４５μｍである。この場合、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。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、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、大きな電圧保持率に寄与し、素子における大きなコントラスト比に寄与する。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。長時間使用したあと、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、液晶表示素子の寿命に関連する。これらの安定性が高いとき、この素子の寿命は長い。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。

[0006] ＴＮモードを有するＡＭ素子においては正の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。一方、ＶＡモードを有するＡＭ素子においては負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。ＩＰＳモードまたはＦＦＳモードを有するＡＭ素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。ＰＳＡモードを有するＡＭ素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。正の誘電率異方性を有する液晶組成物の例は次の特許文献に開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0007] 特許文献1：特表２００７－５０３４８７号公報

[0008] 望ましいＡＭ素子は、使用できる温度範囲が広い、応答時間が短い、コントラスト比が大きい、しきい値電圧が低い、電圧保持率が大きい、寿命が長い、などの特性を有する。１ミリ秒でもより短い応答時間が望ましい。したがって、組成物の望ましい特性は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、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である。

発明の概要

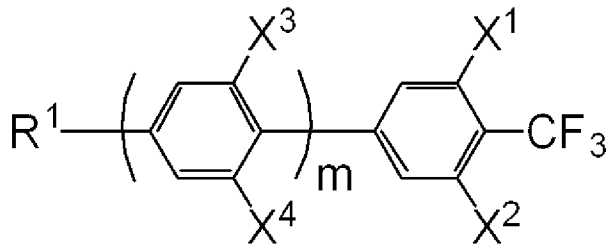
発明が解決しようとする課題

[0009] 本発明の１つの目的は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、大きな誘電率異方性、大きな

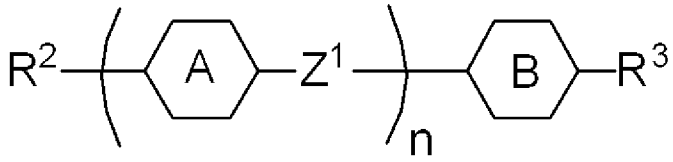
比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数などの特性において、少なくとも１つの特性を充足する液晶組成物である。他の目的は、少なくとも２つの特性に関して適切なバランスを有する液晶組成物である。別の目的は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。別の目的は、適切な光学異方性、大きな誘電率異方性、紫外線に対する高い安定性、大きな弾性定数などを有する組成物であり、そして短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するＡＭ素子である。

課題を解決するための手段

[0010] 第一成分として式（１）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、および第二成分として式（２）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有し、そしてネマチック相を有する液晶組成物、およびこの組成物を含有する液晶表示素子である。



(1)



(2)

ここで、Ｒ[1]は、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、または炭素数２から１２のアルケニルであり、Ｒ[2]およびＲ[3]は独立して、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、炭素数２から１２のアルケニル、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２から１２のアルケニルであり；環Ａおよび環Ｂ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、３－フルオロ－１，４－フェニレン、または２，５－ジフルオロ

ー１，４ーフェニレンであり；Z^1は独立して、単結合、エチレン、またはカルボニルオキシであり；X^1、X^2、X^3、およびX^4は独立して、水素またはフッ素であり；ｍおよびｎは独立して、１、２、または３である。

発明の効果

[0011] 本発明の長所は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、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などの特性において、少なくとも１つの特性を充足する液晶組成物である。本発明の１つの側面は、少なくとも２つの特性に関して適切なバランスを有する液晶組成物である。別の側面は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。他の側面は、適切な光学異方性、大きな誘電率異方性、紫外線に対する高い安定性などの特性を有する組成物であり、そして短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するＡＭ素子である。

発明を実施するための形態

[0012] この明細書における用語の使い方は次のとおりである。本発明の液晶組成物または本発明の液晶表示素子をそれぞれ「組成物」または「素子」と略すことがある。液晶表示素子は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。「液晶性化合物」は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物または液晶相を有さないが組成物の成分として有用な化合物を意味する。この有用な化合物は例えば１，４ーシクロヘキシレンや１，４ーフェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状（rod like）である。光学活性な化合物または重合可能な化合物は組成物に添加されることがある。これらの化合物が液晶性化合物であったとしても、ここでは添加物として分類される。式（１）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「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つの化合物または２つ以上の化合物を意味する。他の式で表される化合物についても同様である。「置き換えられた」に関する「少なくとも１つの」は、位置だけでなく、その個数についても制限なく選

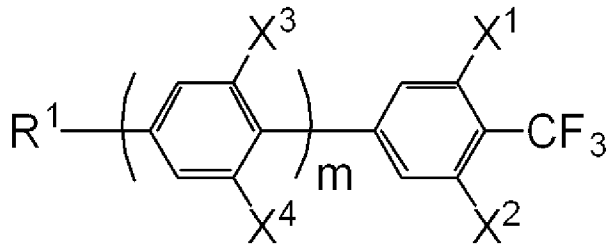
択してよいことを意味する。

[0013] ネマチック相の上限温度を「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。「比抵抗が大きい」は、組成物が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し、そして長時間使用したあと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ことを意味する。「電圧保持率が大きい」は、素子が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電圧保持率を有し、そして長時間使用したあと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電圧保持率を有することを意味する。光学異方性などの特性を説明するときは、実施例に記載した測定方法で得られた値を用いる。第一成分は、１つの化合物または２つ以上の化合物である。「第一成分の割合」は、液晶組成物の全重量に基づいた第一成分の重量百分率（重量%）で表す。第二成分の割合などにおいても同様である。組成物に混合される添加物の割合は、液晶組成物の全重量に基づいた重量百分率（重量%）または重量百万分率（ｐｐｍ）で表す。

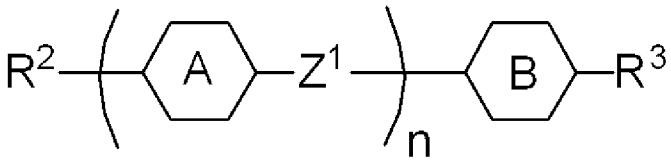
[0014] 成分化合物の化学式において、R^1の記号を複数の化合物に用いた。これらの任意の２つの化合物において、R^1で選択されるものは同じであっても、異なってもよい。例えば、化合物（１）のR^1がエチルであり、化合物（１－１）のR^1がエチルであるケースがある。化合物（１）のR^1がエチルであり、化合物（１－１）のR^1がプロピルであるケースもある。このルールは、R^2、X^5、Y^1などにも適用される。

[0015] 本発明は、下記の項などである。

[0016] １． 第一成分として式（１）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、および第二成分として式（２）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有し、そしてネマチック相を有する液晶組成物。



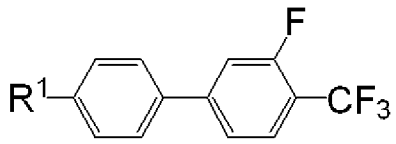
(1)

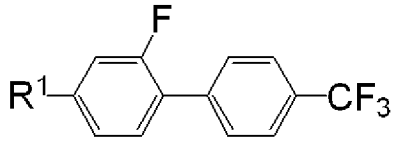


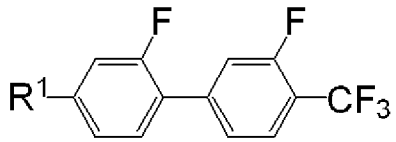
(2)

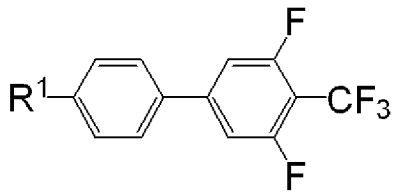
ここで、Ｒ[1]は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルであり、Ｒ[2]およびＲ[3]は独立して、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、炭素数２から１２のアルケニル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２から１２のアルケニルであり；環Ａおよび環Ｂは独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、３－フルオロ－１，４－フェニレン、または２，５－ジフルオロ－１，４－フェニレンであり；Ｚ[1]は独立して、単結合、エチレン、またはカルボニルオキシであり；Ｘ[1]、Ｘ[2]、Ｘ[3]、およびＸ[4]は独立して、水素またはフッ素であり；ｍおよびｎは独立して、１、２、または３である。

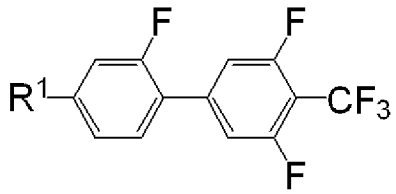
[0017] ２．　第一成分が式（１－１）から式（１－１９）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１に記載の液晶組成物。

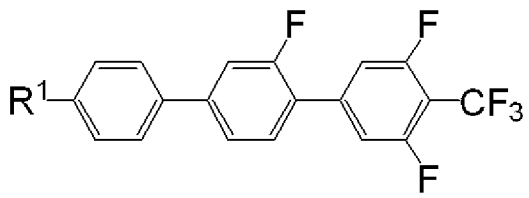

(1-1)

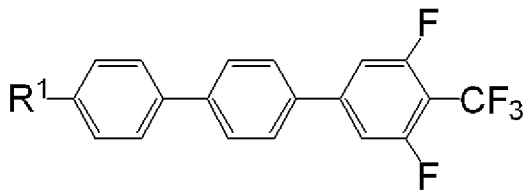

(1-2)

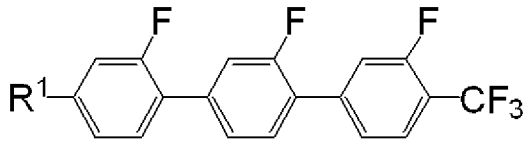

(1-3)

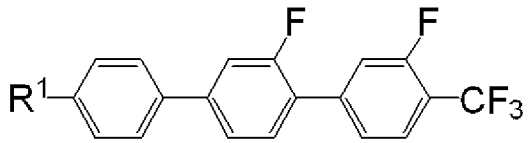

(1-4)

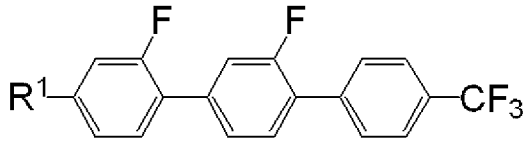

(1-5)

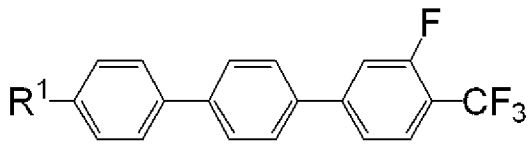

(1-6)

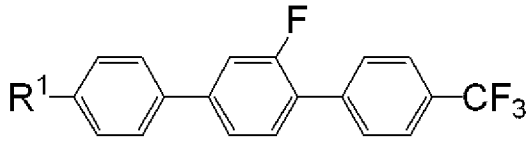

(1-7)

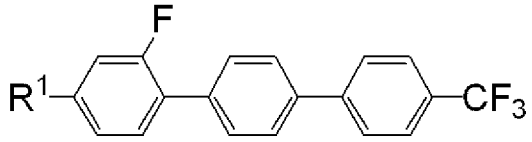

(1-8)

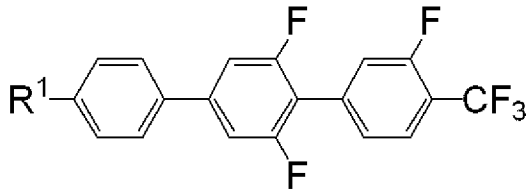

(1-9)

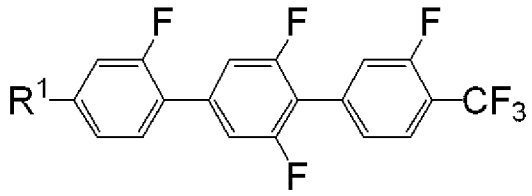

(1-10)

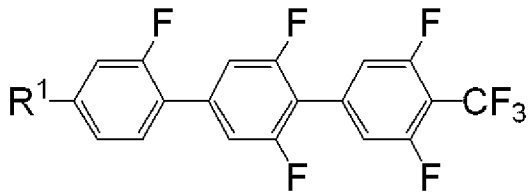

(1-11)

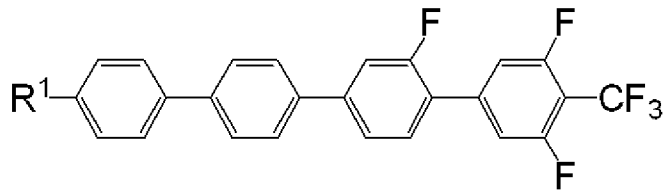

(1-12)

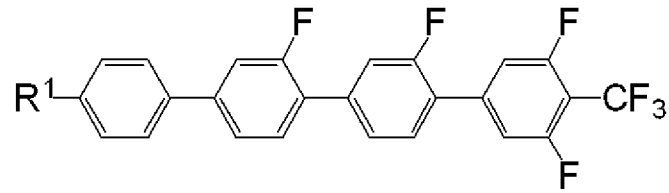

(1-13)

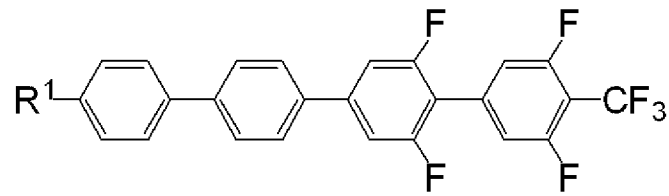

(1-14)


(1-15)


(1-16)


(1-17)


(1-18)


(1-19)

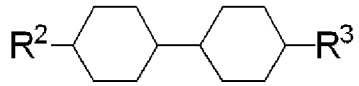
ここで、R^1は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキ

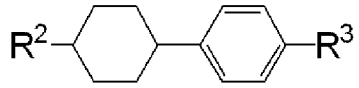
シ、または炭素数２から１２のアルケニルである。

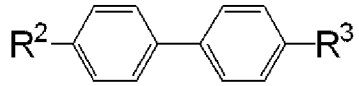
[0018] ３．　第一成分が項２に記載の式（１－１）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１に記載の液晶組成物。

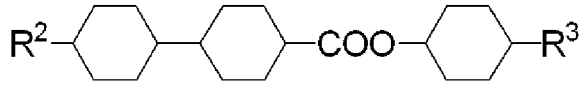
[0019] ４．　第一成分が項２に記載の式（１－１７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１に記載の液晶組成物。

[0020] ５．　第二成分が式（２－１）から式（２－１３）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１から４のいずれか１項に記載の液晶組成物。

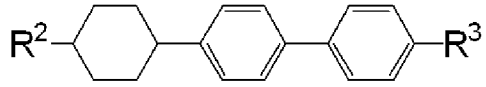

(2-1)

