

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6137419号
(P6137419)

(45) 発行日 平成29年5月31日 (2017.5.31)

(24) 登録日 平成29年5月12日 (2017.5.12)

(51) Int. Cl. F I
C09K 19/14 (2006.01) C O 9 K 19/14
C09K 19/42 (2006.01) C O 9 K 19/42
C09K 19/30 (2006.01) C O 9 K 19/30
C09K 19/20 (2006.01) C O 9 K 19/20
C09K 19/12 (2006.01) C O 9 K 19/12

請求項の数 14 (全 55 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2016-559667 (P2016-559667)
 (86) (22) 出願日 平成28年4月14日 (2016.4.14)
 (86) 国際出願番号 PCT/JP2016/061999
 (87) 国際公開番号 W02016/171064
 (87) 国際公開日 平成28年10月27日 (2016.10.27)
 審査請求日 平成28年9月28日 (2016.9.28)
 (31) 優先権主張番号 特願2015-89433 (P2015-89433)
 (32) 優先日 平成27年4月24日 (2015.4.24)
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)

早期審査対象出願

(73) 特許権者 000002886
 D I C 株式会社
 東京都板橋区坂下3丁目35番58号
 (74) 代理人 100124970
 弁理士 河野 通洋
 (74) 代理人 100159293
 弁理士 根岸 真
 (72) 発明者 須藤 豪
 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472-1
 D I C 株式会
 社 埼玉工場内
 (72) 発明者 平田 真一
 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472-1
 D I C 株式会
 社 埼玉工場内

最終頁に続く

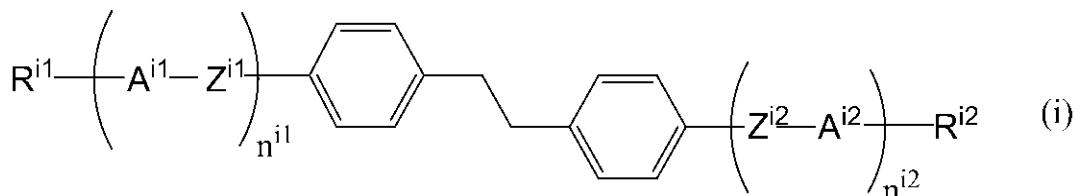
(54) 【発明の名称】 ネマチック液晶組成物及びこれを用いた液晶表示素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

一般式 (i)

【化1】

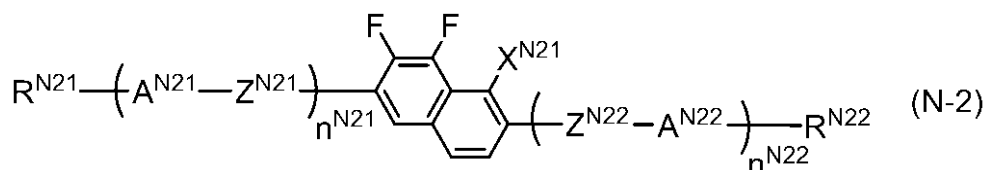
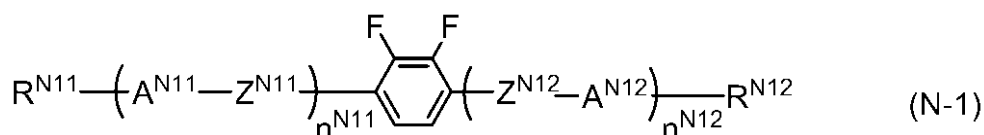


(式中、 R^{i1} 及び R^{i2} はそれぞれ独立して炭素原子数1から10のアルキル基を表し、 R^{i1} 及び R^{i2} 中の1個又は非隣接の2個以上の $-\text{CH}_2-$ はそれぞれ独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 又は $-\text{CO}-$ により置換されていても良く、また、 R^{i1} 及び R^{i2} 中に存在する1個又は2個以上の水素原子はそれぞれ独立してフッ素原子又は塩素原子に置換されていても良く、

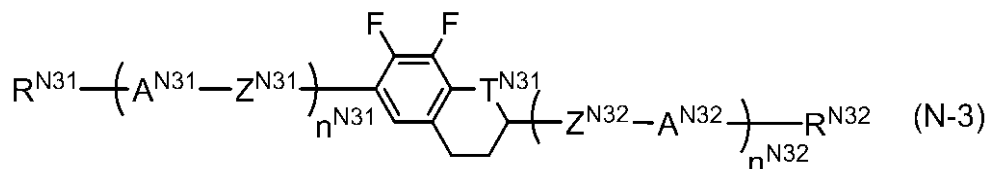
A^{i1} 及び A^{i2} はそれぞれ独立してトランス-1,4-シクロヘキシレン基、1,4-フェニレン基、2-フルオロ-1,4-フェニレン基、3-フルオロ-1,4-フェニレン基、3,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン基、1,4-シクロヘキセニレン基、1,4-ビスクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン-1,4-ジイル基、ナフタレン-2,6-ジイル基、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基又は1,2,3,4-

テトラヒドロナフタレン - 2 , 6 - ジイル基から選ばれる基を表し、
 Z^{i1} 及び Z^{i2} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C \equiv C-$ を表し、
 n^{i1} 及び n^{i2} はそれぞれ独立して 0、1 又は 2 を表し、 $n^{i1} + n^{i2}$ は 2 以上であるが、 n^{i1} が 2 であって A^{i1} 及び Z^{i1} が複数存在する場合は、複数の A^{i1} は同一であっても異なっているいてもよく、複数の Z^{i1} は同一であっても異なっているいてもよく、また、 n^{i2} が 2 であって A^{i2} 及び Z^{i2} が複数存在する場合は、複数の A^{i2} は同一であっても異なっているいてもよく、複数の Z^{i2} は同一であっても異なっているいてもよい。) で表される化合物を 1 種又は 2 種以上と、
 更に、一般式 (N - 1)、(N - 2) 及び (N - 3)

10



20



(式中、 R^{N11} 、 R^{N12} 、 R^{N21} 、 R^{N22} 、 R^{N31} 及び R^{N32} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 10 のアルキル基を表し、該アルキル基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の $-CH_2-$ はそれぞれ独立して $-CH=CH-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ によって置換されていてもよく、

30

A^{N11} 、 A^{N12} 、 A^{N21} 、 A^{N22} 、 A^{N31} 及び A^{N32} はそれぞれ独立して (a) 1, 4 - シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH_2-$ は又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ に置換されていてもよい。)

(b) 1, 4 - フェニレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH=$ は又は隣接していない 2 個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていてもよい。) 及び

(c) ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又はデカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基 (ナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基中に存在する 1 個の $-CH=$ は又は隣接していない 2 個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていてもよい。)

40

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a)、基 (b) 及び基 (c) はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良く、

Z^{N11} 、 Z^{N12} 、 Z^{N21} 、 Z^{N22} 、 Z^{N31} 及び Z^{N32} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C \equiv C-$ を表し、

X^{N21} は水素原子又はフッ素原子を表し、

T^{N31} は $-CH_2-$ は又は酸素原子を表し、

n^{N11} 、 n^{N12} 、 n^{N21} 、 n^{N22} 、 n^{N31} 及び n^{N32} はそれぞれ独立して

50

0, 1, 2 又は 3 を表すが、 $n^{N11} + n^{N12}$ 、 $n^{N21} + n^{N22}$ 及び $n^{N31} + n^{N32}$ はそれぞれ独立して 1、2 又は 3 であるが、 n^{N11} 及び / 又は n^{N12} が 2 又は 3 であって A^{N11} 、 A^{N12} 、 Z^{N11} 、 Z^{N12} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良く、 n^{N21} 及び / 又は n^{N22} が 2 又は 3 であって A^{N21} 、 A^{N22} 、 Z^{N21} 、 Z^{N22} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良く、 n^{N31} 及び / 又は n^{N32} が 2 又は 3 であって A^{N31} 、 A^{N32} 、 Z^{N31} 、 Z^{N32} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良い。))

で表される化合物から選ばれる化合物を 1 種又は 2 種以上含有する誘電率異方性が負の液晶組成物。

10

【請求項 2】

一般式 (i) において、 R^{i2} がメチル基である請求項 1 に記載の液晶組成物。

【請求項 3】

一般式 (i) において、 A^{i1} 及び A^{i2} がそれぞれ独立してトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基から選ばれる基である請求項 1 又は 2 に記載の液晶組成物。

【請求項 4】

一般式 (i) において、 n^{i1} が 2 であり、 n^{i2} が 0 である請求項 1 から 3 のいずれか一項に記載の液晶組成物。

20

【請求項 5】

一般式 (N - 1) において、 A^{N11} がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基 又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基であり、 Z^{N11} が - OCH₂ - 、 - CH₂O - 、 - CF₂O - 、 - OCF₂ - 、- CH₂CH₂ - 又は単結合であり、 n^{N11} が 1, 2 又は 3 を表し、 n^{N12} が 0 である請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の液晶組成物。

【請求項 6】

一般式 (N - 1) において、 A^{N11} 及び A^{N12} がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基 又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基であり、 Z^{N11} 及び Z^{N12} が - OCH₂ - 、 - CH₂O - 、 - CF₂O - 、 - OCF₂ - 、- CH₂CH₂ - 又は単結合であり、 n^{N11} 及び n^{N12} が 1 又は 2 である請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の液晶組成物。

30

【請求項 7】

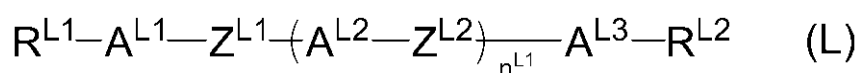
一般式 (N - 1)、(N - 2) 及び (N - 3) の含有量の総量が 10 から 90 質量%である請求項 1 から 6 のいずれか一項に記載の液晶組成物。

40

【請求項 8】

更に、一般式 (L)

【化 3】



(式中、 R^{L1} 及び R^{L2} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 10 のアルキル基を表し、該アルキル基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の - CH₂ - はそれぞれ独立して - CH = CH - 、 - C = C - 、 - O - 、 - CO - 、 - COO - 又は - OCO - によって置換されてい

50

てもよく、

n^{L1} は 0、1、2 又は 3 を表し、

A^{L1} 、 A^{L2} 及び A^{L3} はそれぞれ独立して

(a) 1, 4 - シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH_2-$ - 又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ に置換されていてもよい。)

(b) 1, 4 - フェニレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH=$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていてもよい。) 及び

(c) ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又はデカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基 (ナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基中に存在する 1 個の $-CH=$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていてもよい。)

10

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a)、基 (b) 及び基 (c) はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良く、

Z^{L1} 及び Z^{L2} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C \equiv C-$ を表し、

n^{L1} が 2 又は 3 であって A^{L2} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良く、 n^{L1} が 2 又は 3 であって Z^{L2} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良いが、一般式 (i) で表される化合物、一般式 (N - 1)、一般式 (N - 2) 及び一般式 (N - 3) で表される化合物を除く。)

20

で表される化合物から選ばれる化合物を 1 種又は 2 種以上含有する請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の液晶組成物。

【請求項 9】

重合性化合物を 1 種又は 2 種以上含有する請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

【請求項 10】

25 における誘電率異方性 () が - 2.0 から - 8.0 の範囲であり、25 における屈折率異方性 (n) が 0.08 から 0.14 の範囲であり、25 における粘度 () が 10 から 50 mPa · s の範囲であり、25 における回転粘性 (γ_1) が 60 から 2000 mPa · s の範囲であり、ネマチック相 - 等方性液体相転移温度 (T_{NI}) が 60 から 120 の範囲であり、弾性定数 (K_{33}) が 10.0 から 20.0 の範囲である請求項 1 から 9 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

30

【請求項 11】

請求項 1 から 10 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を用いた液晶表示素子。

【請求項 12】

請求項 1 から 10 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を用いたアクティブマトリックス駆動用液晶表示素子。

【請求項 13】

請求項 1 から 10 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を用いた VA モード、PSA モード、PSVA モード、IPS モード、FFS モード又は ECB モード用液晶表示素子。

40

【請求項 14】

請求項 1 に記載の一般式 (i) において、 R^{i1} 及び R^{i2} がメチル基である化合物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は液晶表示材料として有用な誘電率異方性 () が負の値を示すネマチック液晶組成物及びこれを用いた液晶表示素子に関する。

【背景技術】

【0002】

50

液晶表示素子は、時計、電卓をはじめとして、家庭用各種電気機器、測定機器、自動車用パネル、ワープロ、電子手帳、プリンター、コンピューター、テレビ等に用いられている。液晶表示方式としては、その代表的なものにＴＮ（捩れネマチック）型、ＳＴＮ（超捩れネマチック）型、ＤＳ（動的光散乱）型、ＧＨ（ゲスト・ホスト）型、ＩＰＳ（インプレーンスイッチング）型、ＯＣＢ（光学補償複屈折）型、ＥＣＢ（電圧制御複屈折）型、ＶＡ（垂直配向）型、ＣＳＨ（カラスーパーホメオトロピック）型、あるいはＦＬＣ（強誘電性液晶）等を挙げることができる。また駆動方式としてもスタティック駆動、マルチプレックス駆動、単純マトリックス方式、ＴＦＴ（薄膜トランジスタ）やＴＦＤ（薄膜ダイオード）等により駆動されるアクティブマトリックス（ＡＭ）方式を挙げることができる。

10

【０００３】

これらの表示方式において、ＩＰＳ型、ＥＣＢ型、ＶＡ型、あるいはＣＳＨ型等は、が負の値を示す液晶材料を用いるという特徴を有する。これらの中で特にＡＭ駆動によるＶＡ型表示方式は、高速で広視野角の要求される表示素子、例えばテレビ等の用途に使用されている。

ＶＡ型等の表示方式に用いられるネマチック液晶組成物には、３Ｄないし高精細に対応した高速応答が要求される。すなわち、液晶組成物の回転粘性（ γ_1 ）が小さく、弾性定数（ K_{33} ）が大きく、これらから求められる γ_1 / K_{33} の値が十分に小さいことが重要である。

また、屈折率異方性（ n ）とセルギャップ（ d ）との積である $n \times d$ の設定から、応答速度改良のための小さいセルギャップに合わせて、液晶材料の n を適当に大きな範囲に調節する必要がある。加えて、液晶組成物の γ_1 を小さく抑えることが要求される。

20

【０００４】

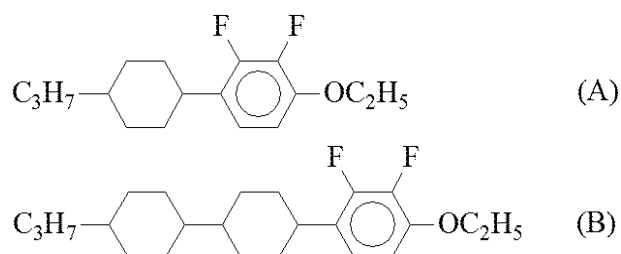
これまでは、が負でその絶対値の大きな化合物を種々検討することにより液晶組成物の特性が改良されてきた。

【０００５】

が負の液晶材料として、以下のような２，３－ジフルオロフェニレン骨格を有する液晶化合物（Ａ）及び（Ｂ）（特許文献１参照）を用いた液晶組成物が開示されているが、十分に小さな γ_1 / K_{33} は得られていなかった。

【０００６】

【化１】



30

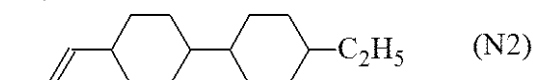
【０００７】

また、がほぼゼロな化合物の組み合わせとして、液晶化合物（Ｎ２）及び一般式（Ｎ３）で表される化合物を用いることにより γ_1 / K_{33} の値を小さくすることができるものの（特許文献２参照）、更なる応答速度の改良が求められていた。

40

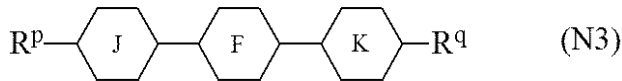
【０００８】

【化２】



【０００９】

【化 3】



【0010】

(式中、 R^P 及び R^Q はそれぞれ独立して炭素原子数 1 から 10 のアルキル基を表し、環 J、環 F 及び環 K はそれぞれ独立してトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基又は 1, 4 - フェニレン基を表す。)

また、特許文献 3 において、(式 1) で示される指数が大きい液晶材料を使用することでホメオトロピック液晶セルの応答速度を向上させることが開示されているが、十分とは言えるものではなかった。

10

【0011】

【数 1】

$$\text{FoM} = K_{33} \cdot \Delta n^2 / \gamma_1 \quad (\text{式 1})$$

 K_{33} : 弾性定数 Δn : 屈折率異方性 γ_1 : 回転粘性

【0012】

以上のことから、高速応答が要求される液晶テレビに用いられる液晶組成物においては、ネマチック相 - 等方性液体相転移温度 (T_{NI}) が高く、屈折率異方性 (Δn) を大きく、回転粘性 (γ_1) を小さく、弾性定数 (K_{33}) を大きく、更に、電圧保持率 (VHR) が高いことが重要であり、また、これを用いたときに滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の不良がない、表示品位の優れた応答速度の液晶表示素子が求められていた。