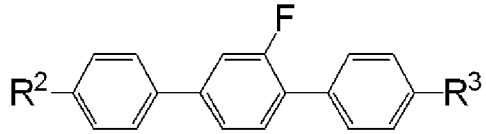

(2-2)

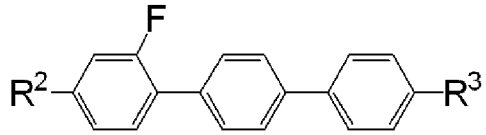

(2-3)

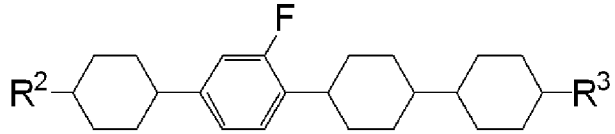

(2-4)

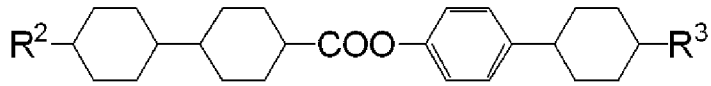

(2-5)

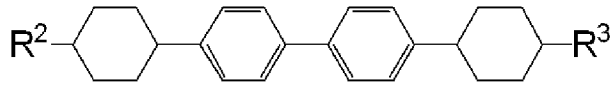

(2-6)

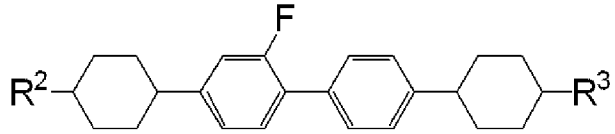

(2-7)

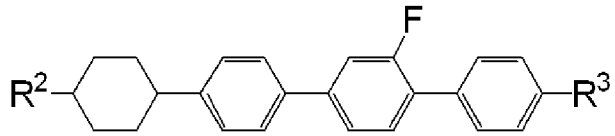

(2-8)


(2-9)


(2-10)


(2-11)


(2-12)


(2-13)

ここで、R^2およびR^3は独立して、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、炭素数２から１２のアルケニル、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２から１２のアルケニルである。

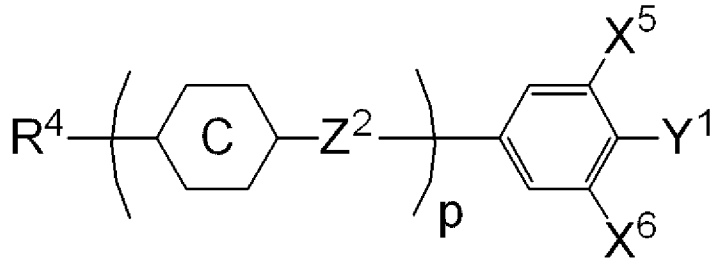
[0021] ６．　第二成分が項５に記載の式（２－１）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１に記載の液晶組成物。

[0022] ７．　第二成分が項５に記載の式（２－１３）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１に記載の液晶組成物。

[0023] ８．　第二成分が、項５に記載の式（２－１）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、および項５に記載の式（２－７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物の混合物である項１に記載の液晶組成物。

[0024] ９．　液晶組成物の全重量に基づいて、第一成分の割合が３重量％から２５重量％の範囲であり、第二成分の割合が２５重量％から９７重量％の範囲である項１から８のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[0025] １０．　第三成分として式（３）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物をさらに含有する項１から９のいずれか１項に記載の液晶組成物。

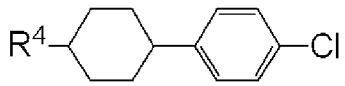


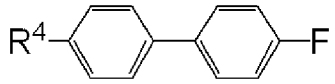
(3)

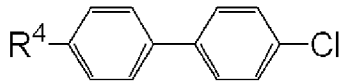
ここで、R^4は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルであり；環Ｃは、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、３－フルオロ－１，４－フェニレン、３，５－ジフルオロ－１，４－フェニレン、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－

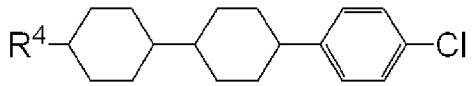
ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；Z^2は、単結合、ジフルオロメチレンオキシ、エチレン、またはカルボニルオキシであり；X^5およびX^6は独立して、水素またはフッ素であり；Y^1は、フッ素、塩素、またはトリフルオロメトキシであり；ｐは、１、２、３、または４である。

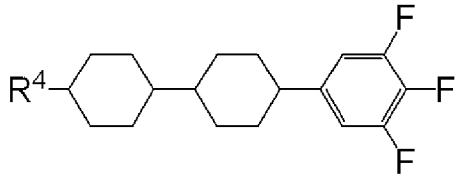
[0026] １１．　第三成分が式（３－１）から式（３－２４）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項９に記載の液晶組成物。

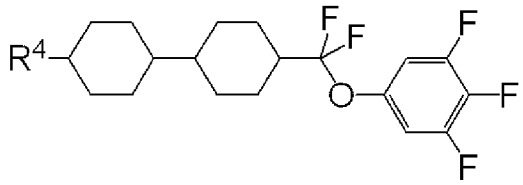

(3-1)

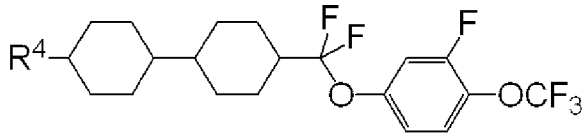

(3-2)

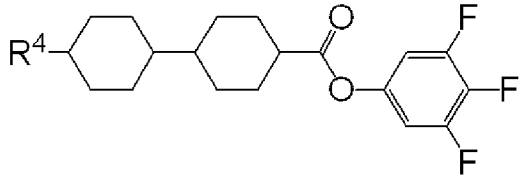

(3-3)

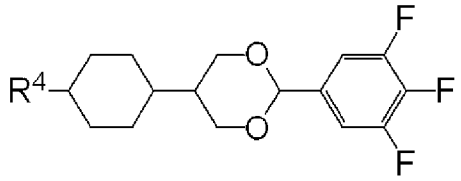

(3-4)

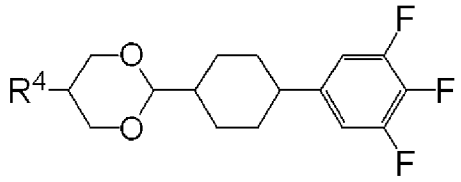

(3-5)

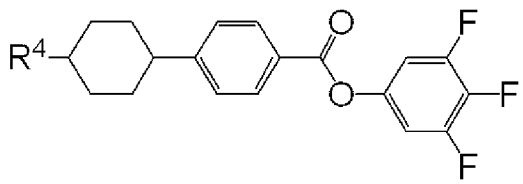

(3-6)

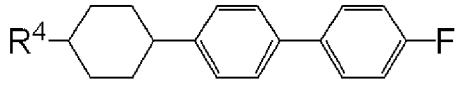

(3-7)

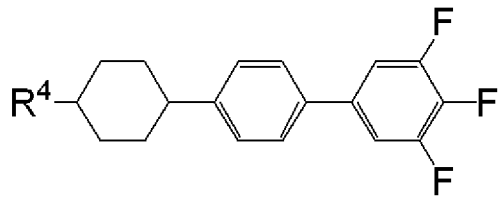

(3-8)

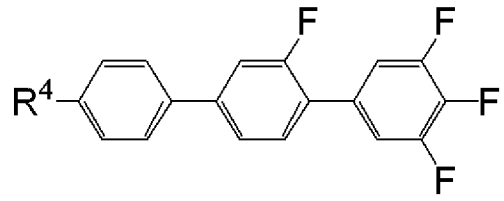

(3-9)

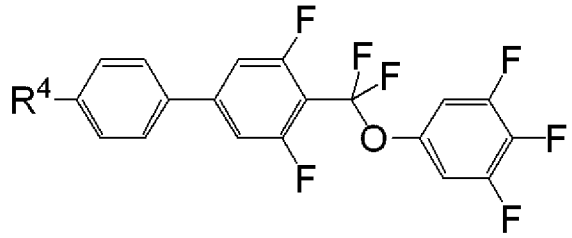

(3-10)

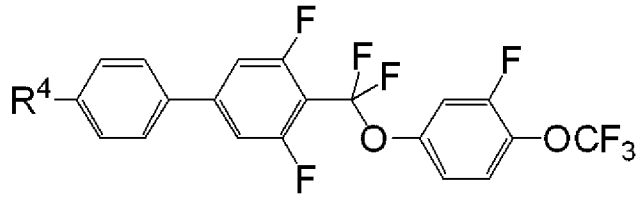

(3-11)

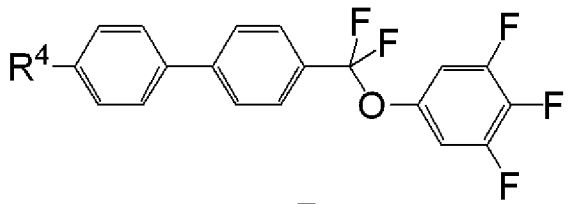

(3-12)

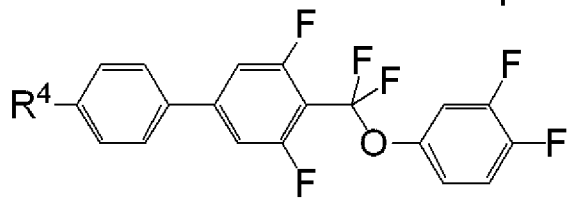

(3-13)

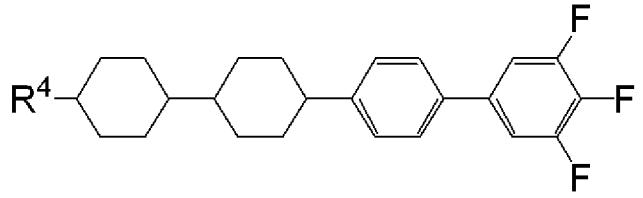

(3-14)

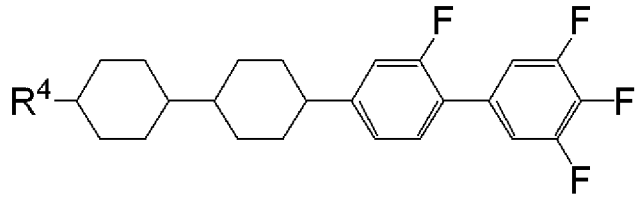

(3-15)

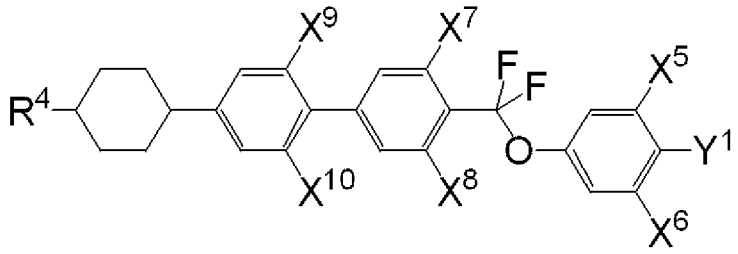

(3-16)


(3-17)

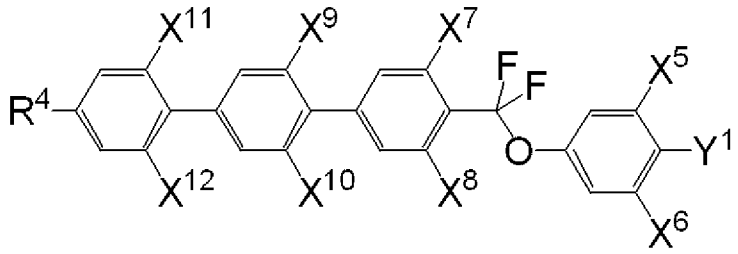

(3-18)


(3-19)

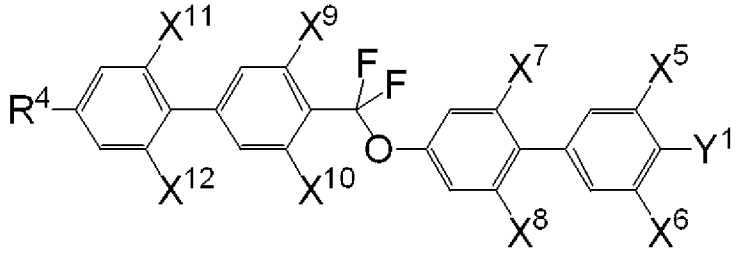

(3-20)



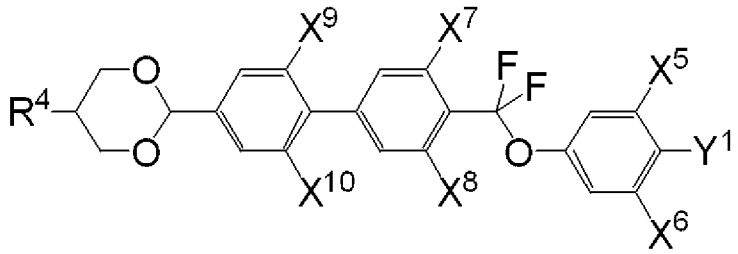
(3-21)



(3-22)



(3-23)



(3-24)

ここで、R^4は炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルであり；X^5、X^6、X^7、X^8、X^9、X^{10}、X^{11}、およびX^{12}は独立して、水素またはフッ素であり；Y^1は、フッ素、塩素、またはトリフルオロメトキシである。

[0027] １２．　第三成分が項１１に記載の式（３－１４）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１０に記載の液晶組成物。

[0028] １３．　第三成分が項１１に記載の式（３－１５）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１０に記載の液晶組成物。

[0029] １４．　第三成分が項１１に記載の式（３－１７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１０に記載の液晶組成物。

[0030] １５．　第三成分が項１１に記載の式（３－２１）で表される化合物の群か

ら選択された少なくとも１つの化合物である項１０に記載の液晶組成物。

[0031] １６．　第三成分が項１１に記載の式（３－２２）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である項１０に記載の液晶組成物。

[0032] １７．　液晶組成物の全重量に基づいて、第三成分の割合が５重量％から６５重量％の範囲である項１０から１６のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[0033] １８．　ネマチック相の上限温度が７０℃以上であり、波長５８９ｎｍにおける光学異方性（２５℃）が０．０７以上であり、そして周波数１ｋＨｚにおける誘電率異方性（２５℃）が２以上である項１から１７のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[0034] １９．　項１から１８のいずれか１項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

[0035] ２０．　液晶表示素子の動作モードが、ＴＮモード、ＥＣＢモード、ＯＣＢモード、ＩＰＳモード、ＰＳＡモード、またはＦＰＡモードであり、液晶表示素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である項１９に記載の液晶表示素子。