20

【先行技術文献】

【特許文献】

【0013】

【特許文献 1】特開平 8 - 104869 号

【特許文献 2】特願 2013 - 208201 号

【特許文献 3】特開 2006 - 301643 号

【発明の概要】

30

【発明が解決しようとする課題】

【0014】

本発明が解決しようとする課題は、ネマチック相 - 等方性液体相転移温度 (T_{NI}) が高く、屈折率異方性 (Δn) が大きく、回転粘性 (γ_1) が小さく、弾性定数 (K_{33}) が大きく、更に、電圧保持率 (VHR) が高く、負の誘電率異方性 (ϵ_a) を有する液晶組成物を提供し、更にこれを用いたときに滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がない又は抑制された、表示品位の優れた応答速度の速い液晶表示素子を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

【0015】

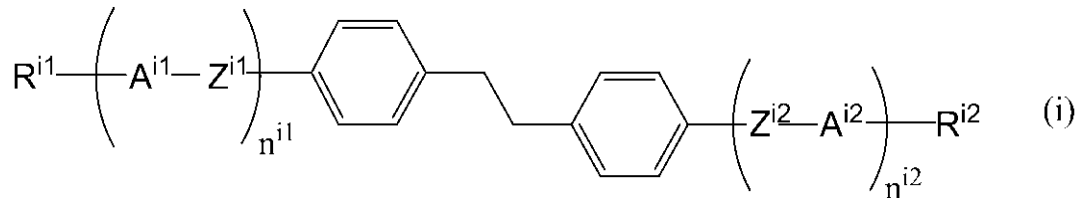
40

本発明者は、特定の構造を有する液晶化合物を含有する液晶組成物により、前記課題を解決することができることを見出し、本発明を完成するに至った。

すなわち、本発明の液晶組成物は、一般式 (i)

【0016】

【化 4】



【0017】

(式中、 R^{i1} 及び R^{i2} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 から 10 のアルキル基を表し、 R^{i1} 及び R^{i2} 中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の $-\text{CH}_2-$ はそれぞれ独立して $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 又は $-\text{CO}-$ により置換されていても良く、また、 R^{i1} 及び R^{i2} 中に存在する 1 個又は 2 個以上の水素原子はそれぞれ独立してフッ素原子又は塩素原子に置換されていても良く、

A^{i1} 及び A^{i2} はそれぞれ独立してトランス-1,4-シクロヘキシレン基、1,4-フェニレン基、2-フルオロ-1,4-フェニレン基、3-フルオロ-1,4-フェニレン基、3,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン基、1,4-シクロヘキセニレン基、1,4-ビスクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン-1,4-ジイル基、ナフタレン-2,6-ジイル基、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基又は 1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基から選ばれる基を表し、

Z^{i1} 及び Z^{i2} はそれぞれ独立して単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{CH}=\text{N}-\text{N}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 又は $-\text{C}=\text{C}-$ を表し、

n^{i1} 及び n^{i2} はそれぞれ独立して 0、1 又は 2 を表し、 $n^{i1} + n^{i2}$ は 1 以上であるが、 n^{i1} が 2 であって A^{i1} 及び Z^{i1} が複数存在する場合は、複数の A^{i1} は同一であっても異なってもよく、複数の Z^{i1} は同一であっても異なってもよく、また、 n^{i2} が 2 であって A^{i2} 及び Z^{i2} が複数存在する場合は、複数の A^{i2} は同一であっても異なってもよく、複数の Z^{i2} は同一であっても異なってもよい。) で表される化合物を 1 種又は 2 種以上含有する誘電率異方性が負の液晶組成物を提供し、

また、これを用いた液晶表示素子を提供する。

【発明の効果】

【0018】

本発明の液晶組成物は、屈折率異方性 (n) が大きく、回転粘性 (γ_1) が小さく、弾性定数 (K_{33}) が大きく、更に、電圧保持率 (VHR) が高く、負の誘電率異方性 (ϵ_a) を有し、更にこれを用いた液晶表示素子は、滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がない又は抑制された、表示品位の優れた応答速度の速いものである。

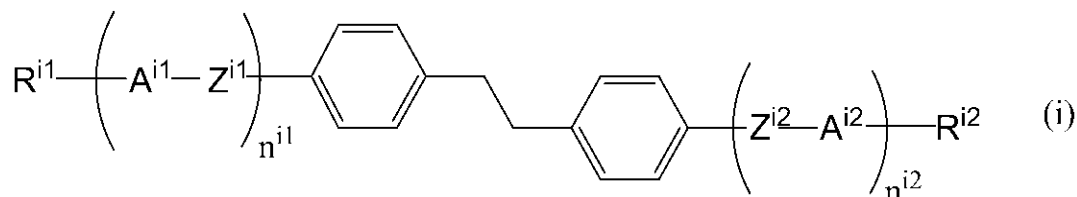
【発明を実施するための形態】

【0019】

本発明の液晶組成物は、一般式 (i) で表される化合物を 1 種又は 2 種以上含有する。

【0020】

【化 5】



【0021】

一般式 (i) において、 R^{i1} は粘度を低下させる為には、炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 8 のアルケニル基であることが好ましく、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基であることが好ましく、炭素原子数 1 ~ 4

10

20

30

40

50

のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 4 のアルケニル基であることが好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基であることが更に好ましく、炭素原子数 1 ~ 2 のアルキル基であることが更に好ましく、炭素原子数 1 のメチル基であることが特に好ましい。R^{i 1} は粘度を低下させるためには、炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基であることが好ましく、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基であることが好ましく、炭素原子数 1 ~ 4 のアルキル基であることが好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基であることが更に好ましく、炭素原子数 1 のメチル基であることが特に好ましい。また、R^{i 1} 及び R^{i 2} は直鎖状であることが好ましい。更に詳述すると、 η_{sp}/K_3 の値を小さくするためには、R^{i 1} 及び R^{i 2} のうち少なくともいずれか 1 つ以上がメチル基であることが好ましく、R^{i 2} がメチル基を表すことがより好ましく、R^{i 1} 及び R^{i 2} が共にメチル基であることが特に好ましい。また、他の液晶成分との混和性を上昇させるためには、R^{i 1} 及び R^{i 2} が異なることが好ましい。

【0022】

A^{i 1} 及び A^{i 2} はそれぞれ独立して、トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが好ましい。A^{i 1} 及び A^{i 2} はそれぞれ独立して、粘度を低下させるためにはトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、無置換の 1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが好ましく、トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基であることが更に好ましい。他の液晶成分との混和性を向上させるためには、トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが好ましい。T_{NI} を上昇させるためには、無置換の 1, 4 - フェニレン基、無置換のナフタレン - 2, 6 - ジイル基であることが好ましい。液晶表示素子とした際の長期信頼性を向上させるには窒素原子を含有しないことが好ましい。粘度、他の液晶成分との混和性、及び T_{NI} をバランスよく向上させる観点からは、A^{i 1} 又は A^{i 2} の少なくとも 1 つ以上がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基であり、且つ、A^{i 1} 又は A^{i 2} の少なくとも 1 つ以上が無置換の 1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが好ましい。より具体的には、n^{i 1} + n^{i 2} が 1 を表す場合、A^{i 1} 又は A^{i 2} のいずれかがトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基又は無置換の 1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが好ましく、無置換の 1, 4 - フェニレン基であることが特に好ましい。n^{i 1} + n^{i 2} が 2 を表す場合、A^{i 1} 又は A^{i 2} のいずれか一方がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基であり、且つ A^{i 1} 又は A^{i 2} のいずれか一方が無置換の 1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが好ましく、A^{i 1} がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基であり、且つ A^{i 2} が無置換の 1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることがより好ましい。また、n^{i 1} + n^{i 2} が 3 を表す場合、A^{i 1} 又は A^{i 2} の少なくとも 1 つ以上がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基であることが好ましく、A^{i 1} 又は A^{i 2} の少なくとも 1 つ以上が 2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが好ましい。

Z^{i 1} 及び Z^{i 2} はそれぞれ独立して、単結合、- OCH₂ -、- CH₂O -、- CF₂O -、- OCF₂ -、- CH₂CH₂ - 又は - CF₂CF₂ - であることが好ましく、単結合、- CH₂O -、- CF₂O -、- CH₂CH₂ - 又は - CF₂CF₂ が好ましく、単結合、- CH₂O - 又は - CH₂CH₂ - が更に好ましく、単結合が特に好ましい。

【0023】

n^{i 1} 及び n^{i 2} はそれぞれ独立して粘度を重視する場合には 0 又は 1 であることが好ましく、T_{NI} を重視する場合には 1 又は 2 であることが好ましい。他の液晶成分との混和性を高くする場合には、0 又は 1 であることが好ましい。より詳細には、n^{i 1} が 1 又は 2 であり、n^{i 2} が 0 であることが好ましい。

【 0 0 2 4 】

$n^{i1} + n^{i2}$ については、粘度を重視する場合には 1 又は 2 であることが好ましく、 T_{NI} を重視する場合には 3 又は 4 であることが好ましく、3 であることがより好ましく、他の液晶成分との混和性を高くするためには 1 又は 2 であることが好ましい。粘度、 T_{NI} 、他の液晶成分との混和性をバランスよく向上させる観点からは、 $n^{i1} + n^{i2}$ は 1 又は 2 であることが好ましく、粘度をより小さくすることを重視する場合は $n^{i1} + n^{i2}$ は 1 であることが好ましく、 T_{NI} 、 n をより大きくすることを重視する場合は $n^{i1} + n^{i2}$ は 1 であることが好ましい。 $n^{i1} + n^{i2}$ が 2 である場合、 n^{i1} が 2 であり、 n^{i2} が 0 であることが好ましい。 $n^{i1} + n^{i2}$ が 3 である場合、 n^{i1} が 2 であり、 n^{i2} が 1、又は n^{i1} が 1 であり、 n^{i2} が 2 であることが好ましい。 $n^{i1} + n^{i2}$ が 4 である場合、 n^{i1} が 2 であり、 n^{i2} が 2 であることが好ましく、 n^{i1} が 3 であり、 n^{i2} が 1、又は n^{i1} が 1 であり、 n^{i2} が 3 であることが好ましい。

10

【 0 0 2 5 】

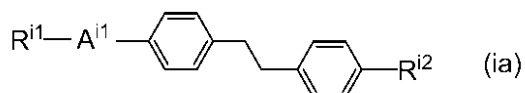
好ましい化合物の具体例を以下に示すが、本発明はこれらに限定されるものではない。

【 0 0 2 6 】

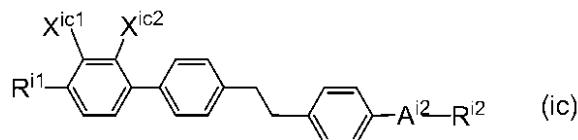
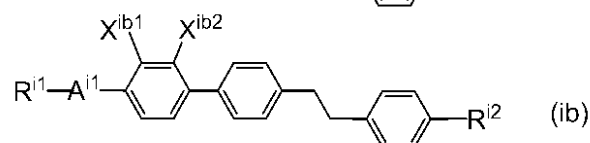
一般式 (i) の中では以下の一般式 (i a) ~ 一般式 (i d) で表される各化合物が好ましい。

【 0 0 2 7 】

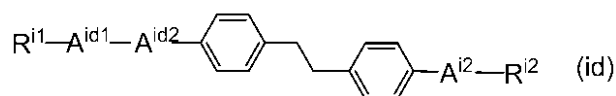
【 化 6 】



20



30



【 0 0 2 8 】

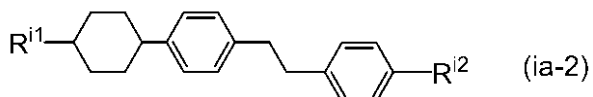
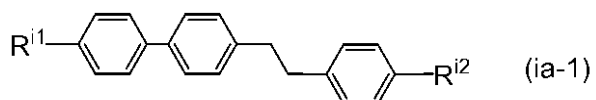
(式中、 R^{i1} 、 R^{i2} 、 A^{i1} 及び A^{i2} は各々独立して前記一般式 (i) における R^{i1} 、 R^{i2} 、 A^{i1} 及び A^{i2} と同じ意味を表し、 A^{id1} 及び A^{id2} はそれぞれ独立して前記一般式 (i) における A^{i1} と同じ意味を表し、 X^{ib1} 、 X^{ib2} 、 X^{ic1} 及び X^{ic2} はそれぞれ独立して水素原子又はフッ素原子を表すが、 X^{ib1} 及び X^{ib2} がともにフッ素原子を表すことはなく、 X^{ic1} 及び X^{ic2} がともにフッ素原子を表すことはない。)

40

一般式 (i a) としては、以下の一般式 (i a - 1) 及び一般式 (i a - 2) で表される化合物が好ましい。

【 0 0 2 9 】

【化7】



【0030】

(式中、 R^{i1} 及び R^{i2} はそれぞれ独立して前記一般式 (i) における、 R^{i1} 及び R^{i2} と同じ意味を表す。)

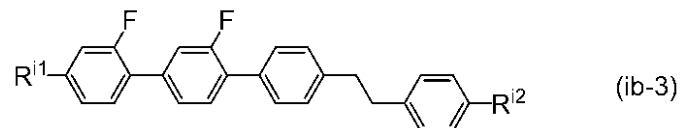
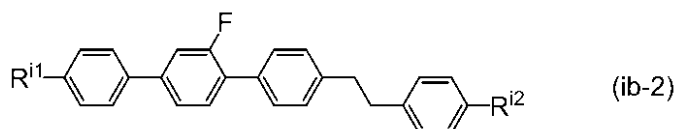
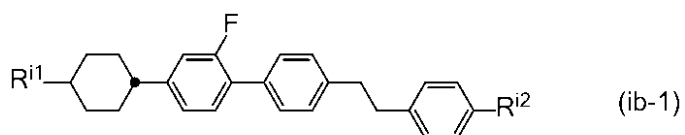
特に、一般式 (ia-1) が好ましい。

【0031】

一般式 (ib) としては、以下の一般式 (ib-1) ~ 一般式 (ib-3) で表される化合物が好ましい。

【0032】

【化8】



【0033】

(式中、 R^{i1} 及び R^{i2} はそれぞれ独立して前記一般式 (i) における、 R^{i1} 及び R^{i2} と同じ意味を表す。)

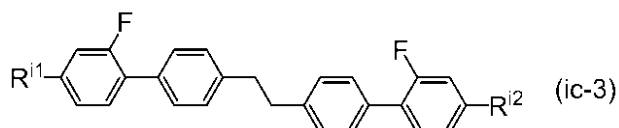
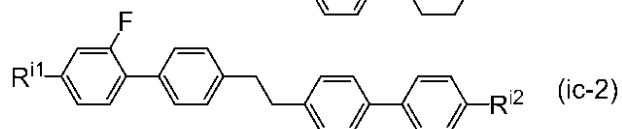
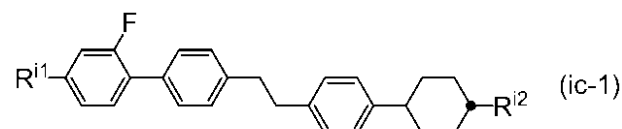
特に、一般式 (ib-1) 及び一般式 (ib-2) が好ましい。

【0034】

一般式 (ic) としては、以下の一般式 (ic-1) ~ 一般式 (ic-3) で表される化合物が好ましい。

【0035】

【化9】



【0036】

10

20

30

40

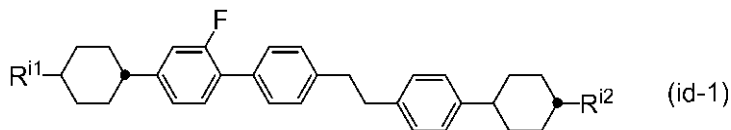
50

(式中、 R^{i1} 及び R^{i2} はそれぞれ独立して前記一般式 (i) における、 R^{i1} 及び R^{i2} と同じ意味を表す。)

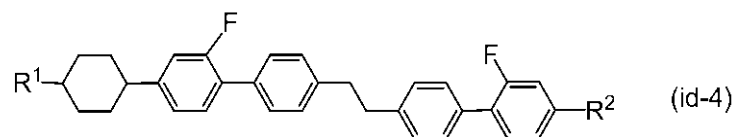
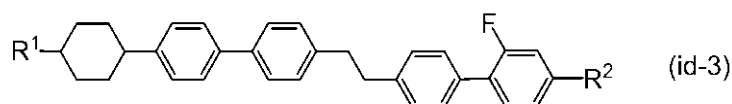
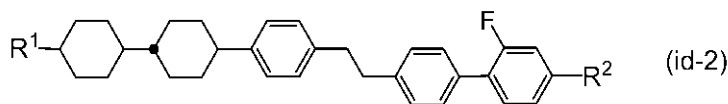
一般式 (id) としては、以下の一般式 (id-1) ~ 一般式 (id-4) で表される化合物が好ましい。

【0037】

【化10】



10



20

【0038】

(式中、 R^{i1} 及び R^{i2} はそれぞれ独立して前記一般式 (i) における、 R^{i1} 及び R^{i2} と同じ意味を表す。)