[0036] ２１．　項１から１８のいずれか１項に記載の液晶組成物の液晶表示素子における使用。

[0037] 本発明は、次の項も含む。１）光学活性な化合物をさらに含有する上記の組成物、２）酸化防止剤、紫外線吸収剤、消泡剤、重合可能な化合物、重合開始剤などの添加物をさらに含有する上記の組成物、３）上記の組成物を含有するＡＭ素子、４）上記の組成物を含有し、そしてＴＮ、ＥＣＢ、ＯＣＢ、ＩＰＳ、ＦＦＳまたはＰＳＡのモードを有する素子、５）上記の組成物を含有する透過型の素子、６）上記の組成物を、ネマチック相を有する組成物としての使用、７）上記の組成物に光学活性な化合物を添加することによって光学活性な組成物としての使用。

[0038] 本発明の組成物を次の順で説明する。第一に、組成物における成分化合物の構成を説明する。第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物に及ぼす主要な効果を説明する。第三に、組成物における成分の組み

合わせ、成分の好ましい割合およびその根拠を説明する。第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。第五に、成分化合物の具体的な例を示す。第六に、組成物に混合してもよい添加物を説明する。第七に、成分化合物の合成法を説明する。最後に、組成物の用途を説明する。

[0039] 第一に、組成物における成分化合物の構成を説明する。本発明の組成物は組成物Ａと組成物Ｂに分類される。組成物Ａは、化合物（１）、化合物（２）、および化合物（３）から選択された液晶化合物の他に、その他の液晶性化合物、添加物、不純物などをさらに含有してもよい。「その他の液晶性化合物」は、化合物（１）、化合物（２）、および化合物（３）とは異なる液晶性化合物である。このような化合物は、特性をさらに調整する目的で組成物に混合される。添加物は、光学活性な化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合可能な化合物、重合開始剤などである。不純物は成分化合物の合成などの工程において混入した化合物などである。この化合物が液晶性化合物であったとしても、ここでは不純物として分類される。

[0040] 組成物Ｂは、実質的に化合物（１）、化合物（２）、および化合物（３）から選択された化合物のみからなる。「実質的に」は、組成物が添加物および不純物を含有してもよいが、これらの化合物と異なる液晶性化合物を含有しないことを意味する。組成物Ｂは組成物Ａに比較して成分の数が少ない。コストを下げるという観点から、組成物Ｂは組成物Ａよりも好ましい。その他の液晶性化合物を混合することによって物性をさらに調整できるという観点から、組成物Ａは組成物Ｂよりも好ましい。

[0041] 第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物の特性に及ぼす主要な効果を説明する。成分化合物の主要な特性を本発明の効果に基づいて表２にまとめる。表２の記号において、Ｌは大きいまたは高い、Ｍは中程度の、Ｓは小さいまたは低い、を意味する。記号Ｌ、Ｍ、Ｓは、成分化合物のあいだの定性的な比較に基づいた分類であり、０（ゼロ）は、値がほぼゼロであることを意味する。

[0042]

表2. 化合物の特性

化合物	（1）	（2）	（3）
上限温度	S～M	S～L	S～L
粘度	L	S～M	M～L
光学異方性	L	S～L	S～L
誘電率異方性	M～L	0	S～L
比抵抗	L	L	L

[0043] 成分化合物を組成物に混合したとき、成分化合物が組成物の特性に及ぼす主要な効果は次のとおりである。化合物（１）は光学異方性を上げ、そして誘電率異方性を上げる。化合物（２）は上限温度を上げ、下限温度を下げ、そして粘度を下げる。化合物（３）は上限温度を上げ、そして誘電率異方性を上げる。

[0044] 第三に、組成物における成分の組み合わせ、成分の好ましい割合およびその根拠を説明する。組成物における成分の組み合わせは、第一成分＋第二成分、および第一成分＋第二成分＋第三成分である。組成物における成分の好ましい組み合わせは、誘電率異方性を上げるため、粘度を下げるため、または下限温度を下げるために、第一成分＋第二成分＋第三成分である。

[0045] 第一成分の好ましい割合は、誘電率異方性を上げるため約３重量％以上であり、下限温度を下げるために約２５重量％以下である。さらに好ましい割合は約５重量％から約２０重量％の範囲である。特に好ましい割合は約７重量％から約１５重量％の範囲である。

[0046] 第二成分の好ましい割合は、上限温度を上げるため、または粘度を下げるために約２５重量％以上であり、下限温度を下げるために約９７重量％以下である。さらに好ましい割合は約３０重量％から約８０重量％の範囲である。特に好ましい割合は約３５重量％から約７５重量％の範囲である。

[0047] 第三成分の好ましい割合は、誘電率異方性を上げるために約５重量％以上であり、下限温度を下げるために約６５重量％以下である。さらに好ましい

割合は約１０重量％から約６０重量％の範囲である。特に好ましい割合は約１５重量％から約５５重量％の範囲である。

[0048] 第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。R^1およびR^4は独立して、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、または炭素数２から１２のアルケニルである。好ましいR^1またはR^4は、紫外線に対する安定性を上げるため、または熱に対する安定性のために、炭素数１から１２のアルキルである。R^2およびR^3は独立して、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、炭素数２から１２のアルケニル、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２から１２のアルケニルである。好ましいR^2またはR^3は、粘度を下げるために、炭素数２から５のアルケニルであり、紫外線に対する安定性を上げるため、または熱に対する安定性を上げるために、炭素数１から７のアルキルである。

[0049] 好ましいアルキルは、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、またはオクチルである。さらに好ましいアルキルは、粘度を下げるために、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、またはヘプチルである。

[0050] 好ましいアルコキシは、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、またはヘプチルオキシである。さらに好ましいアルコキシは、粘度を下げるために、メトキシまたはエトキシである。

[0051] 好ましいアルケニルは、ビニル、１－プロペニル、２－プロペニル、１－ブテニル、２－ブテニル、３－ブテニル、１－ペンテニル、２－ペンテニル、３－ペンテニル、４－ペンテニル、１－ヘキセニル、２－ヘキセニル、３－ヘキセニル、４－ヘキセニル、または５－ヘキセニルである。さらに好ましいアルケニルは、粘度を下げるために、ビニル、１－プロペニル、３－ブテニル、または３－ペンテニルである。これらのアルケニルにおける－ＣＨ＝ＣＨ－の好ましい立体配置は、二重結合の位置に依存する。粘度を下げるために、１－プロペニル、１－ブテニル、１－ペンテニル、１－ヘキセニル、３－ペンテニル、３－ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはトランス

が好ましい。２－ブテニル、２－ペンテニル、２－ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはシスが好ましい。

[0052] 少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられたアルケニルの好ましい例は、２，２－ジフルオロビニル、３，３－ジフルオロ－２－プロペニル、４，４－ジフルオロ－３－ブテニル、５，５－ジフルオロ－４－ペンテニル、および６，６－ジフルオロ－５－ヘキセニルである。さらに好ましい例は、粘度を下げるために２，２－ジフルオロビニル、および４，４－ジフルオロ－３－ブテニルである。

[0053] アルキルは環状アルキルを含まない。アルコキシは環状アルコキシを含まない。アルケニルは環状アルケニルを含まない。１，４－シクロヘキシレンに関する立体配置は、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。

[0054] 環Ａおよび環Ｂ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、３－フルオロ－１，４－フェニレン、または２，５－ジフルオロ－１，４－フェニレンである。ｎが２または３である時、任意の２つの環Ａは同じであっても、異なってもよい。好ましい環Ａまたは環Ｂは、粘度を下げるために１，４－シクロヘキシレンであり、光学異方性を上げるために１，４－フェニレンである。環Ｃは、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、３－フルオロ－１，４－フェニレン、３，５－ジフルオロ－１，４－フェニレン、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルである。ｐが、２、３、または４である時、任意の２つの環Ｃは同じであっても、異なってもよい。好ましい環Ｃは上限温度を上げるために１，４－シクロヘキシレンであり、光学異方性を上げるために１，４－フェニレンであり、誘電率異方性を上げるために３，５－ジフルオロ－１，４－フェニレンである。

[0055] Z^1は、単結合、エチレン、またはカルボニルオキシである。ｎが２または３である時、任意の２つのZ^1は同じであっても、異なってもよい。好ましい

Z^1は、粘度を下げるために単結合であり、上限温度を上げるためにカルボニルオキシである。Z^2は、単結合、ジフルオロメチレンオキシ、エチレン、またはカルボニルオキシである。ｐが、２、３、または４である時、任意の２つのZ^2は同じであっても、異なってもよい。好ましいZ^2は、粘度を下げるために単結合であり、誘電率異方性を上げるために、ジフルオロメチレンオキシである。

[0056] X^1、X^2、X^3、X^4、X^5、X^6、X^7、X^8、X^9、X^{10}、X^{11}、およびX^{12}は独立して、水素またはフッ素である。好ましいX^1、X^2、X^3、X^4、X^5、X^6、X^7、X^8、X^9、X^{10}、X^{11}、またはX^{12}は、誘電率異方性を上げるためにフッ素であり、粘度を下げるために水素である。

[0057] Y^1は、フッ素、塩素、トリフルオロメトキシ、またはトリフルオロメチルである。好ましいY^1は、粘度を下げるためにフッ素である。

[0058] ｍは、１、２、または３である。好ましいｍは粘度を下げるために１であり、上限温度を上げるために２または３である。

ｎは、１、２、または３である。好ましいｎは粘度を下げるために１であり、上限温度を上げるために３である。

ｐは、１、２、３、または４である。好ましいｐは上限温度を上げるために２であり、紫外線または熱に対する安定性などを上げるために３である。

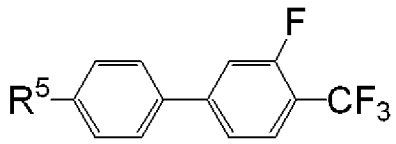
[0059] 第五に、成分化合物の具体的な例を示す。下記の好ましい化合物において、R^5は、炭素数１から１２のアルキル、または炭素数２から１２のアルケニルであり、R^6は独立して、炭素数１から１２のアルキル、または炭素数１から１２のアルコキシである。R^7およびR^8は独立して、炭素数１～１２を有する直鎖のアルキルまたは炭素数２から１２を有する直鎖のアルケニルである。R^9は独立して、炭素数１から１２を有する直鎖のアルキルである。

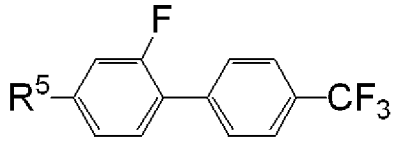
[0060] 好ましい化合物（１）は、化合物（１－１－１）から化合物（１－１９－１）である。

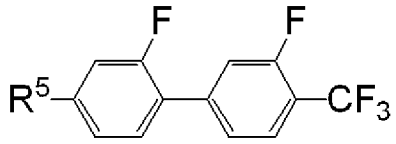
さらに好ましい化合物（１）は、化合物（１－６－１）および化合物（１－１７－１）である。特に好ましい化合物（１）は、化合物（１－６－１）で

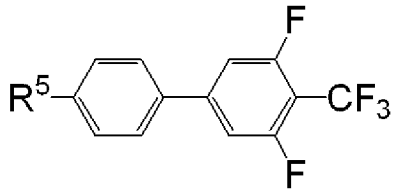
ある。好ましい化合物（２）は、化合物（２－１－１）から化合物（２－１３－１）である。さらに好ましい化合物（２）は、（２－１－１）、化合物（２－５－１）、化合物（２－７－１）、化合物（２－１０－１）、および化合物（２－１３－１）である。特に好ましい化合物（２）は、化合物（２－１－１）である。好ましい化合物（３）は、化合物（３－１－１）から化合物（３－２４－１）である。さらに好ましい化合物（３）は、化合物（３－５－１）、化合物（３－６－１）、化合物（３－１４－１）、化合物（３－１５－１）、化合物（３－１９－１）、化合物（３－２１－１）、および化合物（３－２２－１）である。特に好ましい化合物（３）は、化合物（３－１４－１）、化合物（３－１５－１）、化合物（３－２１－１）、および化合物（３－２２－１）である。

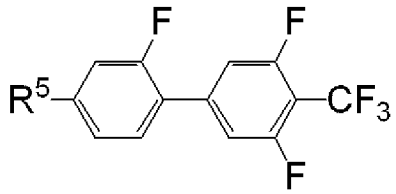
[0061]

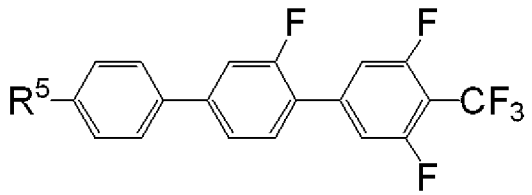

(1-1-1)

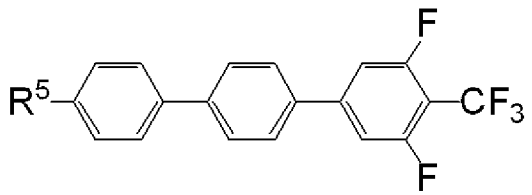

(1-2-1)

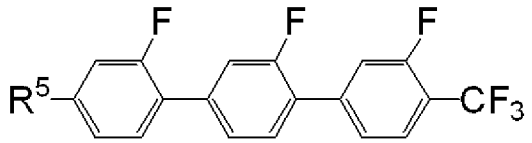

(1-3-1)

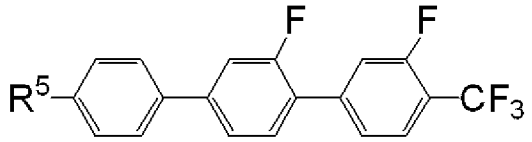

(1-4-1)

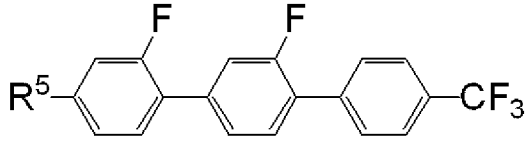

(1-5-1)


(1-6-1)

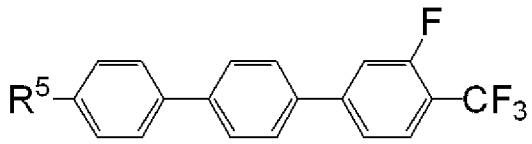

(1-7-1)

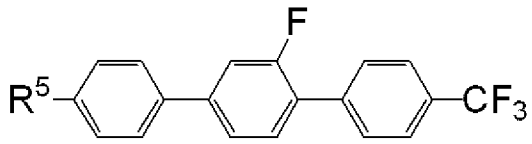

(1-8-1)

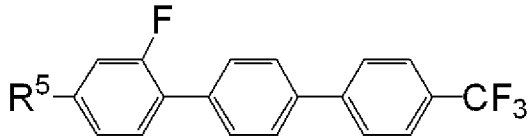

(1-9-1)

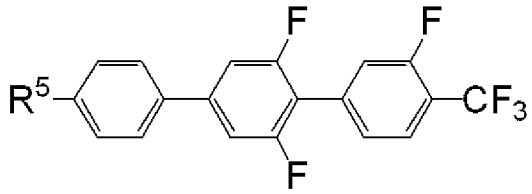

(1-10-1)

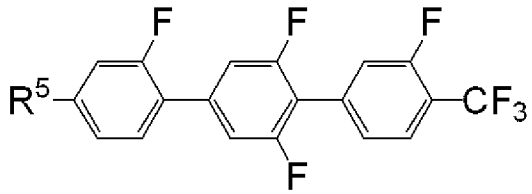
[0062]

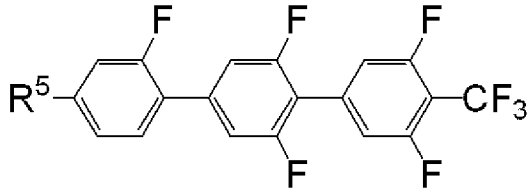

(1-11-1)

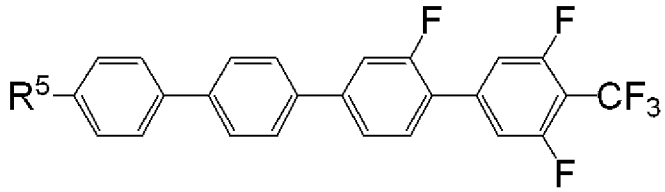

(1-12-1)

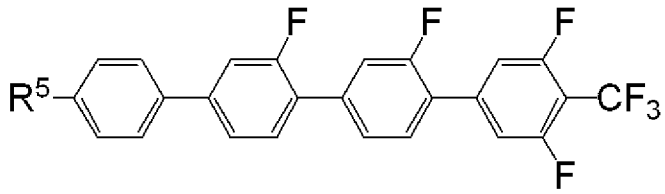

(1-13-1)

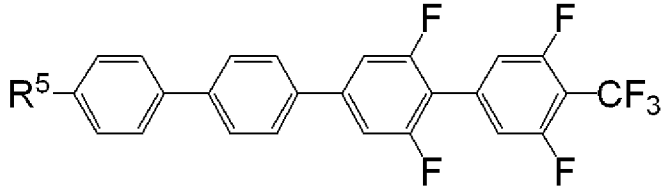

(1-14-1)


(1-15-1)

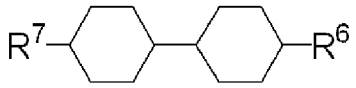

(1-16-1)

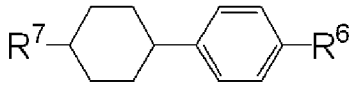

(1-17-1)

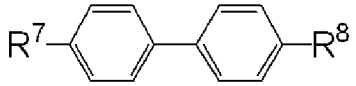

(1-18-1)

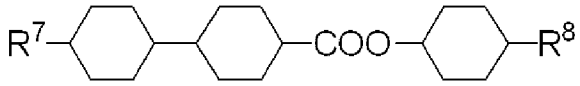

(1-19-1)

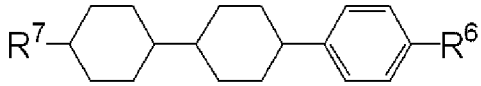
[0063]


(2-1-1)

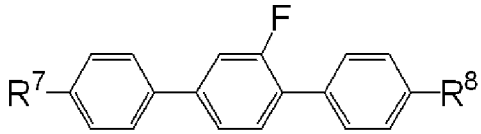

(2-2-1)

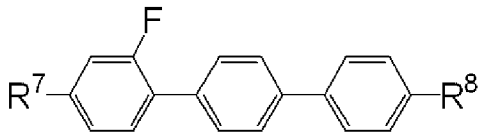

(2-3-1)

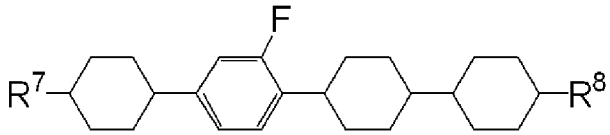

(2-4-1)

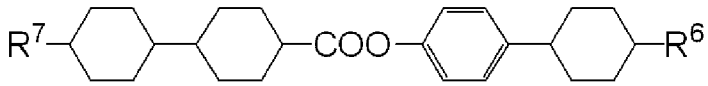

(2-5-1)

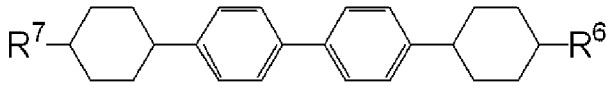

(2-6-1)

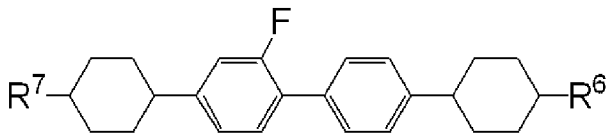

(2-7-1)

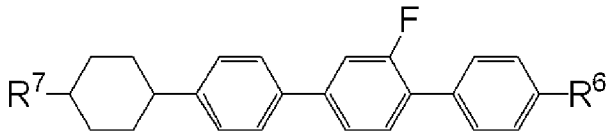

(2-8-1)


(2-9-1)

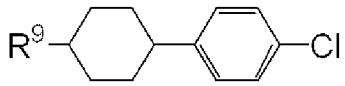

(2-10-1)

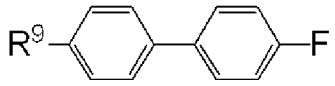

(2-11-1)

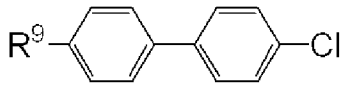

(2-12-1)

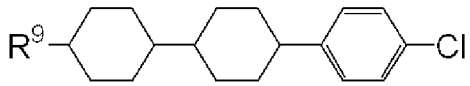

(2-13-1)

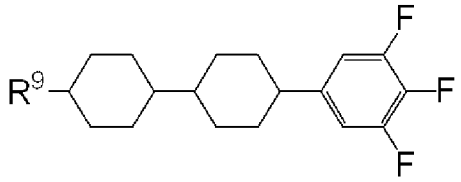
[0064]

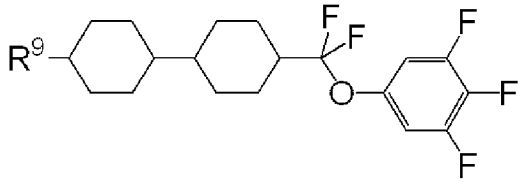

(3-1-1)

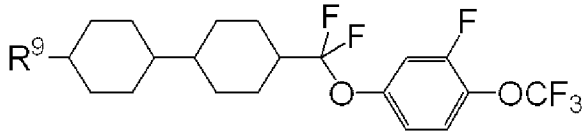

(3-2-1)

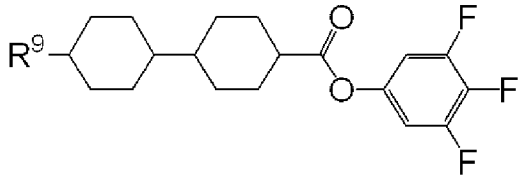

(3-3-1)

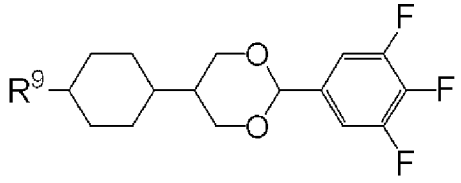

(3-4-1)

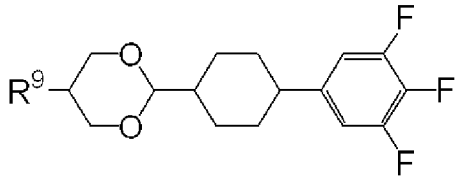

(3-5-1)

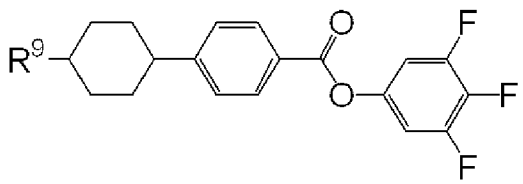

(3-6-1)

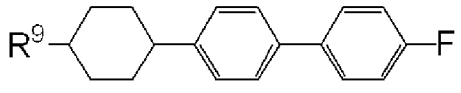

(3-7-1)


(3-8-1)

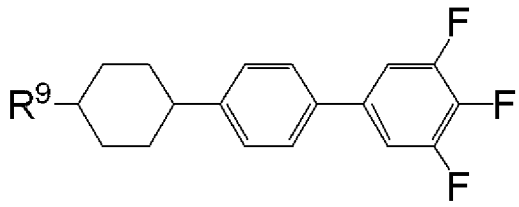

(3-9-1)

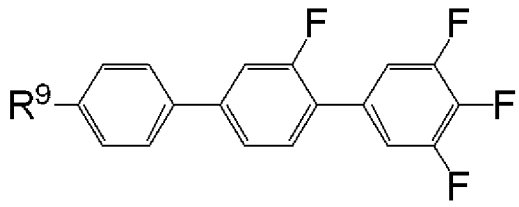

(3-10-1)

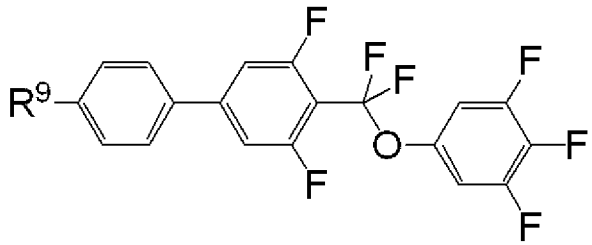

(3-11-1)

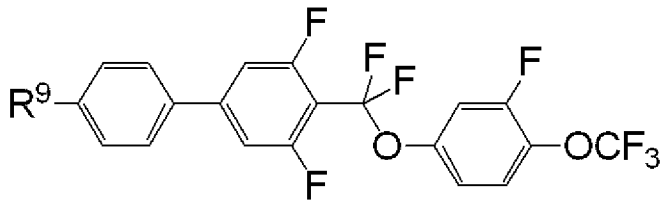

(3-12-1)

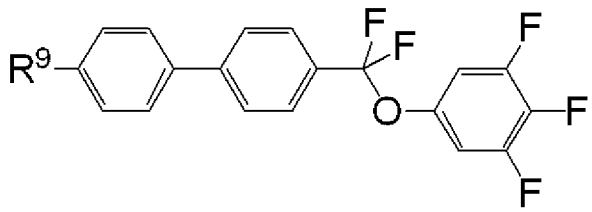
[0065]

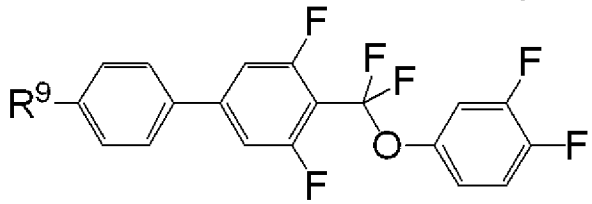

(3-13-1)

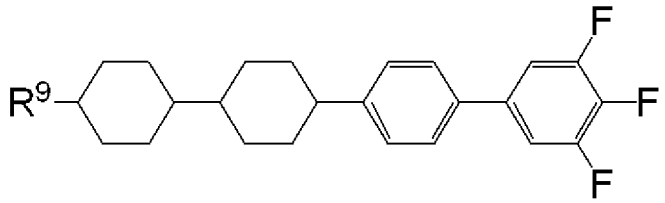

(3-14-1)

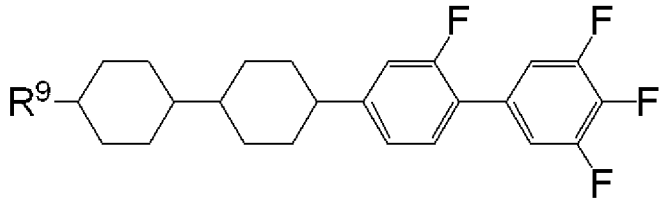

(3-15-1)


(3-16-1)

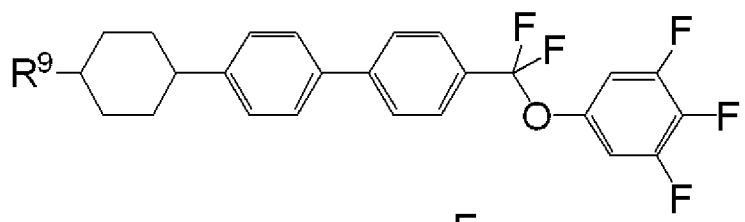

(3-17-1)

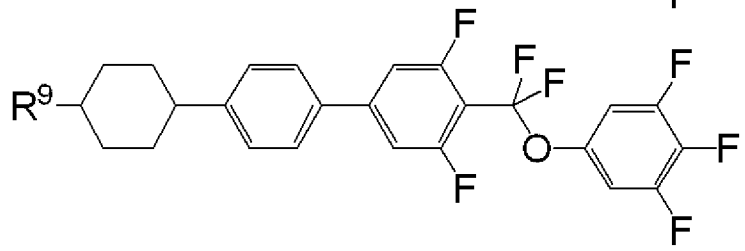

(3-18-1)

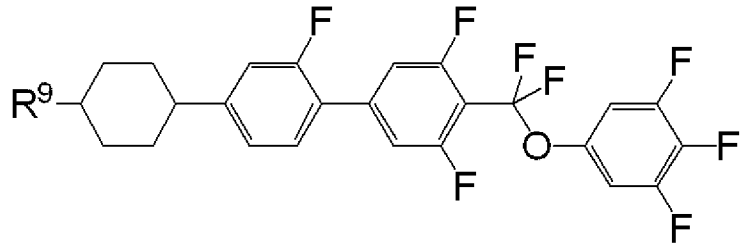

(3-19-1)

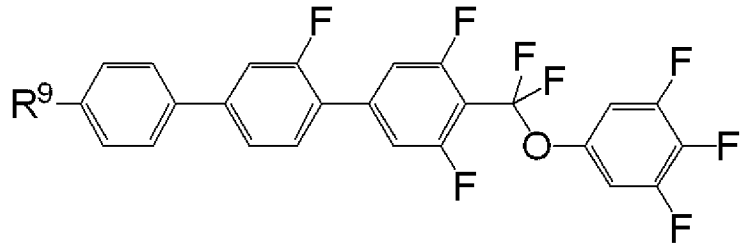

(3-20-1)