特に、一般式 (id-1)、(id-2) 及び (id-4) が好ましい。

【0039】

本発明の液晶組成物において一般式 (i) で表される化合物の含有量が少ないとその効果が現れないため、組成物中に下限値として、1質量% (以下組成物中の%は質量%を表す。) 以上含有することが好ましく、2%以上含有することが好ましく、3%以上含有することが好ましく、5%以上含有することが好ましく、8%以上含有することが好ましく、10%以上含有することが好ましい。又、含有量が多いと析出等の問題を引き起こすため、上限値としては、70%以下含有することが好ましく、60%以下含有することがより好ましく、50%以下含有することが好ましく、40%以下含有することが好ましく、35%以下含有することが好ましく、30%以下含有することが好ましく、28%以下含有することが好ましく、25%以下含有することが好ましく、23%以下含有することが好ましく、20%以下含有することが好ましく、18%以下含有することが好ましく、15%以下含有することが好ましく、13%以下含有することが好ましい。一般式 (i) で表される化合物は1種のみで使用することもできるが、2種以上の化合物を同時に使用してもよい。

30

【0040】

一般式 (i) で表される化合物を2種以上同時に使用する場合には、一般式 (ib-1) 及び/又は一般式 (ib-2) で表される化合物から選択することが好ましい。

【0041】

なお、一般式 (i) で表される化合物において、ヘテロ原子同士が直接結合する構造となることはない。

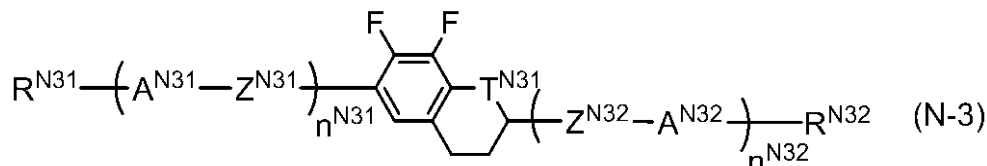
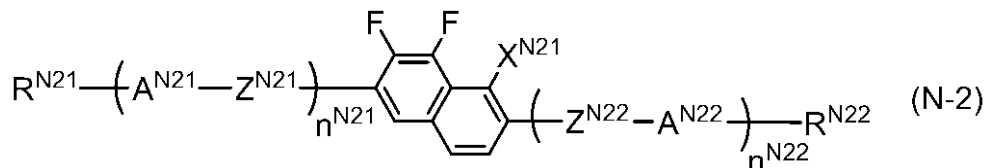
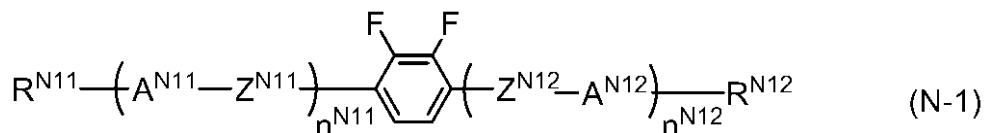
【0042】

本発明の液晶組成物は、更に、一般式 (N-1)、(N-2) 及び (N-3)

【0043】

40

【化 1 1】



【 0 0 4 4 】

(式中、 R^{N11} 、 R^{N12} 、 R^{N21} 、 R^{N22} 、 R^{N31} 及び R^{N32} はそれぞれ独立して炭素原子数1～10のアルキル基を表し、該アルキル基中の1個又は非隣接の2個以上の $-CH_2-$ はそれぞれ独立して $-CH=CH-$ 、 $-C=C-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ によって置換されていてもよく、

A^{N11} 、 A^{N12} 、 A^{N21} 、 A^{N22} 、 A^{N31} 及び A^{N32} はそれぞれ独立して (a) 1,4-シクロヘキシレン基(この基中に存在する1個の $-CH_2-$ 又は隣接していない2個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ に置換されていてもよい。)

(b) 1,4-フェニレン基(この基中に存在する1個の $-CH=$ 又は隣接していない2個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていてもよい。)及び

(c) ナフタレン-2,6-ジイル基、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基又はデカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基(ナフタレン-2,6-ジイル基又は1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基中に存在する1個の $-CH=$ 又は隣接していない2個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていてもよい。)

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基(a)、基(b)及び基(c)はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていてもよく、

Z^{N11} 、 Z^{N12} 、 Z^{N21} 、 Z^{N22} 、 Z^{N31} 及び Z^{N32} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C=C-$ を表し、

X^{N21} は水素原子又はフッ素原子を表し、

T^{N31} は $-CH_2-$ 又は酸素原子を表し、

n^{N11} 、 n^{N12} 、 n^{N21} 、 n^{N22} 、 n^{N31} 及び n^{N32} はそれぞれ独立して0,1,2又は3を表すが、 $n^{N11}+n^{N12}$ 、 $n^{N21}+n^{N22}$ 及び $n^{N31}+n^{N32}$ はそれぞれ独立して1,2又は3であるが、 n^{N11} 及び/又は n^{N12} が2又は3であって A^{N11} 、 A^{N12} 、 Z^{N11} 、 Z^{N12} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なってもよく、 n^{N21} 及び/又は n^{N22} が2又は3であって A^{N21} 、 A^{N22} 、 Z^{N21} 、 Z^{N22} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なってもよく、 n^{N31} 及び/又は n^{N32} が2又は3であって A^{N31} 、 A^{N32} 、 Z^{N31} 、 Z^{N32} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なってもよい。)

で表される化合物から選ばれる化合物を1種又は2種以上含有することが好ましい。

【 0 0 4 5 】

10

20

30

40

50

一般式 (N - 1)、(N - 2) 及び (N - 3) で表される化合物は、が負でその絶対値が 3 よりも大きな化合物であることが好ましい。

【0046】

一般式 (N - 1)、(N - 2) 及び (N - 3) 中、 R^{N11} 、 R^{N12} 、 R^{N21} 、 R^{N22} 、 R^{N31} 及び R^{N32} はそれぞれ独立して、炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 8 のアルコキシ基、炭素原子数 2 ~ 8 のアルケニル基又は炭素原子数 2 ~ 8 のアルケニルオキシ基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 5 のアルコキシ基、炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニルオキシ基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が更に好ましく、炭素原子数 2 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 3 のアルケニル基が更に好ましく、炭素原子数 3 のアルケニル基 (プロペニル基) が特に好ましい。

10

【0047】

また、それが結合する環構造がフェニル基 (芳香族) である場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、それが結合する環構造がシクロヘキサン、ピラン及びジオキササンなどの飽和した環構造の場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましい。ナマチック相を安定化させるためには炭素原子及び存在する場合酸素原子の合計が 5 以下であることが好ましく、直鎖状であることが好ましい。

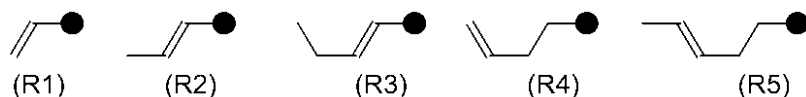
20

【0048】

アルケニル基としては、式 (R1) から式 (R5) のいずれかで表される基から選ばれることが好ましい。(各式中の黒点は環構造中の炭素原子を表す。)

【0049】

【化12】



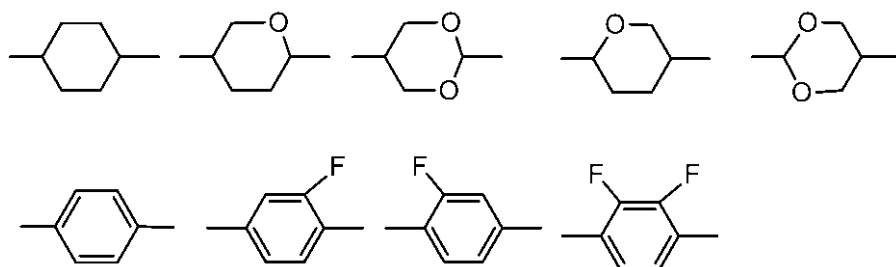
【0050】

A^{N11} 、 A^{N12} 、 A^{N21} 、 A^{N22} 、 A^{N31} 及び A^{N32} はそれぞれ独立して n を大きくすることが求められる場合には芳香族であることが好ましく、応答速度を改善するためには脂肪族であることが好ましく、トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキセニレン基、1, 4 - ビシクロ [2.2.2] オクチレン基、ピペリジン - 1, 4 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基を表すことが好ましく、下記の構造を表すことがより好ましく、

30

【0051】

【化13】



40

【0052】

トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基又は 1, 4 - フェニレン基を表すことがより好ましい。

50

【 0 0 5 3 】

Z^{N11} 、 Z^{N12} 、 Z^{N21} 、 Z^{N22} 、 Z^{N31} 及び Z^{N32} はそれぞれ独立して -CH₂O-、-CF₂O-、-CH₂CH₂-、-CF₂CF₂- 又は単結合を表すことが好ましく、-CH₂O-、-CH₂CH₂- 又は単結合が更に好ましく、-CH₂O- 又は単結合が特に好ましい。

【 0 0 5 4 】

X^{N21} はフッ素原子が好ましい。

【 0 0 5 5 】

T^{N31} は酸素原子が好ましい。

【 0 0 5 6 】

$n^{N11} + n^{N12}$ 、 $n^{N21} + n^{N22}$ 及び $n^{N31} + n^{N32}$ は 1 又は 2 が好ましく、 n^{N11} が 1 であり n^{N12} が 0 である組み合わせ、 n^{N11} が 2 であり n^{N12} が 0 である組み合わせ、 n^{N11} が 1 であり n^{N12} が 1 である組み合わせ、 n^{N11} が 2 であり n^{N12} が 1 である組み合わせ、 n^{N21} が 1 であり n^{N22} が 0 である組み合わせ、 n^{N21} が 2 であり n^{N22} が 0 である組み合わせ、 n^{N31} が 1 であり n^{N32} が 0 である組み合わせ、 n^{N31} が 2 であり n^{N32} が 0 である組み合わせ、が好ましい。

【 0 0 5 7 】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1 % であり、10 % であり、20 % であり、30 % であり、40 % であり、50 % であり、55 % であり、60 % であり、65 % であり、70 % であり、75 % であり、80 % である。好ましい含有量の上限値は、95 % であり、85 % であり、75 % であり、65 % であり、55 % であり、45 % であり、35 % であり、25 % であり、20 % である。

【 0 0 5 8 】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 2) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1 % であり、10 % であり、20 % であり、30 % であり、40 % であり、50 % であり、55 % であり、60 % であり、65 % であり、70 % であり、75 % であり、80 % である。好ましい含有量の上限値は、95 % であり、85 % であり、75 % であり、65 % であり、55 % であり、45 % であり、35 % であり、25 % であり、20 % である。

【 0 0 5 9 】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 3) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1 % であり、10 % であり、20 % であり、30 % であり、40 % であり、50 % であり、55 % であり、60 % であり、65 % であり、70 % であり、75 % であり、80 % である。好ましい含有量の上限値は、95 % であり、85 % であり、75 % であり、65 % であり、55 % であり、45 % であり、35 % であり、25 % であり、20 % である。

【 0 0 6 0 】

本発明の組成物の総量に対しての一般式 (N - 1)、(N - 2) 及び (N - 3) の含有量の総量が 10 から 90 質量 % であることが好ましく、20 から 80 質量 % が更に好ましく、30 から 70 質量 % が特に好ましい。

【 0 0 6 1 】

本発明の組成物の粘度を低く保ち、応答速度が速い組成物が必要な場合は上記の下限値が低く上限値が低いことが好ましい。さらに、本発明の組成物の T_{NI} を高く保ち、温度安定性の良い組成物が必要な場合は上記の下限値が低く上限値が低いことが好ましい。また、駆動電圧を低く保つために誘電率異方性を大きくしたいときは、上記の下限値を高く上限値が高いことが好ましい。

【 0 0 6 2 】

一般式 (N - 1) で表される化合物は、 A^{N11} がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1

10

20

30

40

50

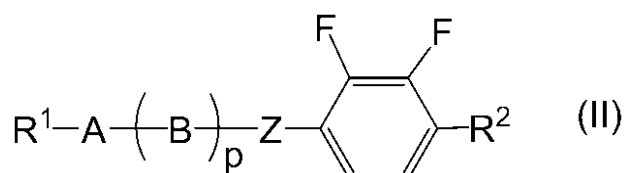
, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキセニレン基、1, 4 - ビシクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン - 1, 4 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基であり、 Z^{N-1-1} が - OCH₂ - 、 - CH₂O - 、 - CF₂O - 、 - OCF₂ - 、 - CH₂CH₂ - 、 - CF₂CF₂ - 又は単結合であり、 n^{N-1-1} が1, 2又は3を表し、 n^{N-1-2} が0である。

【0063】

一般式(N-1)で表される化合物は、一般式(II)で表される化合物であることが好ましい。

【0064】

【化14】



【0065】

(式中、 R^1 及び R^2 は、それぞれ独立して炭素原子数1から10のアルキル基、炭素原子数1から10のアルコキシル基、炭素原子数2から10のアルケニル基又は炭素原子数2から10のアルケニルオキシ基を表し、 R^1 及び R^2 中に存在する1個の - CH₂ - 又は隣接していない2個以上の - CH₂ - はそれぞれ独立して - O - 及び / 又は - S - に置換されても良い。A 及び B は、それぞれ独立してトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキセニレン基、1, 4 - ビシクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン - 1, 4 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基を表す。p は、0、1又は2を表す。Z は、- OCH₂ - 、 - CH₂O - 、 - CF₂O - 、 - OCF₂ - 、 - CH₂CH₂ - 、 - CF₂CF₂ - 又は単結合を表す。

一般式(II)中の R^1 及び R^2 は、それぞれ独立的に直鎖状の炭素原子数1から5のアルキル基、炭素原子数1から5のアルコキシル基、炭素原子数2から5のアルケニル基又は炭素原子数2から5のアルケニルオキシ基であることが更に好ましく、 R^1 は炭素原子数1から5のアルキル基又は炭素原子数2から5のアルケニル基、 R^2 は炭素原子数1から5のアルコキシル基であることが特に好ましい。

【0066】

一般式(II)中の A 及び B は、それぞれ独立的にトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基又は2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基であることが更に好ましく、トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基又は1, 4 - フェニレン基であることが特に好ましい。

【0067】

式中の p は、それぞれ独立的に0又は1であることが更に好ましい。

【0068】

式中の Z は、- CH₂O - 、 - CF₂O - 、 - CH₂CH₂ - 又は単結合であることが更に好ましく、- CH₂O - 又は単結合であることが特に好ましい。

【0069】

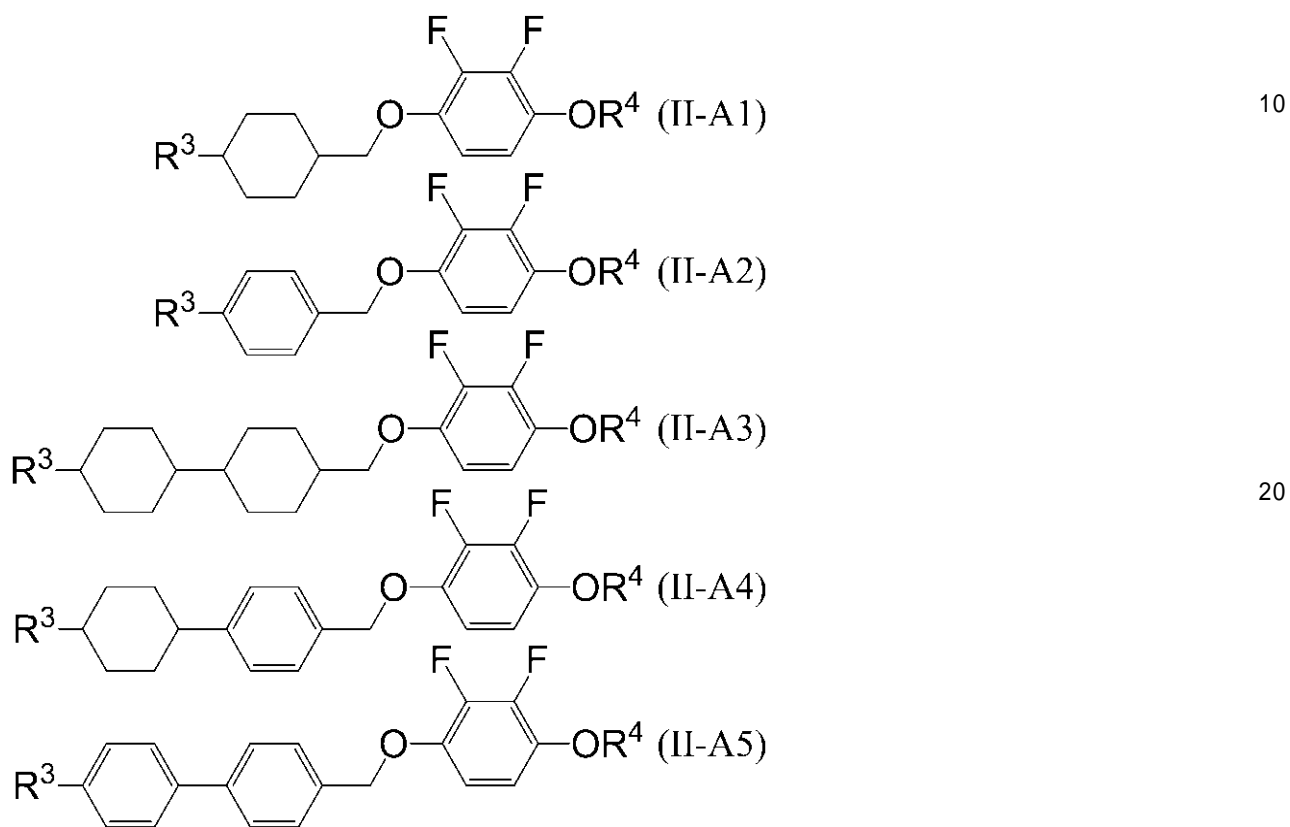
本発明の液晶組成物は、一般式(II)で表される化合物を1種又は2種以上含有することが好ましく、2種から10種含有することが好ましい。