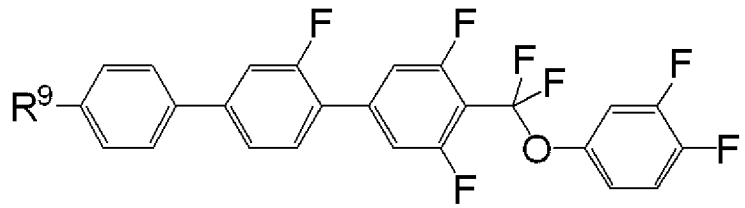
[0066]

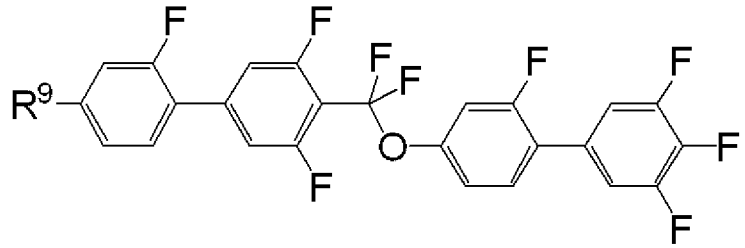

(3-21-1)

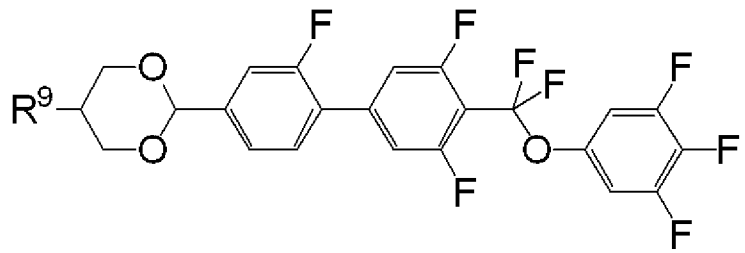

(3-21-2)


(3-21-3)


(3-22-1)


(3-22-2)

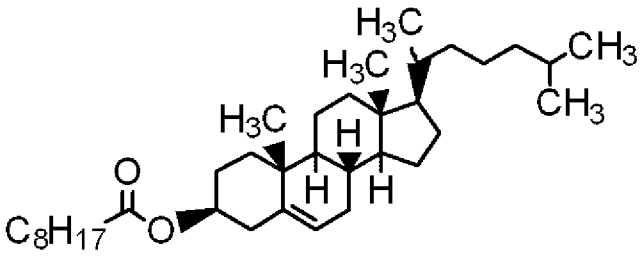

(3-23-1)


(3-24-1)

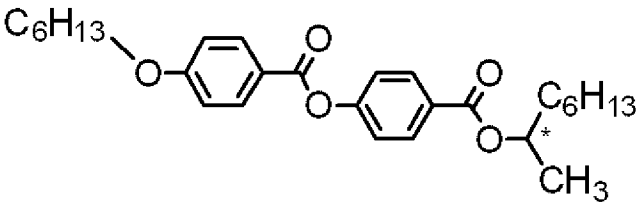
[0067] 第六に、組成物に混合してもよい添加物を説明する。このような添加物は

、光学活性な化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合可能な化合物、重合開始剤などである。液晶のらせん構造を誘起してねじれ角を与える目的で光学活性な化合物が組成物に混合される。このような化合物の例は、化合物（４－１）から化合物（４－５）である。光学活性な化合物の好ましい割合は約５重量％以下である。さらに好ましい割合は約０．０１重量％から約２重量％の範囲である。

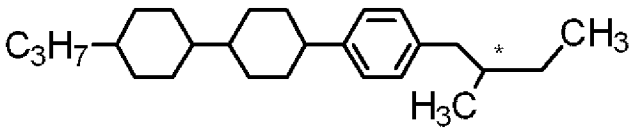
[0068]



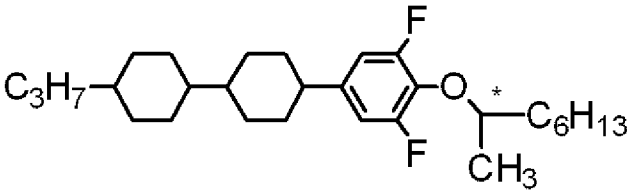
(4-1)



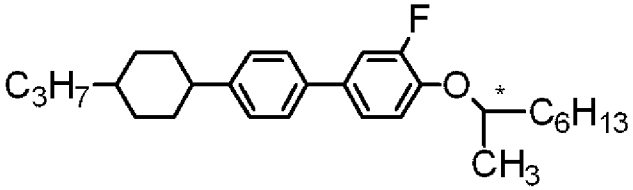
(4-2)



(4-3)



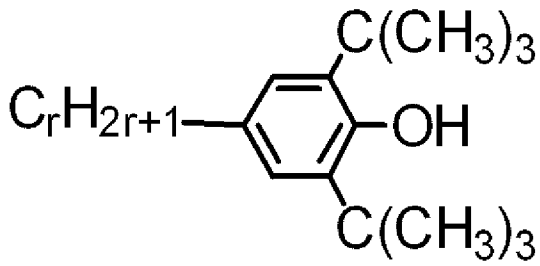
(4-4)



(4-5)

[0069] 大気中での加熱による比抵抗の低下を防止するために、または素子を長時間使用したあと、室温だけではなくネマチック相の上限温度に近い温度でも

大きな電圧保持率を維持するために、酸化防止剤が組成物に混合される。



(5)

[0070] 酸化防止剤の好ましい例は、ｒが１から９の整数である化合物（５）などである。化合物（５）において、好ましいｒは、１、３、５、７、または９である。さらに好ましいｒは１または７である。ｒが１である化合物（５）は、揮発性が大きいので、大気中での加熱による比抵抗の低下を防止するときに有効である。ｒが７である化合物（５）は、揮発性が小さいので、素子を長時間使用したあと、室温だけではなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を維持するのに有効である。酸化防止剤の好ましい割合は、その効果を得るために約５０ｐｐｍ以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないように約６００ｐｐｍ以下である。さらに好ましい割合は、約１００ｐｐｍから約３００ｐｐｍの範囲である。

[0071] 紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。立体障害のあるアミンのような光安定剤もまた好ましい。これらの吸収剤や安定剤における好ましい割合は、その効果を得るために約５０ｐｐｍ以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないために約１００００ｐｐｍ以下である。さらに好ましい割合は約１００ｐｐｍから約１００００ｐｐｍの範囲である。

[0072] ＧＨ（guest host）モードの素子に適合させるために、アゾ系色素、アントラキノン系色素などのような二色性色素（dichroic dye）が組成物に混合される。色素の好ましい割合は、約０．０１重量％から約１０重量％の範囲である。泡立ちを防ぐために、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の消泡剤が組成物に混合される。消泡剤の好ましい割合は、その効果を得るために約１ｐｐｍ以上であり、表示の不良を防ぐため

に約１０００ｐｐｍ以下である。さらに好ましい割合は、約１ｐｐｍから約５００ｐｐｍの範囲である。

[0073] ＰＳＡ（polymer sustained alignment）モードの素子に適合させるために重合可能な化合物が組成物に混合される。重合可能な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）、ビニルケトンなどの重合可能な基を有する化合物である。特に好ましい例は、アクリレートまたはメタクリレートの誘導体である。重合可能な化合物の好ましい割合は、その効果を得るために、約０．０５重量％以上であり、表示不良を防ぐために約１０重量％以下である。さらに好ましい割合は、約０．１重量％から約２重量％の範囲である。重合可能な化合物は、好ましくは光重合開始剤などの適切な開始剤存在下でＵＶ照射などにより重合する。重合のための適切な条件、開始剤の適切なタイプ、および適切な量は、当業者には既知であり、文献に記載されている。例えば光開始剤であるＩｒｇａｃｕｒｅ６５１（登録商標；ＢＡＳＦ）、Ｉｒｇａｃｕｒｅ１８４（登録商標；ＢＡＳＦ）、またはＤａｒｏｃｕｒｅ１１７３（登録商標；ＢＡＳＦ）がラジカル重合に対して適切である。光重合開始剤の好ましい割合は、重合可能な化合物の約０．１重量％から約５重量％の範囲であり、特に好ましい割合は、約１重量％から約３重量％の範囲である。

[0074] 第七に、成分化合物の合成法を説明する。これらの化合物（１）から化合物（３）は既知の方法によって合成できる。合成法を例示する。化合物（１－６－１）は、特表２００７－５０３４８７号公報に記載された方法で合成する。化合物（２－１－１）は、特開昭５９－７０６２４号公報および特開昭５９－１７６２２１号公報に記載された方法で合成する。化合物（２－５－１）は、特開昭５７－１６５３２８号公報および特開昭５９－１７６２２１号公報に記載された方法で合成する。化合物（３－５－１）は、特開平２－２３３６２６号公報に記載された方法で合成する。化合物（３－１５－１）、化合物（３－２１－１）、および化合物（３－２２－１）は、特開平１

０－２５１１８６号公報に記載された方法で合成する。酸化防止剤は市販されている。式（５）のｒが１である化合物は、アルドリッチ（Sigma-Aldrich Corporation）から入手できる。ｒが７である化合物（５）などは、米国特許３６６０５０５号明細書に記載された方法によって合成する。

[0075] 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。組成物は、このようにして得た化合物から公知の方法によって調製される。例えば、成分化合物を混合し、そして加熱によって互いに溶解させる。

[0076] 最後に、組成物の用途を説明する。本発明の組成物は主として、約－１０℃以下の下限温度、約７０℃以上の上限温度、そして約０．０７から約０．２０の範囲の光学異方性を有する。この組成物を含有する素子は大きな電圧保持率を有する。この組成物はＡＭ素子に適する。この組成物は透過型のＡＭ素子に特に適する。成分化合物の割合を制御することによって、またはその他の液晶性化合物を混合することによって、約０．０８から約０．２５の範囲の光学異方性を有する組成物、さらには約０．１０から約０．３０の範囲の光学異方性を有する組成物を調製してもよい。この組成物は、ネマチック相を有する組成物としての使用、光学活性な化合物を添加することによって光学活性な組成物としての使用が可能である。

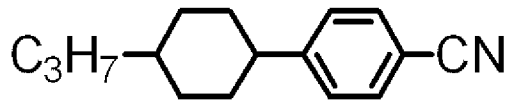
[0077] この組成物はＡＭ素子への使用が可能である。さらにＰＭ素子への使用も可能である。この組成物は、ＰＣ、ＴＮ、ＳＴＮ、ＥＣＢ、ＯＣＢ、ＩＰＳ、ＦＦＳ、ＶＡ、ＰＳＡなどのモードを有するＡＭ素子およびＰＭ素子への使用が可能である。ＴＮ、ＯＣＢ、ＩＰＳモードまたはＦＦＳモードを有するＡＭ素子への使用は特に好ましい。ＩＰＳモードまたはＦＦＳモードを有するＡＭ素子において、電圧が無印加状態での液晶分子の配列がパネル基板に対して並行あるいは垂直であってもよい。これらの素子が反射型、透過型

または半透過型であってもよい。透過型の素子への使用は好ましい。非結晶シリコンーＴＦＴ素子または多結晶シリコンーＴＦＴ素子への使用も可能である。この組成物をマイクロカプセル化して作製したＮＣＡＰ（nematic curvilinear aligned phase）型の素子や、組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたＰＤ（polymer dispersed）型の素子にも使用できる。

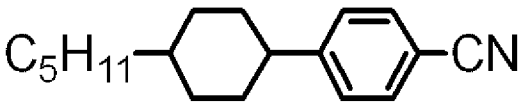
実施例

[0078] 組成物および組成物に含有させる化合物の特性を評価するために、組成物およびこの化合物を測定目的物とする。測定目的物が組成物のときはそのままを試料として測定し、得られた値を記載した。測定目的物が化合物のときは、この化合物（１５重量％）を母液晶（８５重量％）に混合することによって測定用試料を調製した。測定によって得られた値から外挿法によって化合物の特性値を算出した。（外挿値）＝｛（測定用試料の測定値）－０．８５×（母液晶の測定値）｝／０．１５。この割合でスメクチック相（または結晶）が２５℃で析出するときは、化合物と母液晶の割合を１０重量％：９０重量％、５重量％：９５重量％、１重量％：９９重量％の順に変更した。この外挿法によって化合物に関する上限温度、光学異方性、粘度および誘電率異方性の値を求めた。

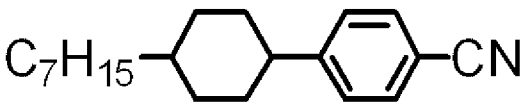
[0079] 母液晶の成分は下記のとおりである。各成分の割合は、重量％である。



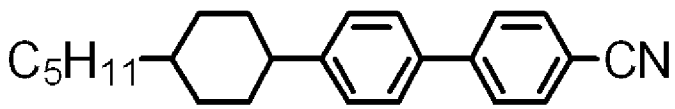
24%



36%



25%



15%

[0080] 特性値の測定は下記の方法にしたがった。それらの多くは、社団法人電子

情報技術産業協会（Japan Electronics and Information Technology Industries Association、以下ＪＥＩＴＡという）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る。

[0081] ネマチック相の上限温度（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。

[0082] 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ガラス瓶に入れ、０℃、－１０℃、－２０℃、－３０℃、および－４０℃のフリーザー中に１０日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が－２０℃ではネマチック相のままであり、－３０℃では結晶またはスメクチック相に変化したとき、T_Cを＜－２０℃と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

[0083] 粘度（バルク粘度；η；２０℃で測定；ｍＰａ・ｓ）：測定にはＥ型回転粘度計を用いた。

[0084] 粘度（回転粘度；γ１；２５℃で測定；ｍＰａ・ｓ）：測定は、M. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37 (1995)に記載された方法に従った。ツイスト角が０°であり、そして２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が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毎に段階的に印加した。０．２秒の無印加のあと、ただ１つの矩形波（矩形パルス；０．２秒）と無印加（２秒）の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流（transient current）のピーク電流（peak current）とピーク時間（peak time）を測定した。これらの測定値とM. Imaiらの論文中の４０頁記載の計算式（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。

[0085] 光学異方性（屈折率異方性；Δｎ；２５℃で測定）：測定は、波長５８９

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

[0086] 誘電率異方性（Δε；２５℃で測定）：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。

[0087] しきい値電圧（Ｖｔｈ；２５℃で測定；Ｖ）：測定には大塚電子株式会社製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が約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ある。

[0088] 電圧保持率（ＶＨＲ－１；２５℃で測定；％）：測定に用いたＴＮ素子はポリイミド配向膜を有し、そして２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）は５μｍである。この素子は試料を入れたあと紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子にパルス電圧（５Ｖで６０マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で１６．７ミリ秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Ａを求めた。面積Ｂは減衰しなかった