【 0 0 7 0 】

一般式 (I I) で表される化合物は、一般式 (I I - A 1) から一般式 (I I - A 5) 及び一般式 (I I - B 1) から一般式 (I I - B 5) であることが好ましく、一般式 (I I - A 1) から一般式 (I I - A 5) の化合物であることが更に好ましく、一般式 (I I - A 1) 又は一般式 (I I - A 3) の化合物であることが特に好ましい。

【 0 0 7 1 】

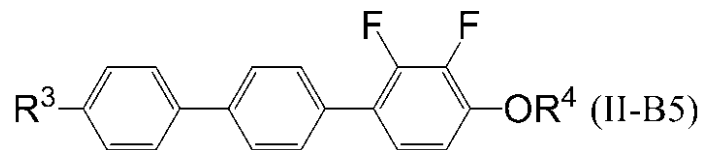
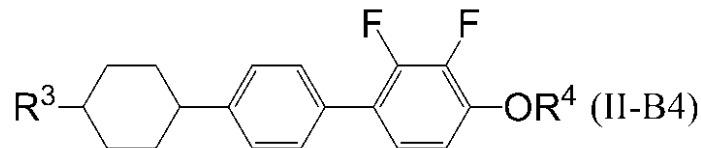
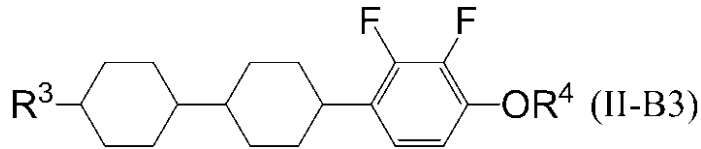
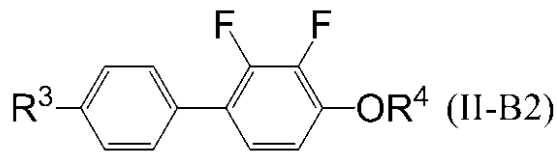
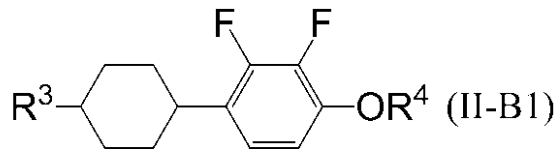
【 化 1 5 】



【 0 0 7 2 】

30

【化 16】



【0073】

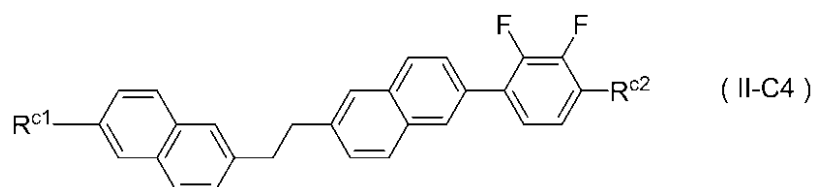
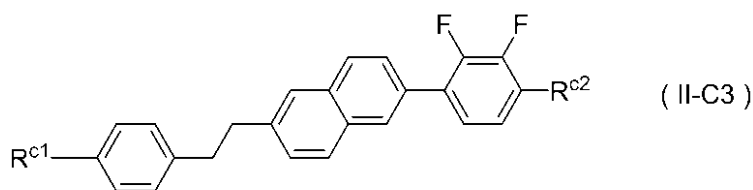
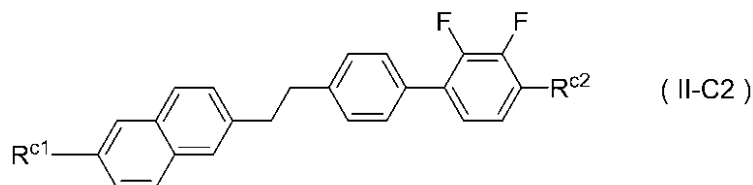
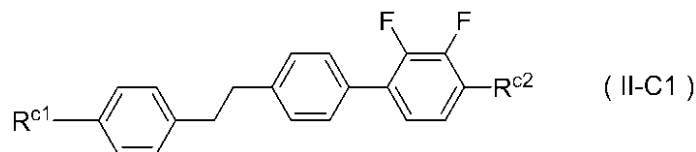
式中、 R^3 及び R^4 は、それぞれ独立的に炭素原子数 1 から 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基を表す。

【0074】

一般式 (II) で表される化合物は、以下の一般式 (II-C1) ~ (II-C8) で表される化合物であることが好ましく、一般式 (II-C1) であることがより好ましい。

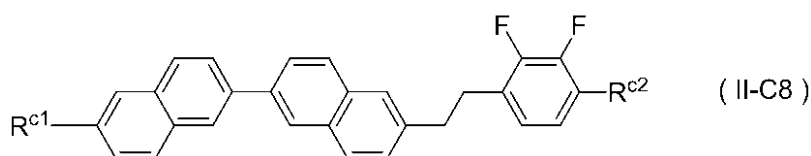
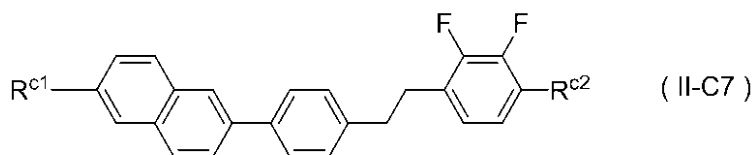
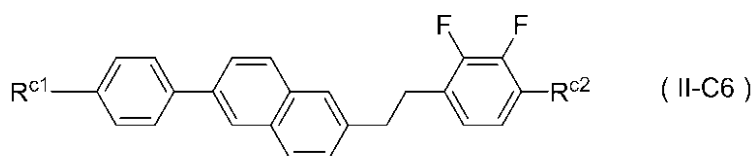
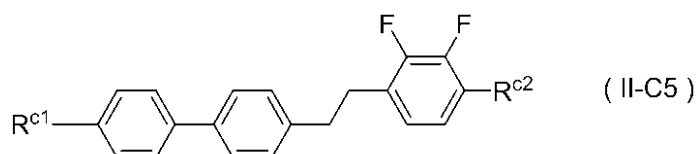
【0075】

【化 17】



【 0 0 7 6 】

【 化 1 8 】



【 0 0 7 7 】

式中、 R^{c1} 及び R^{c2} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 から 5 のアルキル基、炭素原子数 1 から 5 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニルオキシ基を表す。

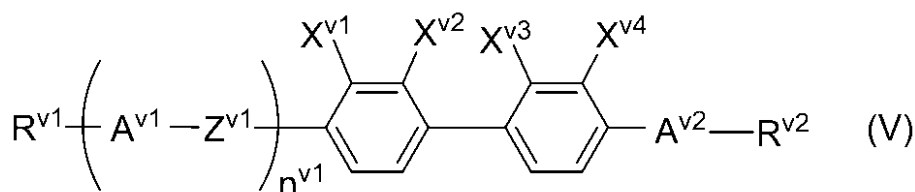
また、一般式 (N-1) で表される化合物は、 A^{N11} 及び A^{N12} がトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキセニレン基、1, 4 - ビシクロ [2.2.2] オクチレン基、ピペリジン - 1, 4 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基であり、 Z^{N11} 及び Z^{N12} が - OCH_2 -、- CH_2O -、- CF_2O -、- OCF_2 -、- CH_2CH_2 -、- CF_2CF_2 - 又は単結合であり、 n^{N11} 及び n^{N12} が 1 又は 2 であることが好ましい。

【 0 0 7 8 】

一般式 (N-1) で表される化合物は、一般式 (V) で表される化合物であることが好ましい。

【 0 0 7 9 】

【 化 1 9 】



【 0 0 8 0 】

(式中、 R^{v1} 及び R^{v2} は、それぞれ独立して炭素原子数 1 から 10 のアルキル基、炭素原子数 1 から 10 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 10 のアルケニル基又は炭素原子数 2 から 10 のアルケニルオキシ基を表し、 R^{v1} 及び R^{v2} 中に存在する 1 個の - CH_2 - 又は隣接していない 2 個以上の - CH_2 - はそれぞれ独立して - O - 及び / 又は -

10

20

30

40

50

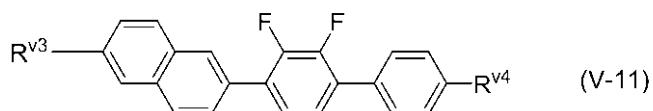
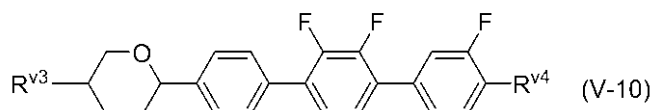
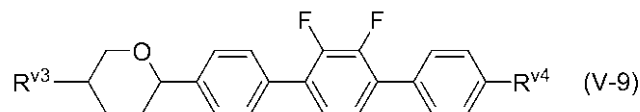
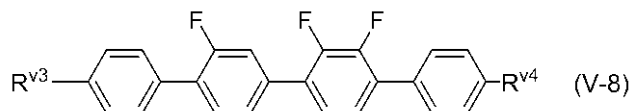
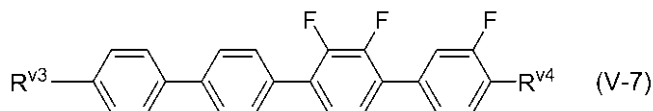
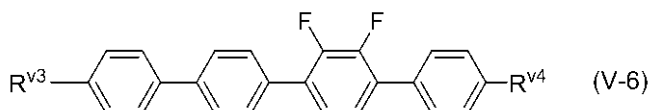
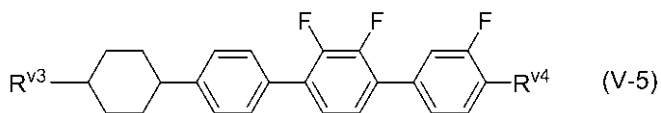
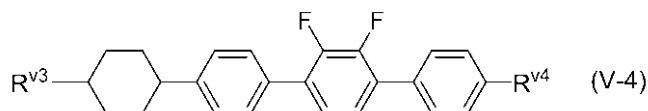
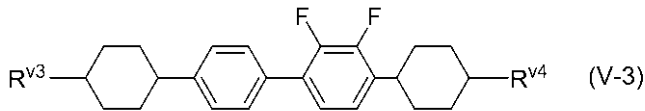
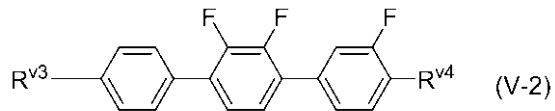
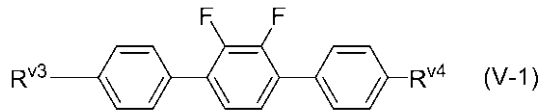
S - に置換されても良い。A^{v1} 及び A^{v2} は、それぞれ独立してトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、2, 3 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキセニレン基、1, 4 - ビシクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン - 1, 4 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基を表す。n^{v1} は、0、1 又は 2 を表す。Z^{v1} は、- OCH₂ -、- CH₂O -、- CF₂O -、- OCF₂ -、- CH₂CH₂ -、- CF₂CF₂ - 又は単結合を表す。X^{v1}、X^{v2}、X^{v3} 及び X^{v4} は水素原子又はフッ素原子を表すが、X^{v1} 及び X^{v2}、又は X^{v3} 及び X^{v4} のうちの少なくとも一方の組み合わせはともにフッ素原子を表す。ただし、一般式 (I I) で表される化合物を除く。)

10

一般式 (V) としては、下記一般式 (V - 1) ~ 一般式 (V - 10) を表すことが好ましく、一般式 (V - 1)、一般式 (V - 3)、一般式 (V - 4) 及び一般式 (V - 11) を表すことがより好ましく、一般式 (V - 1) 及び一般式 (V - 11) を表すことがより好ましい。本発明の液晶組成物は、一般式 (V - 1) で表される化合物を必ず含有することが好ましい。

【0081】

【化 2 0】



【 0 0 8 2】

(式中、 R^{v3} 及び R^{v4} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 から 8 のアルキル基、炭素原子数 1 から 8 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 8 のアルケニル基又は炭素原子数 2 から 8 のアルケニルオキシ基を表す。)

R^{v3} 及び R^{v4} の組み合わせは特に限定されないが、両方がアルキル基を表すもの、両方がアルケニル基を表すもの、いずれか一方がアルキル基を表し、他方がアルケニル基を表すもの、いずれか一方がアルキル基をあらわし、他方がアルコキシを表すもの、及びいずれか一方がアルキル基をあらわし、他方がアルケニルオキシ基を表すものであることが好ましく、両方がアルキル基を表すもの、及び両方がアルケニル基を表すものであることがより好ましい。

【 0 0 8 3】

10

20

30

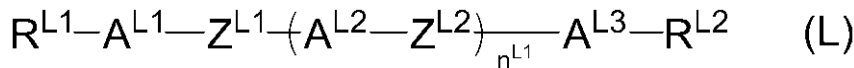
40

50

本発明の液晶組成物は、更に、一般式 (L)

【 0 0 8 4 】

【 化 2 1 】



【 0 0 8 5 】

(式中、 R^{L1} 及び R^{L2} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 10 のアルキル基を表し、該アルキル基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の $-CH_2-$ はそれぞれ独立して $-CH=CH-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ によって置換されてい

10

てもよく、
 n^{L1} は 0、1、2 又は 3 を表し、

A^{L1} 、 A^{L2} 及び A^{L3} はそれぞれ独立して

(a) 1, 4 - シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH_2-$ は又は隣接して

いない 2 個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ に置換されていていてもよい。) 及び

(b) 1, 4 - フェニレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH=$ は又は隣接していない 2 個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていていてもよい。) 及び
 (c) ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又はデカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基 (ナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基中に存在する 1

20

個の $-CH=$ は又は隣接していない 2 個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置換されていていてもよい。)
 からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a)、基 (b) 及び基 (c) はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていていてもよく、

Z^{L1} 及び Z^{L2} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C \equiv C-$ を表し、

n^{L1} が 2 又は 3 であって A^{L2} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっていていてもよく、 n^{L1} が 2 又は 3 であって Z^{L2} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっていていてもよいが、一般式 (i) で表される化合物、一般式 (N - 1)、

30

一般式 (N - 2) 及び一般式 (N - 3) で表される化合物を除く。)
 で表される化合物から選ばれる化合物を 1 種又は 2 種以上含有することが好ましい。

【 0 0 8 6 】

一般式 (L) で表される化合物は単独で用いてもよいが、組み合わせて使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの所望の性能に応じて適宜組み合わせて使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては 1 種類である。あるいは本発明の別の実施形態では 2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類であり、6 種類であり、7 種類であり、8 種類であり、9 種類であり、10 種類以上である。

40

【 0 0 8 7 】

本発明の組成物において、一般式 (L) で表される化合物の含有量は、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率、プロセス適合性、滴下痕、焼き付き、誘電率異方性などの求められる性能に応じて適宜調整する必要がある。

【 0 0 8 8 】

本発明の組成物の総量に対しての式 (L) で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1 % であり、10 % であり、20 % であり、30 % であり、40 % であり、50 % であり、55 % であり、60 % であり、65 % であり、70 % であり、75 % であり、80 % である。好ましい含有量の上限值は、95 % であり、85 % であり、75 % であり、65 % であり、55 % であり、45 % であり、35 % であり、25 % である。

50

【 0 0 8 9 】

本発明の組成物の粘度を低く保ち、応答速度が速い組成物が必要な場合は上記の下限値が高く上限値が高いことが好ましい。さらに、本発明の組成物の T_{NI} を高く保ち、温度安定性の良い組成物が必要な場合は上記の下限値が高く上限値が高いことが好ましい。また、駆動電圧を低く保つために誘電率異方性を大きくしたいときは、上記の下限値を低く上限値が低いことが好ましい。

【 0 0 9 0 】

信頼性を重視する場合には R^{L1} 及び R^{L2} はともにアルキル基であることが好ましく、化合物の揮発性を低減させることを重視する場合にはアルコキシ基であることが好ましく、粘性の低下を重視する場合には少なくとも一方はアルケニル基であることが好ましい。