ときの面積である。電圧保持率は面積Ｂに対する面積Ａの百分率である。

[0089] 電圧保持率（ＶＨＲ－２；８０℃で測定；％）：測定に用いたＴＮ素子はポリイミド配向膜を有し、そして２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）は５μｍである。この素子は試料を入れたあと紫外線で硬化する接着剤で密閉した。このＴＮ素子にパルス電圧（５Ｖで６０マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で１６．７ミリ秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Ａを求めた。面積Ｂは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Ｂに対する面積Ａの百分率である。

[0090] 電圧保持率（ＶＨＲ－３；２５℃で測定；％）：紫外線を照射したあと、電圧保持率を測定し、紫外線に対する安定性を評価した。測定に用いたＴＮ素子はポリイミド配向膜を有し、そしてセルギャップは５μｍである。この素子に試料を注入し、光を２０分間照射した。光源は超高圧水銀ランプＵＳＨ－５００Ｄ（ウシオ電機製）であり、素子と光源の間隔は２０ｃｍである。ＶＨＲ－３の測定では、１６．７ミリ秒のあいだ減衰する電圧を測定した。大きなＶＨＲ－３を有する組成物は紫外線に対して大きな安定性を有する。ＶＨＲ－３は９０％以上が好ましく、９５％以上がより好ましい。

[0091] 電圧保持率（ＶＨＲ－４；２５℃で測定；％）：試料を注入したＴＮ素子を８０℃の恒温槽内で５００時間加熱したあと、電圧保持率を測定し、熱に対する安定性を評価した。ＶＨＲ－４の測定では、１６．７ミリ秒のあいだ減衰する電圧を測定した。大きなＶＨＲ－４を有する組成物は熱に対して大きな安定性を有する。

[0092] 応答時間（τ；２５℃で測定；ｍｓ）：測定には大塚電子株式会社製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。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。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ある。

[0093] 弾性定数（Ｋ；２５℃で測定；ｐＮ）：測定には横河・ヒューレットパッカード株式会社製の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である水平配向セルに試料を入れた。このセルに０ボルトから２０ボルト電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。測定した静電容量（Ｃ）と印加電圧（Ｖ）の値を『液晶デバイスハンドブック』（日刊工業新聞社）、７５頁にある式（２．９８）、式（２．１０１）を用いてフィッティングし、式（２．９９）からＫ１１およびＫ３３の値を得た。次に同１７１頁にある式（３．１８）に、先ほど求めたＫ１１およびＫ３３の値を用いてＫ２２を算出した。弾性定数は、このようにして求めたＫ１１、Ｋ２２、およびＫ３３の平均値である。

[0094] 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）｝。

[0095] らせんピッチ（Ｐ；室温で測定；μｍ）：らせんピッチはくさび法にて測定した（液晶便覧１９６頁（２０００年発行、丸善））。試料をくさび形セルに注入し、室温で２時間静置した後、ディスクリネーションラインの間隔（ｄ２－ｄ１）を偏光顕微鏡（ニコン（株）、商品名ＭＭ４０／６０シリーズ）にて観察した。らせんピッチ（Ｐ）は、くさびセルの角度をθとあらわした次の式から算出した。

Ｐ＝２×（ｄ２－ｄ１）×ｔａｎθ

[0096] ガスクロマト分析：測定には島津製作所製のＧＣ－１４Ｂ型ガスクロマトグラフを用いた。キャリアーガスはヘリウム（２ｍＬ／分）である。試料気化室を２８０℃に、検出器（ＦＩＤ）を３００℃に設定した。成分化合物の分離には、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムＤＢ－１（長さ３０ｍ、内径０．３２ｍｍ、膜厚０．２５μｍ；固定液相はジメチルポリシロキサン；無極性）を用いた。このカラムは、２００℃で２分間保持したあと、５℃／分の割合で２８０℃まで昇温した。試料はアセトン溶液（０．１重量％）に調製したあと、その１μＬを試料気化室に注入した。記録計は島津製作所製のＣ－Ｒ５Ａ型Chromatopac、またはその同等品である。得られたガスクロマトグラムは、成分化合物に対応するピークの保持時間およびピークの面積を示した。

[0097] 試料を希釈するための溶媒は、クロロホルム、ヘキサンなどを用いてもよい。成分化合物を分離するために、次のキャピラリカラムを用いてもよい。Agilent Technologies Inc.製のＨＰ－１（長さ３０ｍ、内径０．３２ｍｍ、膜厚０．２５μｍ）、Restek Corporation製のＲｔｘ－１（長さ３０ｍ、内径０．３２ｍｍ、膜厚０．２５μｍ）、SGE International Pty. Ltd製のＢＰ－１（長さ３０ｍ、内径０．３２ｍｍ、膜厚０．２５μｍ）。化合物ピークの重なりを防ぐ目的で島津製作所製のキャピラリカラムＣＢＰ１－Ｍ５０－０２５（長さ５０ｍ、内径０．２５ｍｍ、膜厚０．２５μｍ）を用いてもよい。

[0098] 組成物に含有される液晶性化合物の割合は、次のような方法で算出してよい。液晶性化合物はガスクロマトグラフで検出することができる。ガスクロマトグラムにおけるピークの面積比は液晶性化合物の割合（モル数）に相当する。上に記載したキャピラリカラムを用いたときは、各々の液晶性化合物の補正係数を１とみなしてよい。したがって、液晶性化合物の割合（重量％）は、ピークの面積比から算出する。

[0099] 実施例により本発明を詳細に説明する。本発明は下記の実施例によって限定されない。比較例および実施例における化合物は、下記の表３の定義に基

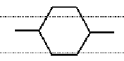
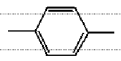
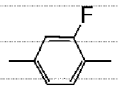
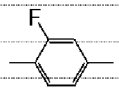
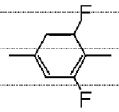
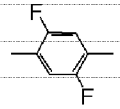
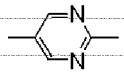
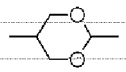
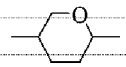
づいて記号により表した。

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、液晶組成物の全重量に基づいた重量百分率（重量％）であり、液晶組成物には不純物が含まれている。最後に、組成物の特性値をまとめた。

[0100]

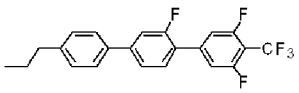
表3　記号を用いた化合物の表記法

R-(A1)-Z1-・・・・・-Zn-(An)-R'

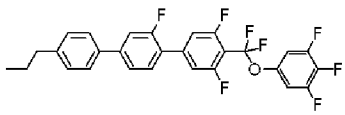
1）左末端基　R-	記号	4）環構造　-An-	記号
C_nH_{2n+1}-	n-		H
$C_nH_{2n+1}O$-	nO-		
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}$-	mOn-		B
CH_2=CH-	V-		
C_nH_{2n+1}-CH=CH-	nV-		
CH_2=CH-C_nH_{2n}-	Vn-		B(F)
C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-	mVn-		
CF_2=CH-	VFF-		
CF_2=CH-C_nH_{2n}-	VFFn-		B(2F)
2）右末端基　-R'	記号		
-C_nH_{2n+1}	-n		B(F,F)
-OC_nH_{2n+1}	-On		
-CH=CH_2	-V		
-CH=CH-C_nH_{2n+1}	-Vn		B(2F,5F)
-C_nH_{2n}-CH=CH_2	-nV		
-C_mH_{2m}-CH=CH-C_nH_{2n+1}	-mVn		
-CH=CF_2	-VFF		
-F	-F		Py
-Cl	-CL		
-OCF_3	-OCF3		
-CF_3	-CF3		G
3）結合基　-Zn-	記号		
-C_2H_4-	2		
-COO-	E		dh
-CH=CH-	V		
-CH_2O-	1O		
-OCH_2-	O1		
-CF_2O-	X		
-C≡C-	T		

5）表記例

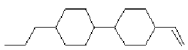
例1　3-BB(F)B(F,F)-CF3



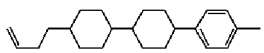
例2　3-BB(F)B(F,F)XB(F,F)-F



例3　3-HH-V



例4　V2-HHB-1



[0101]　[実施例１]

３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－６－１）	１０％
Ｖ－ＨＨ－３	（２－１－１）	４５％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	１０％

１－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－２Ｖ	（２－７－１）	９％
２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－２Ｖ	（２－７－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－２Ｖ	（２－７－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５－１）	８％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	３％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	７％

ＮＩ＝７６．８℃；Ｔｃ＜－３０℃；Δｎ＝０．１２７；Δε＝６．７；Ｖｔｈ＝２．２１Ｖ；η＝８．６ｍＰａ・ｓ．

[0102] ［比較例１］

実施例１の組成物において、本発明の第１成分の化合物を第３成分の化合物（３－１４－１）に置き換えた液晶組成物とした。本組成物を調製し、上述した方法により測定した。この組成物の成分および特性は下記のとおりである。

Ｖ－ＨＨ－３	（２－１－１）	４５％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	１０％
１－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－２Ｖ	（２－７－１）	９％
２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－２Ｖ	（２－７－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－２Ｖ	（２－７－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１４－１）	１０％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５－１）	８％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	３％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	７％

ＮＩ＝７７．１℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１２７；Δε＝５．６；Ｖｔｈ＝２．４４Ｖ；η＝７．２ｍＰａ・ｓ．

比較例１の組成物は実施例１と較べて、ネマチック相の下限温度が高く、誘電率異方性が正に小さい。

[0103] ［実施例２］

３－Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－５－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－６－１）	４％
３－ＢＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－１７－１）	３％
２－ＨＨ－３	（２－１－１）	５％
３－ＨＨ－４	（２－１－１）	１８％
３－ＨＢ－Ｏ２	（２－２－１）	５％
５－ＨＢ－Ｏ２	（２－２－１）	４％
３－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	５％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（２－５－１）	４％
３－Ｂ（Ｆ）ＢＢ－２	（２－８－１）	３％
３－ＨＢ－ＣＬ	（３－１－１）	７％
３－ＨＨＢ－ＣＬ	（３－４－１）	５％
３－ＨＨＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－６－１）	８％
３－ＨＨＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－８－１）	３％
３－ＨＢＥＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１１－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５－１）	５％
３－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－１）	５％
５－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	３％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	４％

ＮＩ＝８０．６℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１０８；Δε＝８．６；Ｖｔｈ＝２．０６Ｖ；η＝２０．０ｍＰａ・ｓ．

[0104] ［実施例３］

３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－４－１）	４％
３－ＢＢＢ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－７－１）	４％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－１８－１）	４％
２－ＨＨ－３	（２－１－１）	１０％
３－ＨＨ－４	（２－１－１）	１０％
３－ＨＨ－５	（２－１－１）	５％
Ｖ２－ＢＢ－１	（２－３－１）	５％
３－ＨＨＥＨ－５	（２－４－１）	３％
１Ｖ２－ＨＨＢ－３	（２－５－１）	５％
５－ＨＢＢ－２	（２－６－１）	５％
３－ＨＨＥＢＨ－５	（２－１０－１）	３％
３－ＨＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－５－１）	８％
３－ＨＢＢ－Ｆ	（３－１２－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１４－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５－１）	６％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１９－１）	４％
３－ＨＨＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２０－１）	４％
３－ＨＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－３）	６％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	６％

ＮＩ＝８２．７℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１１５；Δε＝９．１；Ｖｔｈ＝２．０６Ｖ；η＝２４．３ｍＰａ・ｓ．

[0105] ［実施例４］

３－Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－３－１）	４％
３－Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－８－１）	５％

３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）Ｂ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－１４－１）	５％
Ｖ－ＨＨ－３	（２－１－１）	２３％
１Ｖ－ＨＨ－３	（２－１－１）	７％
７－ＨＢ－１	（２－２－１）	４％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	８％
Ｖ２－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	８％
５－ＨＢＢＨ－３	（２－１１－１）	４％
１Ｖ２－ＢＢ－Ｆ	（３－２　）	４％
１Ｖ２－ＢＢ－ＣＬ	（３－３　）	４％
３－ＨＨＸＢ（Ｆ）－ＯＣＦ３	（３－７－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ）－ＯＣＦ３	（３－１６－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－１８－１）	４％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ）－Ｆ	（３－２２－２）	１０％

ＮＩ＝７０．４℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１００；Δε＝７．７；Ｖｔｈ＝１．９１Ｖ；η＝１４．２ｍＰａ・ｓ．

[0106] ［実施例５］

３－ＢＢ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－１－１）	４％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－９－１）	４％
３－ＢＢＢ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－１１－１）	４％
Ｖ－ＨＨ－３	（２－１－１）	２０％
１Ｖ２－ＨＨ－３	（２－１－１）	１０％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	１０％
３－ＨＢ（Ｆ）ＨＨ－５	（２－９－１）	３％
３－ＨＧＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－９－１）	５％
３－ＧＨＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１０－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５－１）	１０％
３－ＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１７－１）	１０％

３－ＨＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ
（３－２１－３） ５％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ
（３－２２－１） ５％
３－ＧＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ
（３－２４－１） ５％

ＮＩ＝７７．３℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１２０；Δε＝１０．３；Ｖｔｈ＝１．８３Ｖ；η＝１８．０ｍＰａ・ｓ．

[0107] ［実施例６］

３－Ｂ（Ｆ）Ｂ－ＣＦ３	（１－２－１）	４％
３－Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）Ｂ－ＣＦ３	（１－１０－１）	４％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－ＣＦ３	（１－１２－１）	４％
Ｖ－ＨＨ－４	（２－１－１）	１７％
Ｖ－ＨＨ－５	（２－１－１）	７％
１Ｖ－ＨＨ－４	（２－１－１）	４％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（２－５－１）	４％
２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－３	（２－７－１）	４％
２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－５	（２－７－１）	４％
５－ＨＢＢ（Ｆ）Ｂ－２	（２－１３－１）	４％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１３－１）	８％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１４－１）	４％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５－１）	８％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１９－１）	４％
５－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１９－１）	４％
３－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－１）	４％
５－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－１）	４％