10

【 0 0 9 1 】

R^{L1} 及び R^{L2} は、それが結合する環構造がフェニル基（芳香族）である場合には、直鎖状の炭素原子数1～5のアルキル基、直鎖状の炭素原子数1～4のアルコキシ基及び炭素原子数4～5のアルケニル基が好ましく、それが結合する環構造がシクロヘキサン、ピラン及びジオキサンなどの飽和した環構造の場合には、直鎖状の炭素原子数1～5のアルキル基、直鎖状の炭素原子数1～4のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数2～5のアルケニル基が好ましい。ネマチック相を安定化させるためには炭素原子及び存在する場合酸素原子の合計が5以下であることが好ましく、直鎖状であることが好ましい。

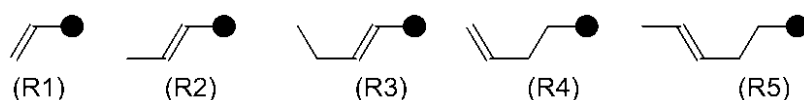
20

【 0 0 9 2 】

アルケニル基としては、式(R1)から式(R5)のいずれかで表される基から選ばれることが好ましい。（各式中の黒点は環構造中の炭素原子を表す。）

【 0 0 9 3 】

【化22】



【 0 0 9 4 】

n^{L1} は応答速度を重視する場合には0が好ましく、ネマチック相の上限温度を改善するためには2又は3が好ましく、これらのバランスをとるためには1が好ましい。また、組成物として求められる特性を満たすためには異なる値の化合物を組み合わせることが好ましい。

30

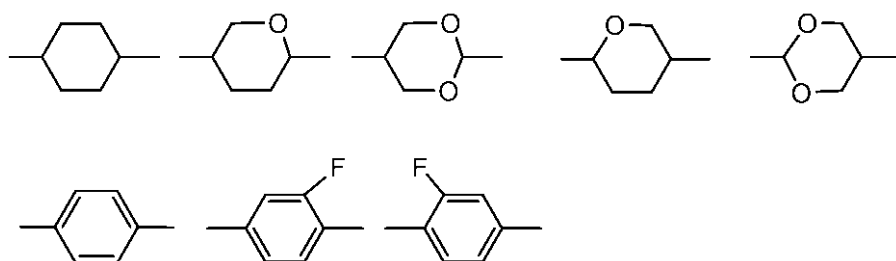
【 0 0 9 5 】

A^{L1} 、 A^{L2} 及び A^{L3} は n を大きくすることが求められる場合には芳香族であることが好ましく、応答速度を改善するためには脂肪族であることが好ましく、それぞれ独立してトランス-1,4-シクロヘキシレン基、1,4-フェニレン基、2-フルオロ-1,4-フェニレン基、3-フルオロ-1,4-フェニレン基、3,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン基、1,4-シクロヘキセニレン基、1,4-ビスシクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン-1,4-ジイル基、ナフタレン-2,6-ジイル基、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基又は1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基を表すことが好ましく、下記の構造を表すことがより好ましく、

40

【 0 0 9 6 】

【化23】



50

【 0 0 9 7 】

トランス - 1 , 4 - シクロヘキシレン基又は 1 , 4 - フェニレン基を表すことがより好ましい。

【 0 0 9 8 】

Z^{L1} 及び Z^{L2} は応答速度を重視する場合には単結合であることが好ましい。

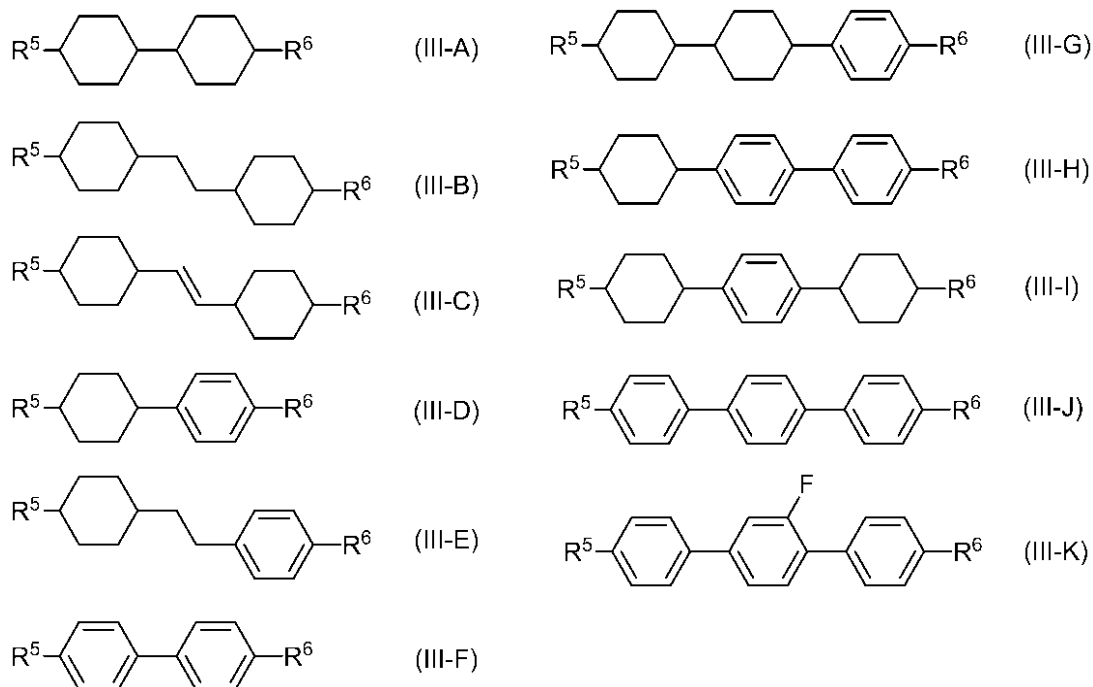
【 0 0 9 9 】

一般式 (L) で表される化合物として、以下の一般式 (I I I - A) から一般式 (I I I - K) で表される化合物群から選ばれる化合物を 1 種又は 2 種以上含有し、その含有量が液晶組成物の総量に対して、1 質量 % から 6 0 質量 % であることが好ましく、1 0 質量 % から 5 0 質量 % であることが好ましく、2 0 質量 % から 5 0 質量 % であることが好ましく、2 0 質量 % から 4 0 質量 % であることが好ましい。

10

【 0 1 0 0 】

【 化 2 4 】



20

30

【 0 1 0 1 】

(式中、 R^5 は、炭素原子数 1 から 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基、 R^6 は、炭素原子数 1 から 5 のアルキル基、炭素原子数 1 から 5 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基又は炭素原子数 2 から 5 のアルケニルオキシ基を表す。但し、一般式 (I I I - A) で表される化合物において、式 (I) で表される化合物と同一の化合物は含まない。)

一般式 (L) としては、一般式 (I I I - A) 、一般式 (I I I - D) 、一般式 (I I I - F) 、一般式 (I I I - G) 及び一般式 (I I I - H) から選ばれる化合物であることが好ましく、一般式 (I I I - A) 、一般式 (I I I - F) 、一般式 (I I I - G) 及び一般式 (I I I - H) から選ばれる化合物であることが更に好ましく、一般式 (I I I - A) 、一般式 (I I I - G) 及び一般式 (I I I - H) から選ばれる化合物であることが更に好ましく、一般式 (I I I - A) 、一般式 (I I I - F) 及び一般式 (I I I - H) から選ばれる化合物であることも好ましい。更に詳述すると、大きな n が求められる場合には、一般式 (I I I - F) 、一般式 (I I I - H) 及び一般式 (I I I - K) から選ばれる化合物であることが好ましい。

40

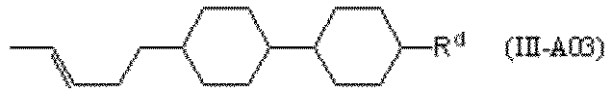
また、一般式 (I I I - D) 、一般式 (I I I - G) 及び一般式 (I I I - H) で表される化合物においては、 R^5 は炭素原子数 1 から 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基、 R^6 は炭素原子数 1 から 5 のアルキル基又は炭素原子数 1 から 5 のアルコキシ基であることが好ましく、 R^5 は炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基であることが更

50

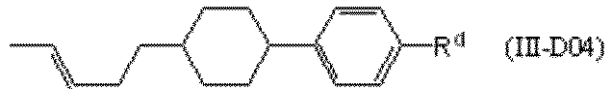
に好ましく、炭素原子数 2 又は 3 のアルケニル基であることが更に好ましく、一般式 (I I I - F) で表される化合物においては、 R^5 及び R^6 はそれぞれ独立的に炭素原子数 1 から 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基であることが好ましい。
一般式 (L) で表される化合物の好ましい具体的な例として、以下のようなものが挙げられる。

【 0 1 0 2 】

【 化 2 5 】



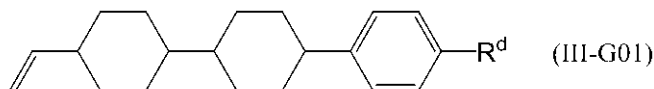
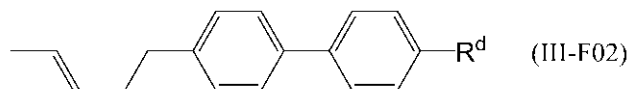
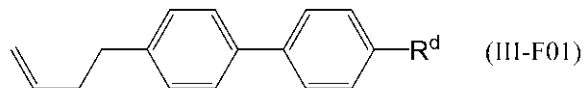
10



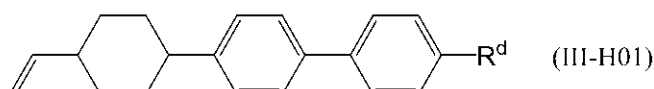
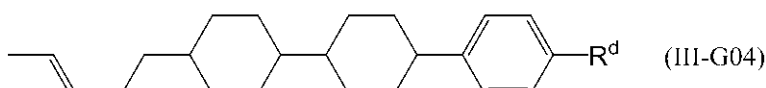
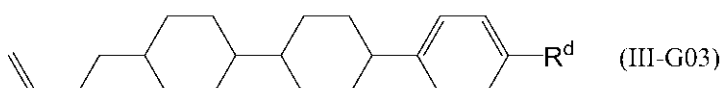
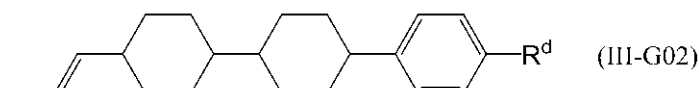
20

【 0 1 0 3 】

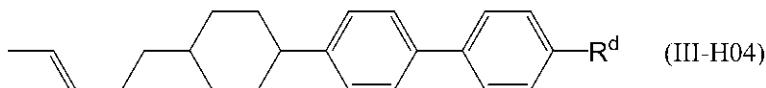
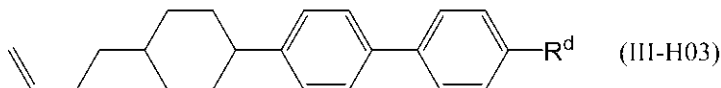
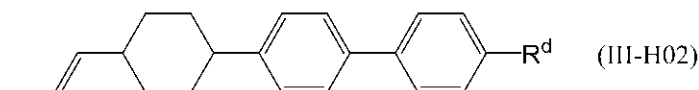
【 化 2 6 】



30



40



【 0 1 0 4 】

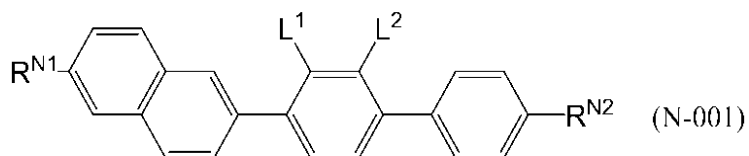
50

(式中、 R^d は、炭素原子数 1 から 5 のアルキル基、炭素原子数 1 から 5 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 5 のアルケニル基、炭素原子数 2 から 5 のアルケニルオキシ基を表す。)

また、一般式 (L) で表される化合物として、一般式 (N-001) で表される化合物を 1 種又は 2 種以上含有しても良い。

【0105】

【化27】



10

【0106】

(式中、 R^{N1} 及び R^{N2} はそれぞれ独立的に炭素原子数 1 から 8 のアルキル基、炭素原子数 1 から 8 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 8 のアルケニル基又は炭素原子数 2 から 8 のアルケニルオキシ基を表し、 L^1 及び L^2 はそれぞれ独立的に水素原子、フッ素原子、 CH_3 又は CF_3 を表す。ただし、 L^1 及び L^2 の両方がフッ素原子を表すものを除く。)

R^{N1} 及び R^{N2} は、炭素原子数 1 から 5 のアルキル基を表すことが好ましい。

【0107】

本発明の液晶組成物は、一般式 (i)、一般式 (II-A1) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが好ましく、一般式 (i)、一般式 (II-A3) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが好ましく、一般式 (i)、一般式 (II-B1) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが好ましく、一般式 (i)、一般式 (II-B2) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが好ましく、一般式 (i)、一般式 (II-B3) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが好ましく、一般式 (i)、一般式 (II-B4)、及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが好ましいが、一般式 (i)、一般式 (II-A1) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが更に好ましく、一般式 (i)、一般式 (II-A3) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが更に好ましく、一般式 (i)、一般式 (II-A1)、一般式 (II-A3) 及び一般式 (III-A) の化合物を同時に含有することが特に好ましい。

20

30

【0108】

本発明の液晶組成物は、一般式 (i) で表される化合物と、一般式 (N-1)、一般式 (N-2) 及び一般式 (N-3) で表される化合物から選ばれる化合物と、一般式 (L) で表される化合物の合計の含有量が、50 から 100 質量%であることが好ましく、55 ~ 100 質量%であることが更に好ましく、60 ~ 100 質量%であることが更に好ましく、65 ~ 100 質量%であることが更に好ましく、70 ~ 100 質量%であることが更に好ましく、75 ~ 100 質量%であることが特に好ましい。より詳述すると、本発明の液晶組成物は、一般式 (i)、一般式 (II) 及び一般式 (III-A) から一般式 (III-J) で表される化合物の含有量の合計が、85 から 100 質量%が好ましく、90 から 100 質量%がより好ましく、一般式 (i)、一般式 (II)、一般式 (III-A) から一般式 (III-J) 及び一般式 (V-1) で表される化合物の含有量の合計が、90 から 100 質量%が更に好ましく、95 から 100 質量%が特に好ましい。

40

【0109】

本発明の液晶組成物は、一般式 (i) で表される化合物と、一般式 (N-1)、一般式 (N-2) 及び一般式 (N-3) で表される化合物から選ばれる化合物の合計の含有量が組成物中に下限値として、30 質量% (以下組成物中の%は質量%を表す。) 以上含有することが好ましく、35 % 以上含有することが好ましく、40 % 以上含有することが好ましく、45 % 以上含有することが好ましく、50 % 以上含有することが好ましく、55 %

50

以上含有することが好ましく、60%以上含有することが好ましく、65%以上含有することが好ましく、70%以上含有することが好ましく、75%以上含有することが好ましく、78%以上含有することが好ましく、80%以上含有することが好ましく、83%以上含有することが好ましく、85%以上含有することが好ましく、90%以上含有することが好ましく、91%以上含有することが好ましい。また、上限値として、100%以下含有することが好ましく、99%以下含有することが好ましく、95%以下含有することが好ましく、90%以下含有することが好ましく、85%以下含有することが好ましく、80%以下含有することが好ましく、75%以下含有することが好ましく、70%以下含有することが好ましく、65%以下含有することが好ましく、60%以下含有することが好ましく、55%以下含有することが好ましく、50%以下含有することが好ましい。

10

【0110】

本願発明の組成物は、分子内に過酸(-CO-OO-) 構造等の酸素原子同士が結合した構造を持つ化合物を含有しないことが好ましい。

【0111】

組成物の信頼性及び長期安定性を重視する場合にはカルボニル基を有する化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して5%以下とすることが好ましく、3%以下とすることがより好ましく、1%以下とすることが更に好ましく、実質的に含有しないことが最も好ましい。

【0112】

UV照射による安定性を重視する場合、塩素原子が置換している化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して15%以下とすることが好ましく、10%以下とすることが好ましく、8%以下とすることが好ましく、5%以下とすることがより好ましく、3%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

20

【0113】

分子内の環構造がすべて6員環である化合物の含有量を多くすることが好ましく、分子内の環構造がすべて6員環である化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して80%以上とすることが好ましく、90%以上とすることがより好ましく、95%以上とすることが更に好ましく、実質的に分子内の環構造がすべて6員環である化合物のみで組成物を構成することが最も好ましい。

【0114】

30

組成物の酸化による劣化を抑えるためには、環構造としてシクロヘキセニレン基を有する化合物の含有量を少なくすることが好ましく、シクロヘキセニレン基を有する化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して10%以下とすることが好ましく、8%以下とすることが好ましく、5%以下とすることがより好ましく、3%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

【0115】

粘度の改善及び T_{NI} の改善を重視する場合には、水素原子がハロゲンに置換されていてもよい2-メチルベンゼン-1,4-ジイル基を分子内に持つ化合物の含有量を少なくすることが好ましく、前記2-メチルベンゼン-1,4-ジイル基を分子内に持つ化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して10%以下とすることが好ましく、8%以下とすることが好ましく、5%以下とすることがより好ましく、3%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