３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ
（３－２２－１） ４％

４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ

（３－２２－１）　４％

ＮＩ＝８６．４℃；Ｔｃ＜－３０℃；Δｎ＝０．１３４；Δε＝８．７；Ｖｔｈ＝２．２１Ｖ；η＝２５．９ｍＰａ・ｓ．

[0108] ［実施例７］

３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３　（１－６－１）　４％

３－Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３

（１－１６－１）　４％

３－ＢＢＢ（Ｆ，Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３

（１－１９－１）　４％

３－ＨＨ－４　（２－１－１）　２５％

３－ＨＨ－５　（２－１－１）　１０％

１－ＢＢ－３　（２－３－１）　５％

３－ＨＨＢ－１　（２－５－１）　８％

３－ＨＨＢ－３　（２－５－１）　５％

５－ＨＢ（Ｆ）ＢＨ－３　（２－１２－１）　３％

３－ＨＢ－ＣＬ　（３－１－１）　４％

３－ＨＨＢ－ＣＬ　（３－４－１）　４％

１－ＨＨＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ　（３－６－１）　４％

３－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ　（３－２１－１）　６％

３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ

（３－２１－２）　５％

３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ

（３－２２－１）　５％

３－Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ

（３－２３－１）　４％

ＮＩ＝９２．１℃；Ｔｃ＜－３０℃；Δｎ＝０．１１４；Δε＝９．３；Ｖｔｈ＝２．２８Ｖ；η＝１９．８ｍＰａ・ｓ．

[0109] [実施例８]

３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３	（１－６－１）	４％
３－Ｂ（Ｆ）ＢＢ－ＣＦ３	（１－１３－１）	３％
３－Ｂ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）Ｂ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－１５－１）	３％
Ｖ－ＨＨ－３	（２－１－１）	２０％
２－ＨＨ－３	（２－１－１）	５％
ＶＦＦ－ＨＨ－３	（２－１）	５％
３－ＨＨ－Ｏ１	（２－１－１）	５％
３－ＨＢ－Ｏ１	（２－２－１）	５％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	８％
１Ｖ２－ＨＨＢ－１	（２－５－１）	４％
ＶＦＦ－ＨＨＢ－１	（２－５）	３％
５－Ｂ（Ｆ）ＢＢ－２	（２－８－１）	３％
３－ＢＢ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１５－１）	５％
３－ＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１７－１）	５％
３－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－１）	５％
３－ＨＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－３）	５％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	６％
３－Ｐｙ－ＢＢ－Ｆ	（３）	３％
１Ｏ１－ＨＢＢＨ－５	（－）	３％

ＮＩ＝８１．２℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１１８；Δε＝７．２；Ｖｔｈ＝２．２７Ｖ；η＝１５．０ｍＰａ・ｓ．

[0110] [実施例９]

Ｖ２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）－ＣＦ３

	（１－６－１）	４％
Ｖ２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ）－ＣＦ３	（１－９－１）	４％
２－ＨＨ－５	（２－１－１）	５％
Ｖ－ＨＨ－４	（２－１－１）	１０％
Ｖ－ＨＨ－５	（２－１－１）	１０％
１Ｖ２－ＨＨ－２	（２－１－１）	５％
Ｖ２－Ｂ（Ｆ）ＢＢ－２	（２－８－１）	４％
２－Ｂ（Ｆ）ＢＢ－２Ｖ	（２－８－１）	４％
３－ＨＨＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－６－１）	９％
３－ＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１３－１）	１０％
３－ＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１７－１）	９％
３－ＨＨＢＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－１９－１）	５％
３－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－１）	６％
５－ＨＢＢＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２１－１）	５％
３－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	６％
４－ＢＢ（Ｆ）Ｂ（Ｆ，Ｆ）ＸＢ（Ｆ，Ｆ）－Ｆ	（３－２２－１）	４％

ＮＩ＝８６．７℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１３１；Δε＝８．５；Ｖｔｈ＝２．２３Ｖ；η＝２３．５ｍＰａ・ｓ．

[0111] 実施例１から実施例９の組成物は、比較例１のそれと比べて正の大きな誘電率異方性を有する。よって、本発明による液晶組成物は優れた特性を有する。

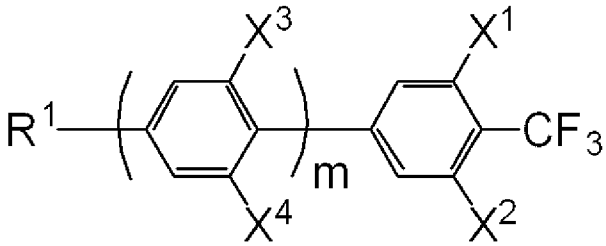
産業上の利用可能性

[0112] ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、大きな弾性定数、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性などの特性において、少なくとも１つの特性を充足する、または少なくとも２つの特性に関して適

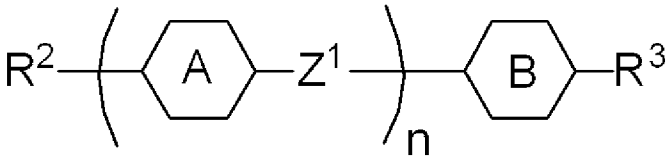
切なバランスを有する液晶組成物である。このような組成物を含有する液晶表示素子は、短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などを有するＡＭ素子となるので、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いることができる。

請求の範囲

［請求項1］ 第一成分として式（１）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、および第二成分として式（２）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物を含有し、そしてネマチック相を有する液晶組成物。



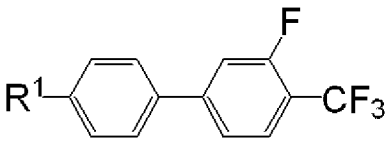
(1)

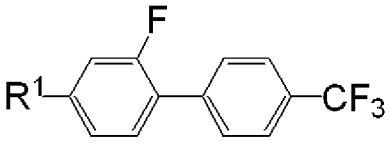


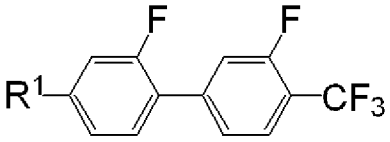
(2)

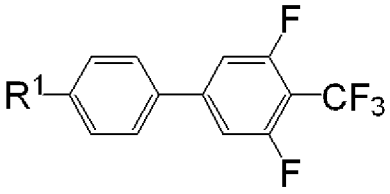
ここで、Ｒ[1]は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルであり、Ｒ[2]およびＲ[3]は独立して、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、炭素数２から１２のアルケニル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数２から１２のアルケニルであり；環Ａおよび環Ｂは独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、３－フルオロ－１，４－フェニレン、または２，５－ジフルオロ－１，４－フェニレンであり；Ｚ[1]は独立して、単結合、エチレン、またはカルボニルオキシであり；Ｘ[1]、Ｘ[2]、Ｘ[3]、およびＸ[4]は独立して、水素またはフッ素であり；ｍおよびｎは独立して、１、２、または３である。

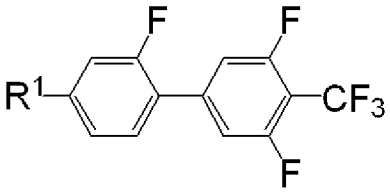
［請求項2］ 第一成分が式（１－１）から式（１－１９）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１に記載の液晶組成物。

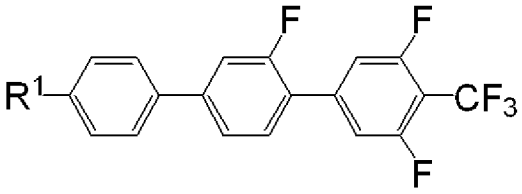

(1-1)

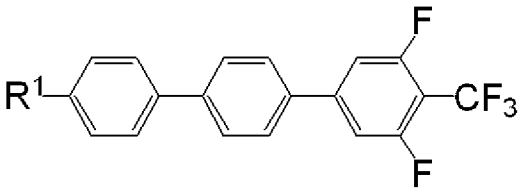

(1-2)

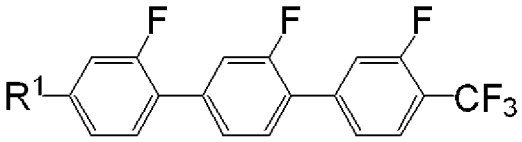

(1-3)

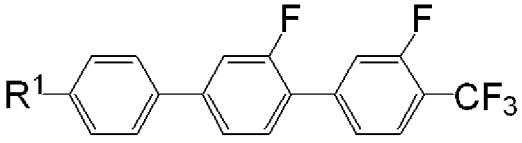

(1-4)

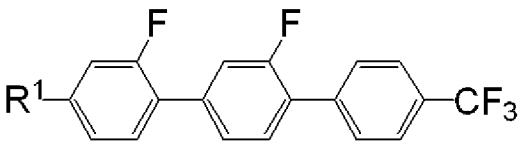

(1-5)

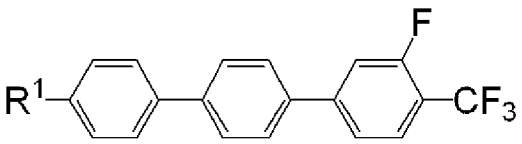

(1-6)

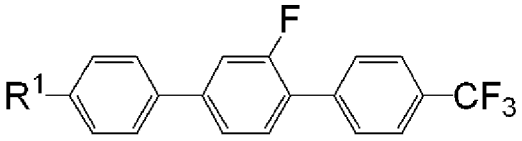

(1-7)

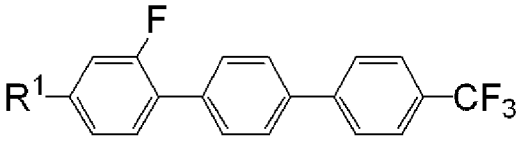

(1-8)

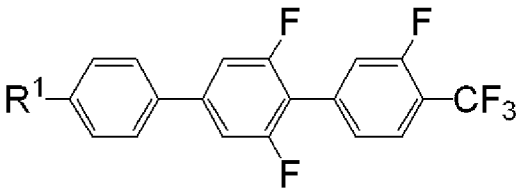

(1-9)

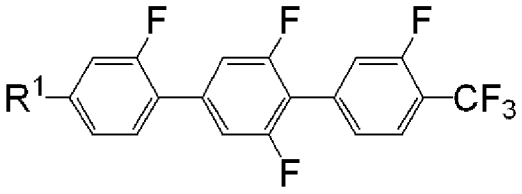

(1-10)

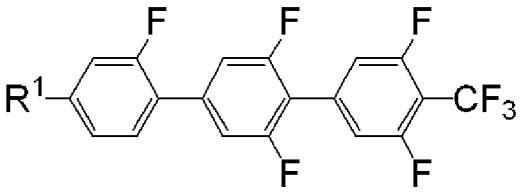

(1-11)

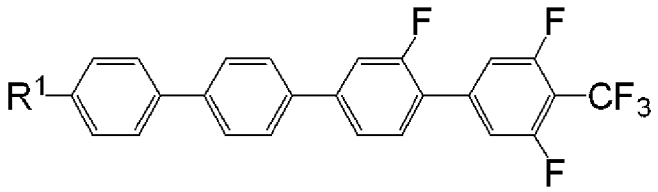

(1-12)

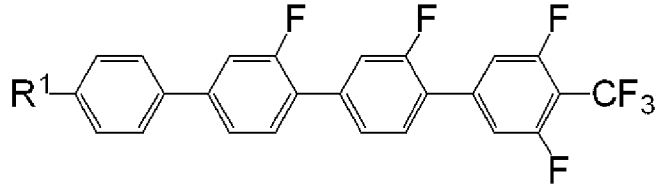

(1-13)

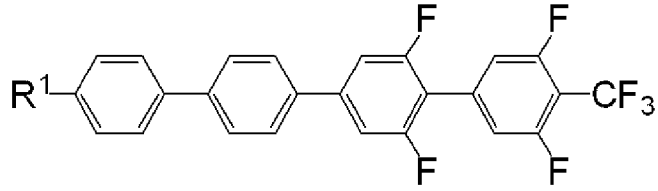

(1-14)


(1-15)


(1-16)


(1-17)


(1-18)


(1-19)

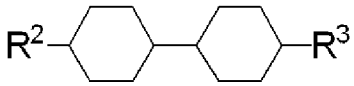
ここで、Ｒ[1]は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２の

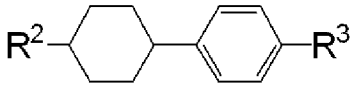
アルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルである。

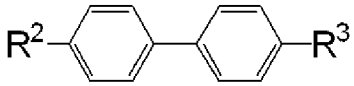
［請求項3］ 第一成分が請求項２に記載の式（１－６）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１に記載の液晶組成物。

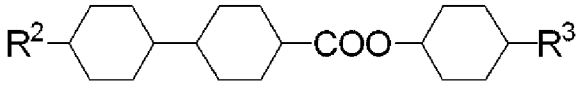
［請求項4］ 第一成分が請求項２に記載の式（１－１７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１に記載の液晶組成物。

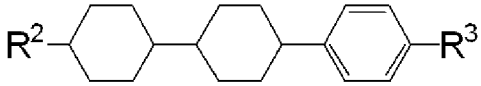
［請求項5］ 第二成分が式（２－１）から式（２－１３）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１から４のいずれか１項に記載の液晶組成物。

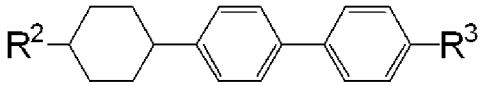

(2-1)

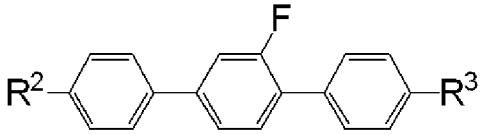

(2-2)

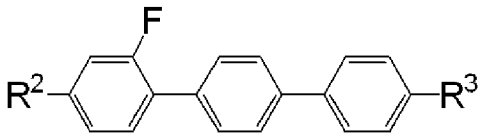

(2-3)

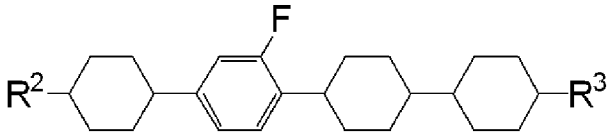

(2-4)

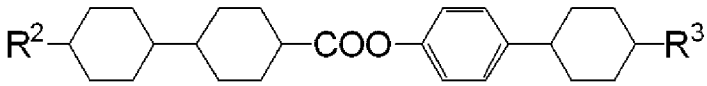

(2-5)

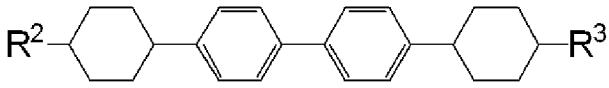

(2-6)

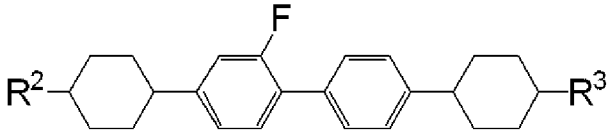

(2-7)