40

【0116】

本願において実質的に含有しないとは、意図せずに含有する物を除いて含有しないという意味である。

【0117】

本発明の第一実施形態の組成物に含有される化合物が、側鎖としてアルケニル基を有する場合、前記アルケニル基がシクロヘキサに結合している場合には当該アルケニル基の炭素原子数は2~5であることが好ましく、前記アルケニル基がベンゼンに結合している場合には当該アルケニル基の炭素原子数は4~5であることが好ましく、前記アルケニル

50

基の不飽和結合とベンゼンは直接結合していないことが好ましい。本発明の液晶組成物は、25における誘電率異方性()が-2.0から-8.0であるが、-2.0から-6.0が好ましく、-2.0から-5.0がより好ましく、-2.5から-4.0が特に好ましい。

【0118】

本発明の液晶組成物は、25における屈折率異方性(n)が0.08から0.14であるが、0.09から0.13がより好ましく、0.09から0.12が特に好ましい。更に詳述すると、薄いセルギャップに対応する場合は0.10から0.13であることが好ましく、厚いセルギャップに対応する場合は0.08から0.10であることが好ましい。

10

【0119】

本発明の液晶組成物は、25における粘度()が10から50 mPa・sであるが、10から45 mPa・sであることがより好ましく、10から40 mPa・sであることが特に好ましい。

【0120】

本発明の液晶組成物は、25における回転粘性(η)が60から200 mPa・sであるが、60から180 mPa・sであることがより好ましく、70から170 mPa・sであることが特に好ましい。

【0121】

本発明の液晶組成物は、ネマチック相 - 等方性液体相転移温度(T_{NI})が60 から 120 であるが、70 から 110 がより好ましく、72 から 105 が特に好ましい。

20

本発明の液晶組成物は、弾性定数(K_{33})が10.0から20.0であるが、11.0から19.0がより好ましく、11.0から18.0が特に好ましい。弾性定数(K_{33})の下限値について詳述すると、11.0が好ましいが、11.5が好ましく、12.0が好ましく、12.5が好ましく、13.0が好ましく、13.5が好ましく、14.0が好ましく、14.5が好ましく、15.0が好ましく、15.5が好ましい。

【0122】

本発明の液晶組成物は、上述の化合物以外に、通常のネマチック液晶、スメクチック液晶、コレステリック液晶、酸化防止剤、紫外線吸収剤、重合性モノマー又は光安定剤(H A L S)等を含含有しても良い。

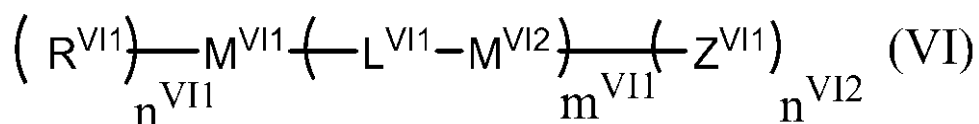
30

【0123】

例えば、重合性モノマーとしてビフェニル誘導体、ターフェニル誘導体などの重合性化合物を1種又は2種以上含有することが好ましく、本発明の組成物の総量に対して重合性化合物を0.01質量%から2質量%含有することが好ましい。更に詳述すると、本発明の液晶組成物に、一般式(VI)

【0124】

【化28】



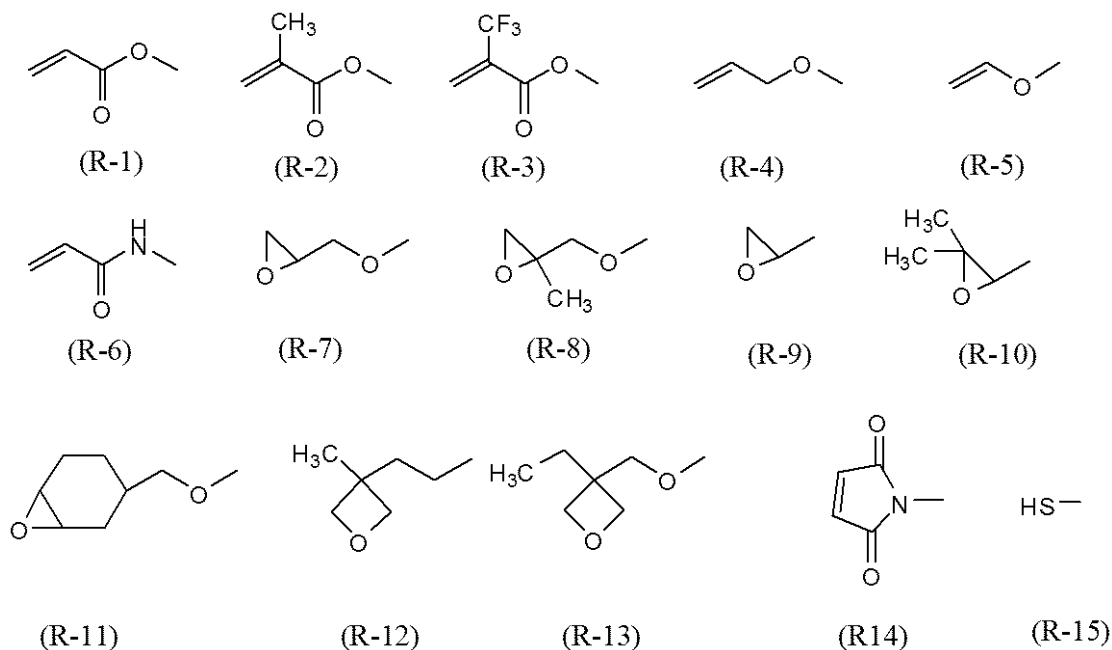
40

【0125】

(式中、 Z^{VI1} は水素原子、炭素原子数1から12のアルキル基、炭素原子数1から12のアルコキシ基又は $P^{VI2} - S^{VI2}$ - を表し、 R^{VI1} は、 $P^{VI1} - S^{VI1}$ - を表し、 P^{VI1} 及び P^{VI2} はそれぞれ独立して、式(R - 1)から式(R - 15)

【0126】

【化 2 9】



10

【 0 1 2 7】

から選ばれる基を表し、

S^{VI1} 及び S^{VI2} は、それぞれ独立して、単結合又は炭素数 1 ~ 15 のアルキレン基を表し、該アルキレン基中の 1 個の $-CH_2-$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ は、酸素原子が直接隣接しないように、 $-O-$ 、 $-OCO-$ 又は $-COO-$ で置換されても良く、

n^{VI1} は 1 から 3 の整数を表し、 n^{VI2} は 1 から 3 の整数を表し、 m^{VI1} は 0 から 4 の整数を表し、

M^{VI1} は、1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキシレン基、ピリジン - 2, 5 - ジイル基、ピリミジン - 2, 5 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、インダン - 2, 5 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル基、又はフェナントレン - 2, 7 - ジイル基から選択される 2 価の環状基を表すが、 n^{VI1} が 2 又は 3 を表す場合、及び / 又は m^{VI1} が 0 を表し n^{VI2} が 2 又は 3 を表す場合、上記 2 価の環状基の任意の位置にさらに結合手を有し、

M^{VI2} は、それぞれ独立して、1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキシレン基、ピリジン - 2, 5 - ジイル基、ピリミジン - 2, 5 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、インダン - 2, 5 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル基、又はフェナントレン - 2, 7 - ジイル基から選択される 2 価の環状基を表すが、 n^{VI2} が 2 又は 3 を表す場合、 Z^{VI1} が連結する M^{VI2} は、上記 2 価の環状基の任意の位置にさらに結合手を有し (Z が連結しない M^{VI2} は、それぞれ独立して、上記 2 価の環状基から選択される。)、

M^{VI1} 及び存在する M^{VI2} の少なくとも 1 つ以上の環状基は 1 つ以上の炭素原子数 1 ~ 12 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 12 のアルコキシ基、ハロゲンで置換されていても良く、

L^{VI1} は、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CH_2-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-C_2H_4-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOCH_2-$ 、 $-CH_2OCO-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、 $-CO-NR^a-$ 、 $-NR^a-CO-$ 、 $-SCH_2-$ 、 $-CH_2S-$ 、 $-CH=CR^a-COO-$ 、 $-CH=CR^a-OCO-$ 、 $-COO-CR^a=CH-$ 、 $-OCO-CR^a=CH-$ 、 $-COO-CR^a=CH-COO-$ 、 $-COO-CR^a=CH-OCO-$ 、 $-OCO-CR^a=CH-COO-$ 、 $-OCO-CR^a=CH-OCO-$ 、 $-(CH_2)_Y-C(=O)-O-$ 、 $-(CH_2)_Y-O-(C=O)-$ 、 $-$

20

30

40

50

$O - (C=O) - (CH_2)_Y -$ 、 $-(C=O) - O - (CH_2)_Y -$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CF=CH-$ 、 $-CH=CF-$ 、 $-CF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2CH_2-$ 、 $-CH_2CF_2-$ 、 $-CF_2CF_2-$ 又は $-C \equiv C-$ (式中、 R^a はそれぞれ独立して水素原子又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルキル基を表し、 Y は 1 ~ 4 の整数を表す。) であり、

R^{VI1} 、 Z^{VI1} 、 L^{VI1} 及び M^{VI2} が複数存在する場合は、それぞれ、同一であっても異なっているても良い。) で表される重合性化合物を 1 種又は 2 種以上含有することが好ましい。

式中、 Z^{VI1} は $P^{VI2} - S^{VI2} -$ を表すことが好ましい。

式中、 R^{VI1} は $P^{VI1} - S^{VI1} -$ を表し、 P^{VI1} 及び P^{VI2} は、それぞれ独立して、前記式 (R - 1) 又は式 (R - 2) であることが好ましい。

10

【0128】

式中、 S^{VI1} 及び S^{VI2} は、単結合又は炭素原子数 1 から 6 のアルキレン基が好ましく、単結合であることが更に好ましい。液晶組成物との溶解性を重視する場合は、炭素原子数 1 から 6 のアルキレン基であることが好ましく、炭素原子数 1 から 3 のアルキレン基であることが更に好ましく、炭素原子数 1 から 2 のアルキレン基であることが更に好ましく、該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-$ は、酸素原子が直接隣接しないように、 $-O-$ 、 $-OCO-$ 又は $-COO-$ で置換されても良い。また、存在する S^{VI1} 及び S^{VI2} の内、少なくとも 1 つは単結合であるが、存在する S^{VI1} 及び S^{VI2} の全てが単結合であることが好ましい。

20

【0129】

式中、 n^{VI1} は 1 から 2 の整数であることが好ましく、 n^{VI2} は 1 から 2 の整数であることが好ましい。なお、 $n^{VI1} + n^{VI2}$ は 1 から 5 の整数であることが好ましく、1 から 4 の整数であることが好ましく、1 から 3 の整数であることが好ましく、2 から 3 の整数であることが更に好ましい。

【0130】

式中、 m^{VI1} は 1 から 3 の整数であることが好ましく、重合速度を重視する場合には m^{VI1} は 2 から 4 の整数であることが好ましく、 m^{VI1} は 2 又は 3 であることがより好ましく、液晶組成物との相溶性を重視する場合には m^{VI1} は 0 から 2 の整数であることが好ましい。従って、重合速度と相溶性を両立するためには、 m^{VI1} は 2 であることが特に好ましい。

30

【0131】

式中、 M^{VI1} は 1, 4 - フェニレン基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、フェナントレン - 2, 7 - ジイル基から選択される 2 価の環状基が好ましく、 n^{VI1} が 2 又は 3 を表す場合、及び n^{VI1} が 0 を表し n^{VI2} が 2 又は 3 を表す場合、上記 2 価の環状基の任意の位置にさらに結合手を有する。

【0132】

式中、 M^{VI2} は 1, 4 - フェニレン基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、フェナントレン - 2, 7 - ジイル基から選択される 2 価の環状基が好ましく、 n^{VI2} が 2 又は 3 を表す場合、 Z^{VI1} が連結する M^{VI2} は、上記 2 価の環状基の任意の位置にさらに結合手を有するが、 Z^{VI1} が連結しない M^{VI2} は、それぞれ独立して、上記 2 価の環状基から選択される。

40

【0133】

式中、 M^{VI1} 及び存在する M^{VI2} の少なくとも 1 つ以上の環状基は 1 つ以上の炭素原子数 1 ~ 12 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 12 のアルコキシ基、ハロゲンで置換されていても良く、該アルキル基又はアルコキシ基は炭素原子数 1 から 6 のアルキル基又はアルコキシ基であることが好ましく、炭素原子数 1 から 5 のアルキル基又はアルコキシ基であることが好ましく、炭素原子数 1 から 4 のアルキル基又はアルコキシ基であることが好ましく、炭素原子数 1 から 3 のアルキル基又はアルコキシ基であることが好ましく、炭素原子数 1 から 2 のアルキル基又はアルコキシ基であることが好ましく、炭素原子数 1 のア

50

ルキル基又はアルコキシ基であることが特に好ましい。

【0134】

L^{VI-1} は、単結合、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-C_2H_4-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CR^a-COO-$ 、 $-CH=CR^a-OCO-$ 、 $-COO-CR^a=CH-$ 、 $-OCO-CR^a=CH-$ 、 $-(CH_2)_Y-COO-$ 、 $-(CH_2)_Y-OCO-$ 、 $-OCO-(CH_2)_Y-$ 、 $-COO-(CH_2)_Y-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 又は $-C-C-$ (式中、 R^a はそれぞれ独立して水素原子又は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基を表し、前記式中、 Y は 1 ~ 4 の整数を表す。) が好ましく、単結合、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-CH=CH-OCO-$ 、 $-COO-CH=CH-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2-COO-$ 、 $-(CH_2)_2-OCO-$ 、 $-OCO-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-(CH_2)_2-$ 又は $-C-C-$ がより好ましく、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2-COO-$ 又は $-OCO-(CH_2)_2-$ が更に好ましく、 $-(CH_2)_2-COO-$ 又は $-OCO-(CH_2)_2-$ が特に好ましい。

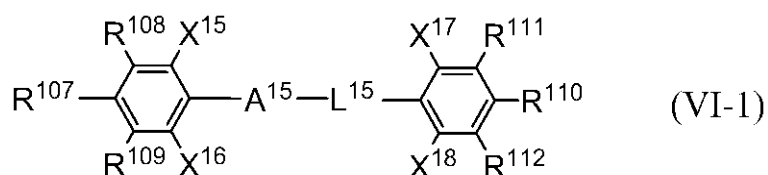
10

【0135】

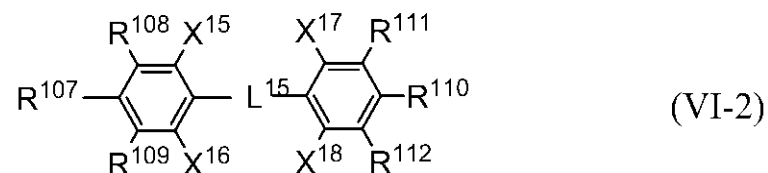
一般式 (VI) で表される重合性化合物として、具体的には、以下の一般式 (VI-1) 及び一般式 (VI-2)

【0136】

【化30】



20



30

【0137】

で表される重合性化合物で表される重合性化合物を 1 種又は 2 種以上含有することが好ましい。

【0138】

式中、 R^{107} は、 $P^{107}-S^{107}-$ を表し、 R^{110} は、 $P^{110}-S^{110}-$ を表し、 P^{107} 及び P^{110} は、それぞれ独立的に上記式 (R-1) から式 (R-15) のいずれかを表し、 S^{107} 及び S^{110} は、それぞれ独立的に単結合又は炭素数 1 ~ 15 のアルキレン基を表し、該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-$ は、酸素原子が直接隣接しないように、 $-O-$ 、 $-OCO-$ 又は $-COO-$ で置換されて良いが、単結合又は炭素数 1 ~ 6 のアルキレン基 (該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-$ は、酸素原子が直接隣接しないように、 $-O-$ で置換されて良い。) であることが好ましく、単結合であることが特に好ましい。

40

式中、 R^{108} 、 R^{109} 、 R^{111} 及び R^{112} は、それぞれ独立的に上記式 (R-1) から式 (R-15)、炭素原子数 1 から 3 のアルキル基、炭素原子数 1 から 3 のアルコキシ基、フッ素原子又は水素原子のいずれかを表し、 A^{15} は、1, 4-フェニレン基、1, 4-シクロヘキシレン基、ピリジン-2, 5-ジイル基、ピリミジン-2, 5-ジイル基、ナフタレン-2, 6-ジイル基、インダン-2, 5-ジイル基、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基又は 1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル基を表すが、基は無置換であるか又は炭素原子数 1 から 12 のアルキル基、ハロゲン (フッ素原子、塩素原子)、シアノ基又はニトロ基で置換されていても良く、 L^{15} は単結合、