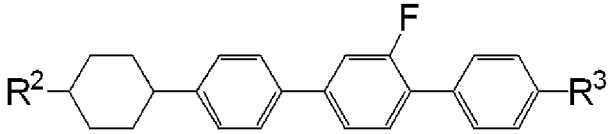

(2-8)


(2-9)


(2-10)


(2-11)


(2-12)


(2-13)

ここで、R^2およびR^3は独立して、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、炭素数２から１２のアルケニル、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２から１２のアルケニルである。

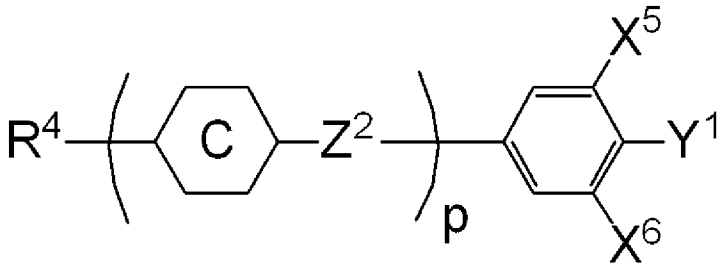
[請求項6] 第二成分が請求項５に記載の式（２－１）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１に記載の液晶組成物。

[請求項7] 第二成分が請求項５に記載の式（２－１３）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１に記載の液晶組成物。

[請求項8] 第二成分が、請求項５に記載の式（２－１）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、および請求項５に記載の式（２－７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物の混合物である請求項１に記載の液晶組成物。

[請求項9] 液晶組成物の全重量に基づいて、第一成分の割合が３重量％から２５重量％の範囲であり、第二成分の割合が２５重量％から９７重量％の範囲である請求項１から８のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[請求項10] 第三成分として式（３）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物をさらに含有する請求項１から９のいずれか１項に記載の液晶組成物。

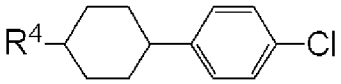


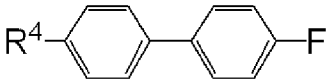
(3)

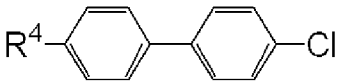
ここで、R^4は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルであり；環Ｃは、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１

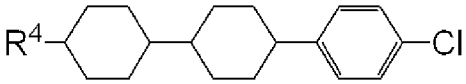
，４－フェニレン、３－フルオロ－１，４－フェニレン、３，５－ジフルオロ－１，４－フェニレン、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；Z^2は、単結合、ジフルオロメチレンオキシ、エチレン、またはカルボニルオキシであり；X^5およびX^6は独立して、水素またはフッ素であり；Y^1は、フッ素、塩素、またはトリフルオロメトキシであり；ｐは、１、２、３、または４である。

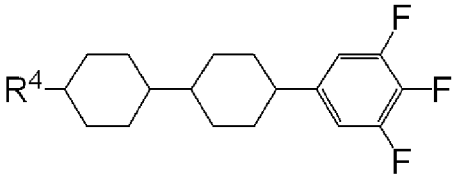
［請求項11］ 第三成分が式（３－１）から式（３－２４）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１０に記載の液晶組成物。

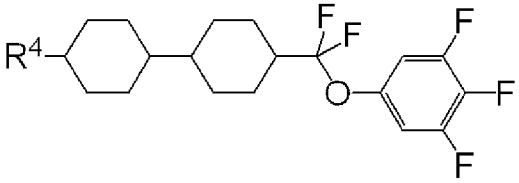

(3-1)

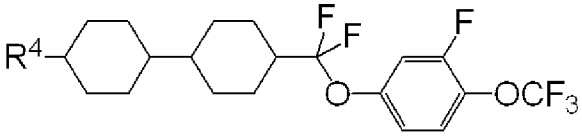

(3-2)

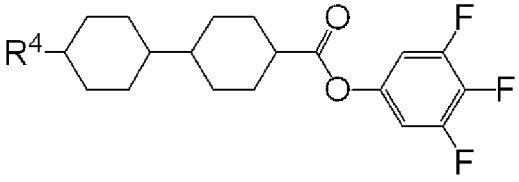

(3-3)

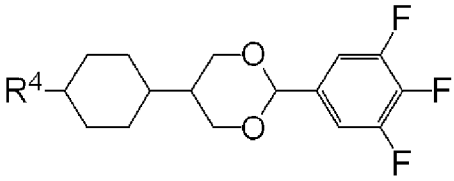

(3-4)

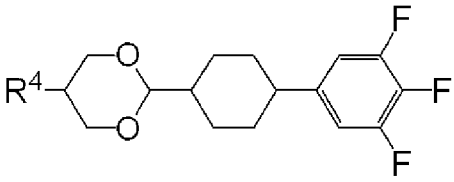

(3-5)

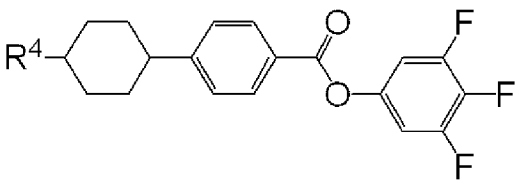

(3-6)

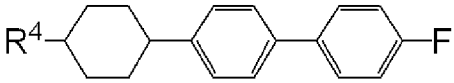

(3-7)

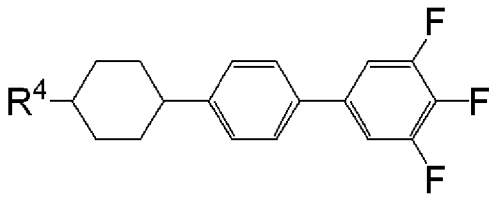

(3-8)

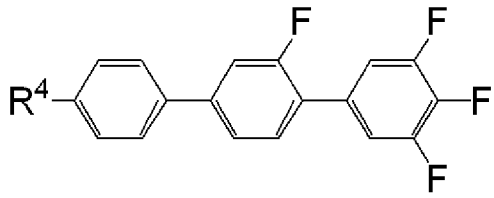

(3-9)

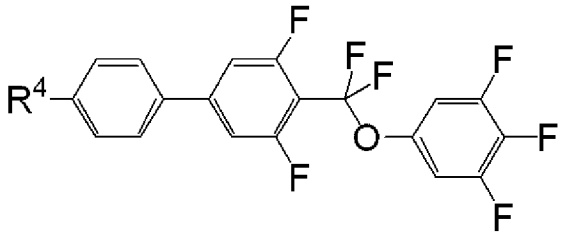

(3-10)

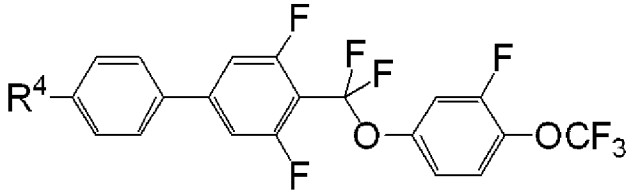

(3-11)

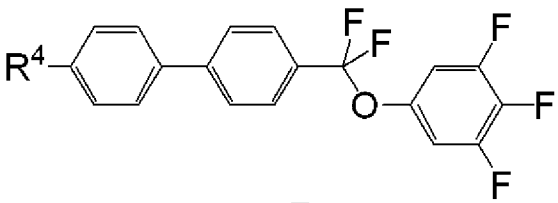

(3-12)

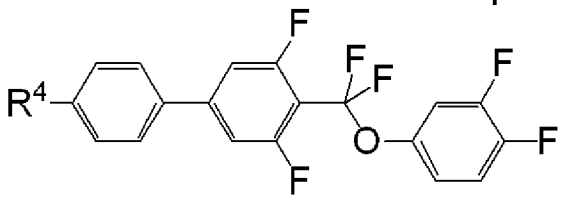

(3-13)

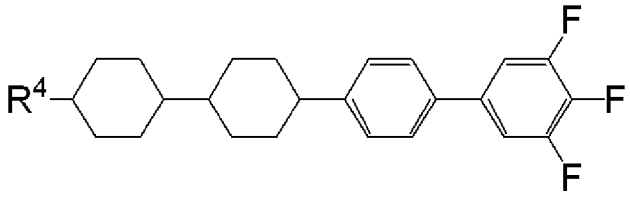

(3-14)

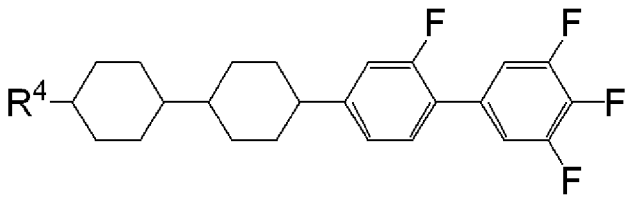

(3-15)

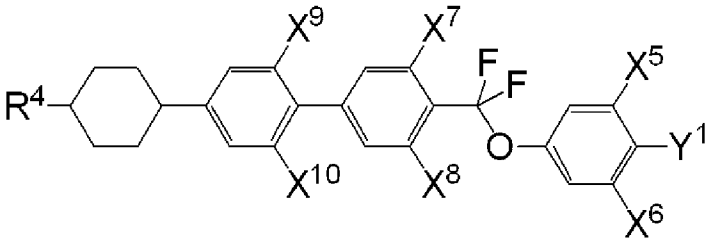

(3-16)


(3-17)

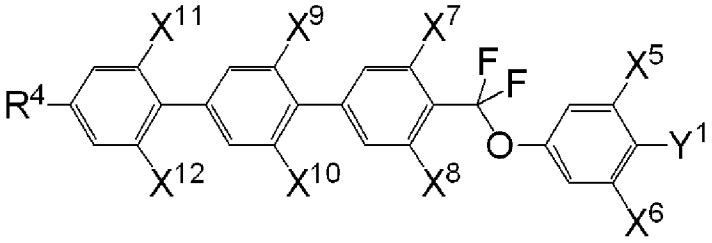

(3-18)


(3-19)

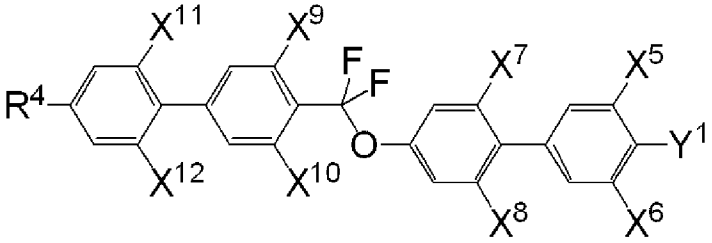

(3-20)



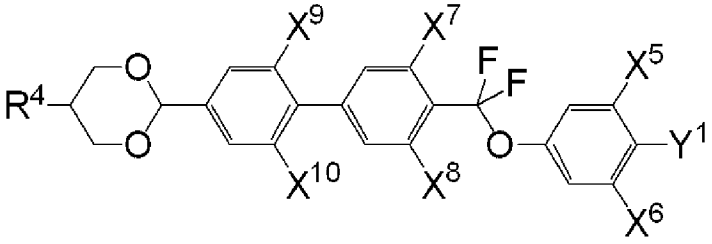
(3-21)



(3-22)



(3-23)



(3-24)

ここで、R^4は炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルであり；X^5、X^6、X^7、X^8、X^9、X^{10}、X^{11}、およびX^{12}は独立して、水素またはフッ素であり；Y^1は、フッ素、塩素、またはトリフルオロメトキシである。

［請求項12］ 第三成分が請求項１１に記載の式（３－１４）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１０に記載の液晶組成物。

［請求項13］ 第三成分が請求項１１に記載の式（３－１５）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１０に記載の液晶組成物。

[請求項14] 第三成分が請求項１１に記載の式（３－１７）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１０に記載の液晶組成物。

[請求項15] 第三成分が請求項１１に記載の式（３－２１）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１０に記載の液晶組成物。

[請求項16] 第三成分が請求項１１に記載の式（３－２２）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物である請求項１０に記載の液晶組成物。

[請求項17] 液晶組成物の全重量に基づいて、第三成分の割合が５重量％から６５重量％の範囲である請求項１０から１６のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[請求項18] ネマチック相の上限温度が７０℃以上であり、波長５８９ｎｍにおける光学異方性（２５℃）が０．０７以上であり、そして周波数１ｋＨｚにおける誘電率異方性（２５℃）が２以上である請求項１から１７のいずれか１項に記載の液晶組成物。

[請求項19] 請求項１から１８のいずれか１項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

[請求項20] 液晶表示素子の動作モードが、ＴＮモード、ＥＣＢモード、ＯＣＢモード、ＩＰＳモード、ＰＳＡモード、またはＦＰＡモードであり、液晶表示素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である請求項１９に記載の液晶表示素子。

[請求項21] 請求項１から１８のいずれか１項に記載の液晶組成物の液晶表示素子における使用。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2012/084032

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C09K19/42(2006.01)i, *C09K19/12*(2006.01)i, *C09K19/16*(2006.01)i, *C09K19/20*(2006.01)i, *C09K19/30*(2006.01)i, *C09K19/34*(2006.01)i, *G02F1/13*(2006.01)i

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)
C09K19/42, C09K19/12, C09K19/16, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/34, G02F1/13

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

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2013
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2013	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2013

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2011/099400 A1 (JNC Corp.), 18 August 2011 (18.08.2011), entire text (Family: none)	1-21
A	JP 2001-316346 A (Dainippon Ink and Chemicals, Inc.), 13 November 2001 (13.11.2001), entire text (Family: none)	1-21
A	JP 2008-037918 A (Chisso Corp.), 21 February 2008 (21.02.2008), entire text & US 2008/0029736 A1	1-21

☒ 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	Date of mailing of the international search report
07 February, 2013 (07.02.13)	19 February, 2013 (19.02.13)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2012/084032

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2004-182884 A (Chisso Corp.), 02 July 2004 (02.07.2004), entire text & US 2004/0108489 A1	1-21

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１２／０８４０３２

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C09K19/42(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/16(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i

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.　C09K19/42, C09K19/12, C09K19/16, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/34, G02F1/13

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	１９７１－２０１３年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１３年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１３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）

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 2011/099400 A1（ＪＮＣ株式会社）2011.08.18, 全文（ファミリーなし）	1-21
A	JP 2001-316346 A（大日本インキ化学工業株式会社）2001.11.13, 全文（ファミリーなし）	1-21
A	JP 2008-037918 A（チッソ株式会社）2008.02.21, 全文 & US 2008/0029736 A1	1-21

☑　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 ０７．０２．２０１３	国際調査報告の発送日 １９．０２．２０１３
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）　４Ｚ　４７５０ 吉田　邦久 電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３４８０

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	JP 2004-182884 A (チッソ株式会社) 2004.07.02, 全文 & US 2004/0108489 A1	1-21