50

- OCH₂ -, - CH₂O -, - C₂H₄ -, - COO -, - OCO -, - CH=CR^a - COO -, - CH=CR^a - OCO -, - COO - CR^a = CH -, - OCO - CR^a = CH -, - (CH₂)_Y - COO -, - (CH₂)_Y - OCO -, - OCO - (CH₂)_Y -, - COO - (CH₂)_Y -, - CH=CH -, - CF₂O -, - OCF₂ - 又は - C - C - (式中、R^aはそれぞれ独立して水素原子又は炭素原子数1から3のアルキル基を表し、前記式中、Yは1から4の整数を表す。)を表す。

式中、X¹⁵、X¹⁶、X¹⁷及びX¹⁸は、それぞれ独立的に水素原子、炭素原子数1から3のアルキル基又はフッ素原子を表す。

【0139】

一般式(VI-1)及び一般式(VI-2)で表される重合性化合物は、2つ又は3つの環を有するメソゲン構造であることに特徴があり、本発明の一般式(I-1)の重合性化合物に併用することで液晶組成物との相溶性を更に向上させることができる。

10

【0140】

一般式(VI-1)及び一般式(VI-2)で表される重合性化合物の含有量は、0.01から5質量%含有するが、含有量の下限は0.02質量%が好ましく、0.03質量%が好ましく、0.04質量%が好ましく、0.05質量%が好ましく、0.06質量%が好ましく、0.07質量%が好ましく、0.08質量%が好ましく、0.09質量%が好ましく、0.1質量%が好ましく、0.15質量%が好ましく、0.2質量%が好ましく、0.25質量%が好ましく、0.3質量%が好ましく、0.35質量%が好ましく、0.4質量%が好ましく、0.5質量%が好ましく、0.55質量%が好ましく、含有量の上限は4.5質量%が好ましく、4質量%が好ましく、3.5質量%が好ましく、3質量%が好ましく、2.5質量%が好ましく、2質量%が好ましく、1.5質量%が好ましく、1質量%が好ましく、0.95質量%が好ましく、0.9質量%が好ましく、0.85質量%が好ましく、0.8質量%が好ましく、0.75質量%が好ましく、0.7質量%が好ましく、0.65質量%が好ましく、0.6質量%が好ましく、0.55質量%が好ましい。

20

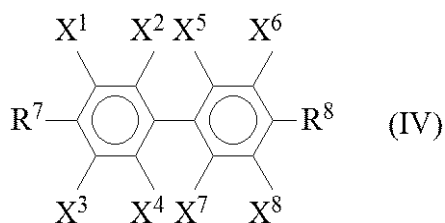
【0141】

一般式(VI-2)で表される化合物として、一般式(IV)で表される重合性化合物を1種又は2種以上含有することが好ましい。

【0142】

30

【化31】



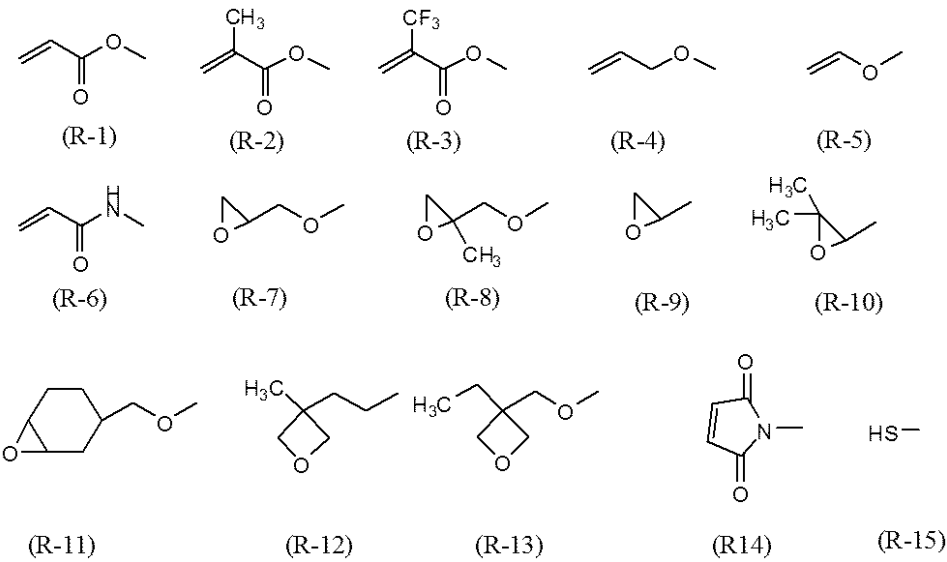
【0143】

式中、R⁷及びR⁸は、それぞれ独立的に式(R-1)から式(R-15)のいずれかを表し、X¹からX⁸は、それぞれ独立的にトリフルオロメチル基、トリフルオロメトキシ基、フッ素原子又は水素原子を表す。

40

【0144】

【化 3 2】



10

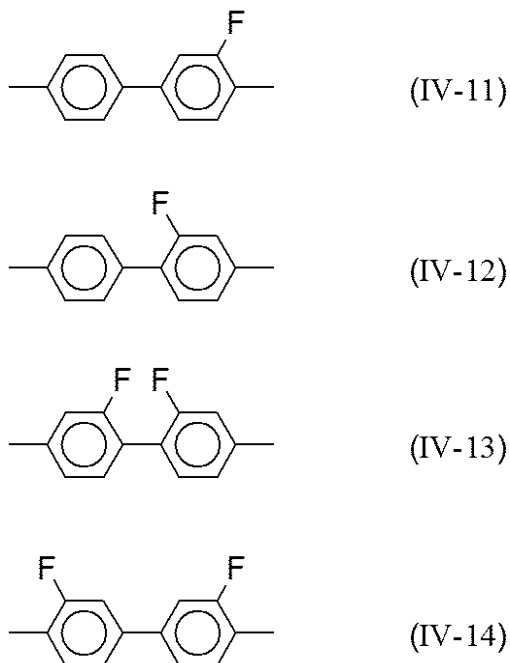
【 0 1 4 5】

一般式 (I V) におけるビフェニル骨格の構造は、式 (I V - 1 1) から式 (I V - 1 4) であることが更に好ましく、式 (I V - 1 1) であることが特に好ましい。

【 0 1 4 6】

20

【化 3 3】



30

【 0 1 4 7】

40

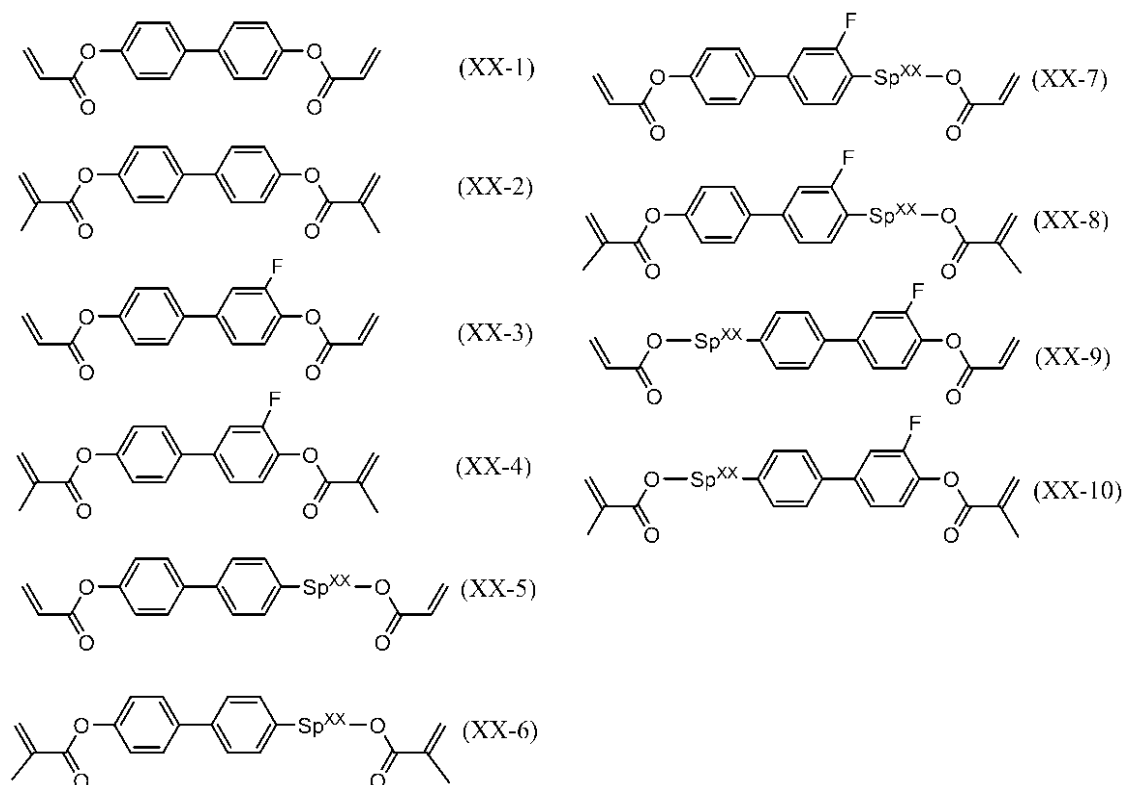
式 (I V - 1 1) から式 (I V - 1 4) で表される骨格を含む重合性化合物は重合後の配向規制力が最適であり、良好な配向状態が得られる。

【 0 1 4 8】

一般式 (V I - 2) で表される化合物は、具体的には、例えば式 (X X - 1) から一般式 (X X - 1 0) で表される化合物が好ましく、式 (X X - 1) から式 (X X - 4) が更に好ましい。

【 0 1 4 9】

【化 3 4】



10

20

【 0 1 5 0】

式 (XX-1) から一般式 (XX-10) 中、 Sp^{xx} は炭素原子数 1 ~ 8 のアルキレン基又は $-O-(CH_2)_s-$ (式中、 s は 2 から 7 の整数を表し、酸素原子は環に結合するものとする。) を表す。

【 0 1 5 1】

式 (XX-1) から一般式 (XX-10) 中、1, 4-フェニレン基中の水素原子は、更に、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-CF_3$ 、 $-CH_3$ 、式 (R-1) から式 (R-15) のいずれかによって置換されていても良い。

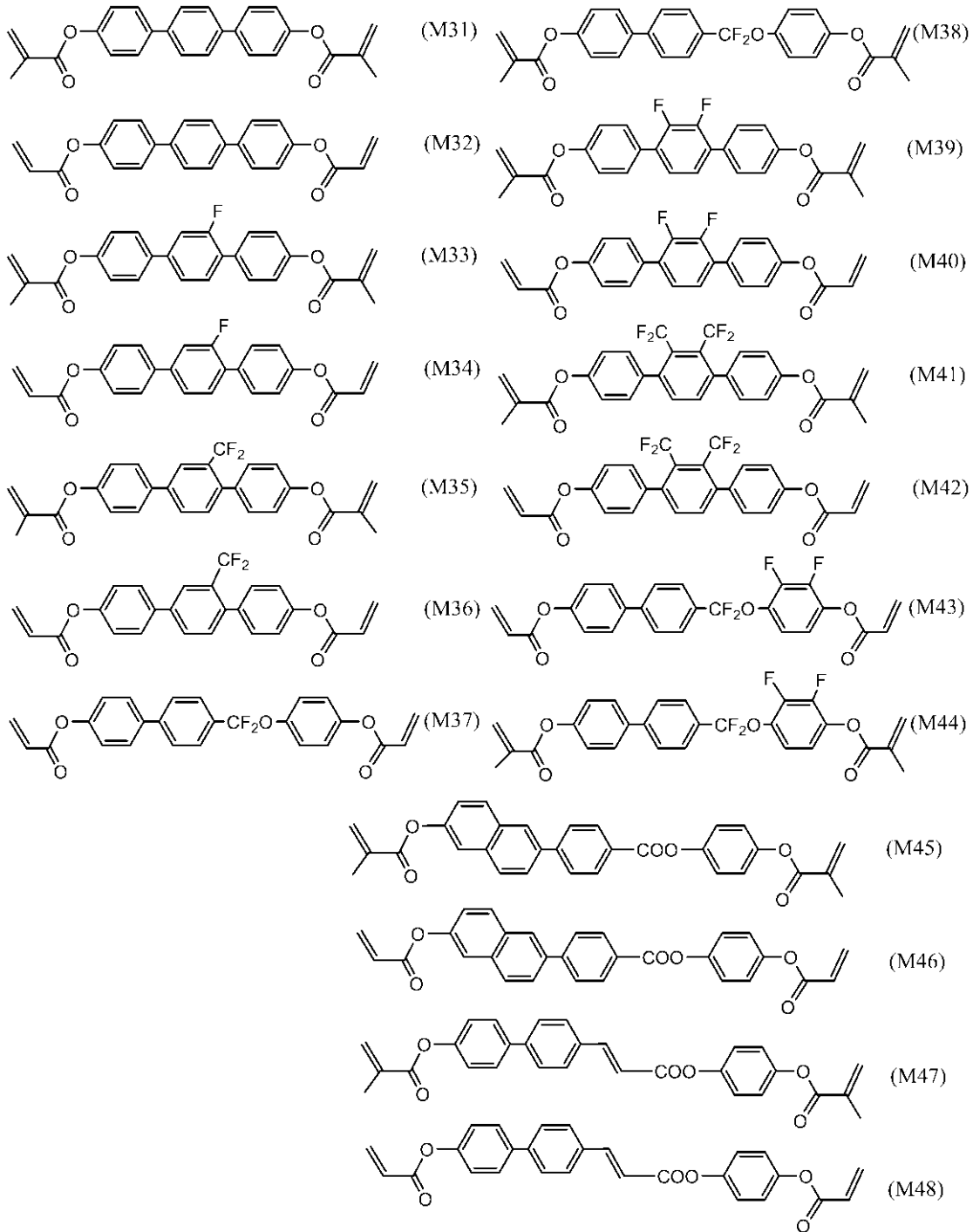
30

【 0 1 5 2】

また、一般式 (VI-1) で表される化合物として、例えば、式 (M31) から式 (M48) のような重合性化合物が好ましい。

【 0 1 5 3】

【化 3 5】



【 0 1 5 4 】

また、式 (M 3 0 1) から式 (M 3 1 6) のような重合性化合物も好ましい。

【 0 1 5 5 】

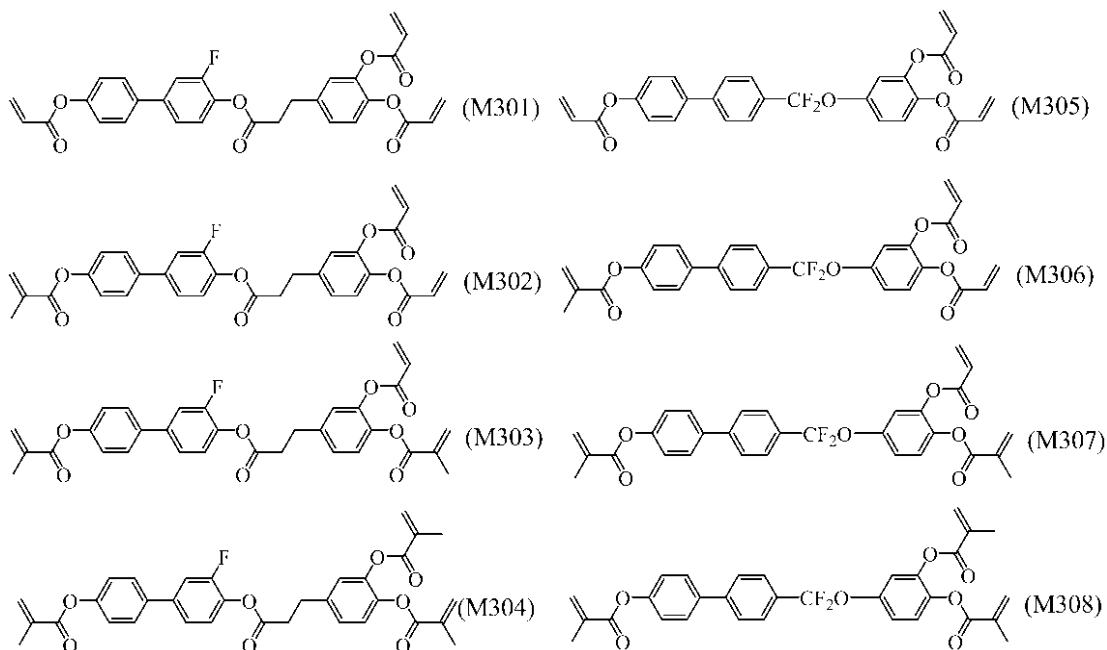
10

20

30

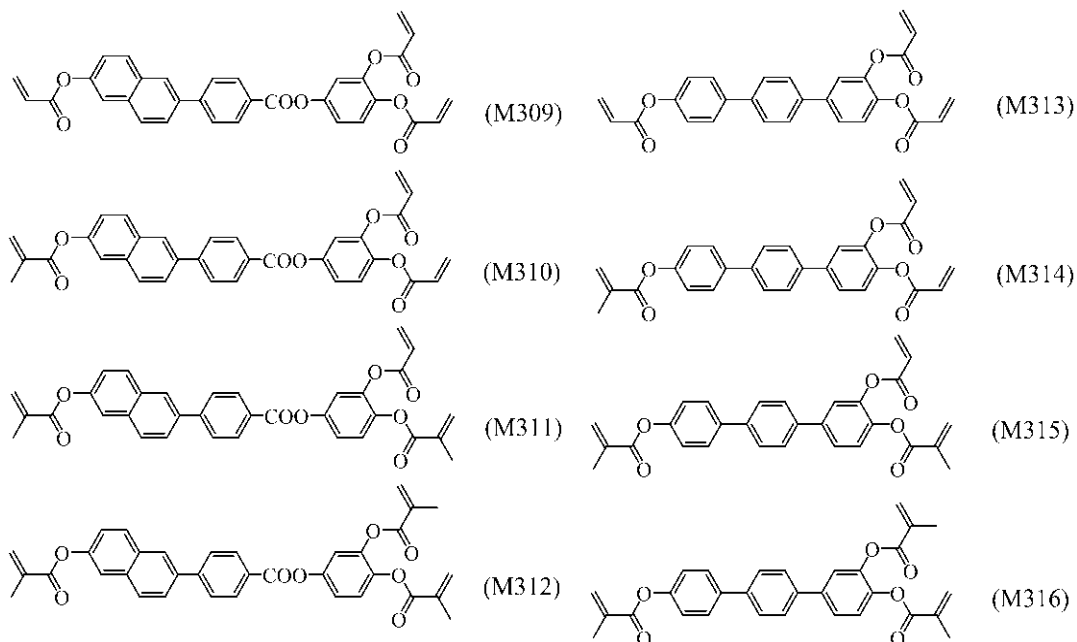
40

【化 3 6】



【 0 1 5 6】

【化 3 7】



【 0 1 5 7】

式 (M301) から式 (M316) 中の 1, 4 - フェニレン基及びナフタレン基中の水素原子は、更に、- F、- Cl、- CF₃、- CH₃ によって置換されていても良い。

【 0 1 5 8】

また、式 (V Ia - 1) ~ 式 (V Ia - 31) のような重合性化合物も好ましい。

【 0 1 5 9】

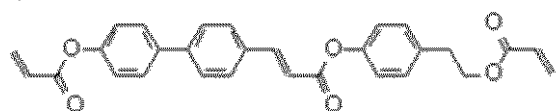
10

20

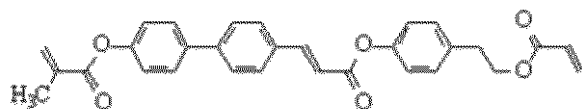
30

40

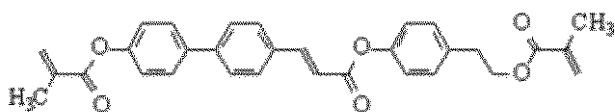
【化 3 8】



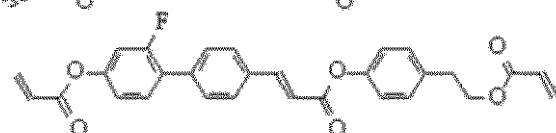
(VIa-1)



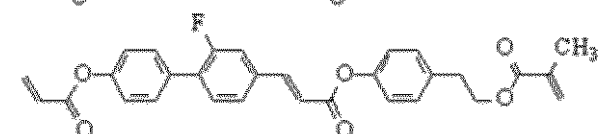
(VIa-2)



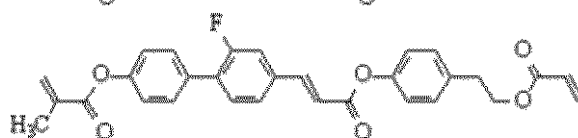
(VIa-3)



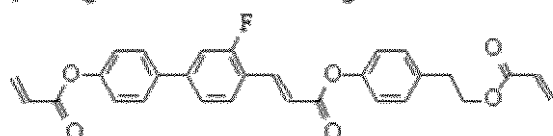
(VIa-4)



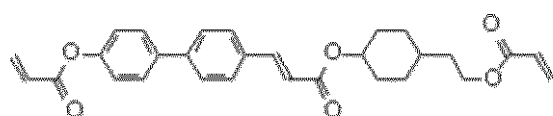
(VIa-5)



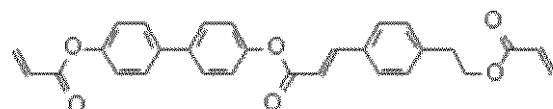
(VIa-6)



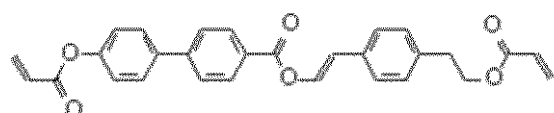
(VIa-7)



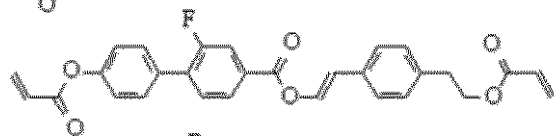
(VIa-8)



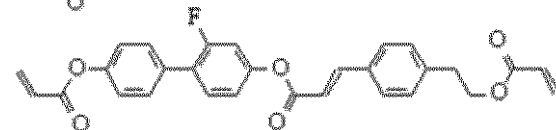
(VIa-9)



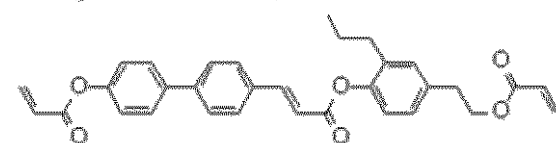
(VIa-10)



(VIa-11)



(VIa-12)



(VIa-13)

【 0 1 6 0 】

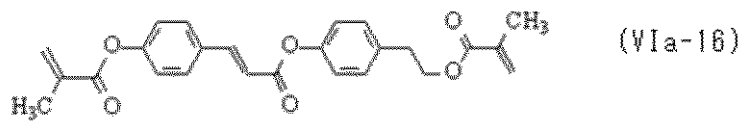
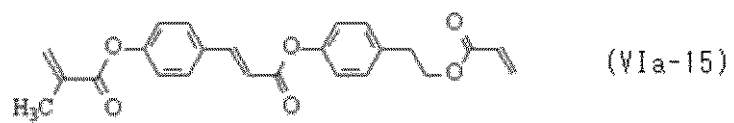
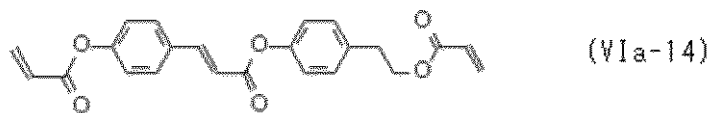
10

20

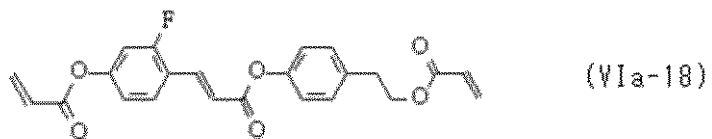
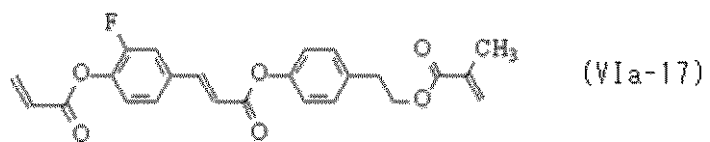
30

40

【化 3 9】



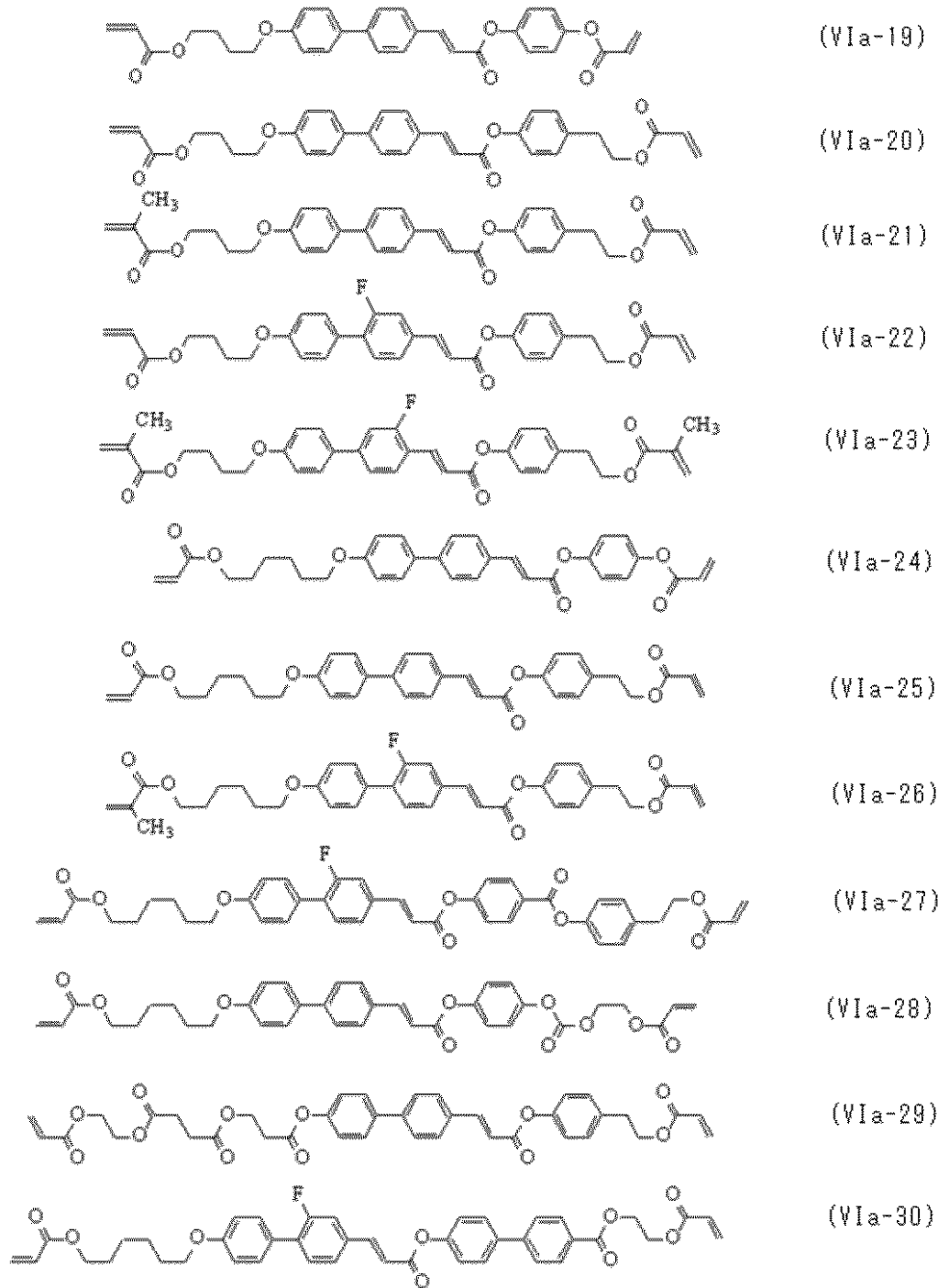
10



20

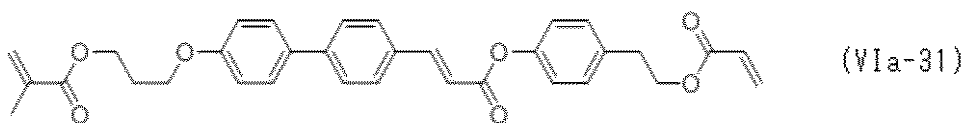
【 0 1 6 1 】

【化 4 0】



【 0 1 6 2】

【化 4 1】



【 0 1 6 3】

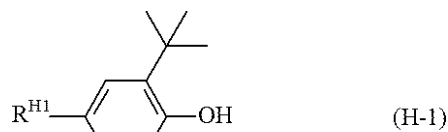
本発明の一般式 (i) で表される化合物と重合性化合物である一般式 (I - 1) を同時に含有する誘電率異方性が負の液晶組成物は、低い粘度 ()、低い回転粘性 (₁) 及び大きな弾性定数 (K ₃₃) が得られるため、これを用いた P S A モード又は P S V A モ

ードの液晶表示素子は高速応答が実現できる。

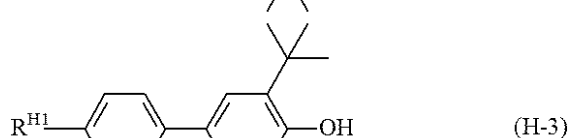
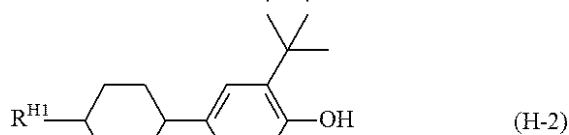
また、酸化防止剤は、一般式 (H-1) から一般式 (H-4) で表されるヒンダードフェノールが好ましい。

【0164】

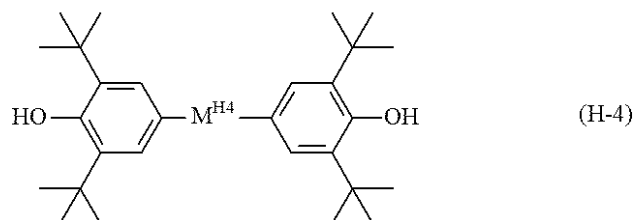
【化42】



10



20



【0165】

一般式 (H-1) から一般式 (H-4) 中、 R^{H1} は炭素原子数 1 から 10 のアルキル基、炭素原子数 1 から 10 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 10 のアルケニル基又は炭素原子数 2 から 10 のアルケニルオキシ基を表すが、基中に存在する 1 個の $-CH_2-$ - 又は非隣接の 2 個以上の $-CH_2-$ - はそれぞれ独立的に $-O-$ - 又は $-S-$ - に置換されても良く、また、基中に存在する 1 個又は 2 個以上の水素原子はそれぞれ独立的にフッ素原子又は塩素原子に置換されても良い。更に具体的には、炭素原子数 2 から 7 のアルキル基、炭素原子数 2 から 7 のアルコキシ基、炭素原子数 2 から 7 のアルケニル基又は炭素原子数 2 から 7 のアルケニルオキシ基であることが好ましく、炭素原子数 3 から 7 のアルキル基又は炭素原子数 2 から 7 のアルケニル基であることが更に好ましい。

30

一般式 (H-4) 中、 M^{H4} は炭素原子数 1 から 15 のアルキレン基 (該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の $-CH_2-$ - は、酸素原子が直接隣接しないように、 $-O-$ -、 $-CO-$ -、 $-COO-$ -、 $-OCO-$ - に置換されていても良い。)、 $-OCH_2-$ -、 $-CH_2O-$ -、 $-COO-$ -、 $-OCO-$ -、 $-CF_2O-$ -、 $-OCF_2-$ -、 $-CF_2CF_2-$ -、 $-CH=CH-COO-$ -、 $-CH=CH-OCO-$ -、 $-COO-CH=CH-$ -、 $-OCO-CH=CH-$ -、 $-CH=CH-$ -、 $-C=C-$ -、単結合、1,4-フェニレン基 (1,4-フェニレン基中の任意の水素原子はフッ素原子により置換されていても良い。) 又はトランス-1,4-シクロヘキシレン基を表すが、炭素原子数 1 から 14 のアルキレン基であることが好ましく、揮発性を考慮すると炭素原子数は大きい数値が好ましいが、粘度を考慮すると炭素原子数は大き過ぎない方が好ましいことから、炭素原子数 2 から 12 が更に好ましく、炭素原子数 3 から 10 が更に好ましく、炭素原子数 4 から 10 が更に好ましく、炭素原子数 5 から 10 が更に好ましく、炭素原子数 6 から 10 が更に好ましい。

40

50

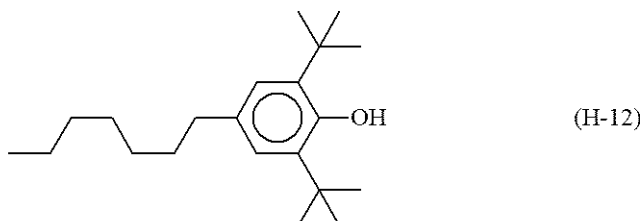
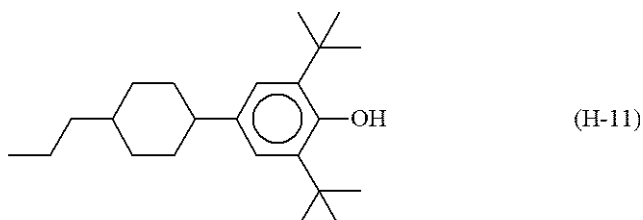
一般式 (H - 1) から一般式 (H - 4) 中、1, 4 - フェニレン基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の - CH = は - N = によって置換されていても良い。また、1, 4 - フェニレン基中の水素原子はそれぞれ独立的に、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良い。一般式 (H - 1) から一般式 (H - 4) 中、1, 4 - シクロヘキシレン基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の - CH₂ - は - O - 又は - S - によって置換されていても良い。また、1, 4 - シクロヘキシレン基中の水素原子はそれぞれ独立的に、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良い。

更に具体的には、例えば、式 (H - 11) から式 (H - 15) が挙げられる。

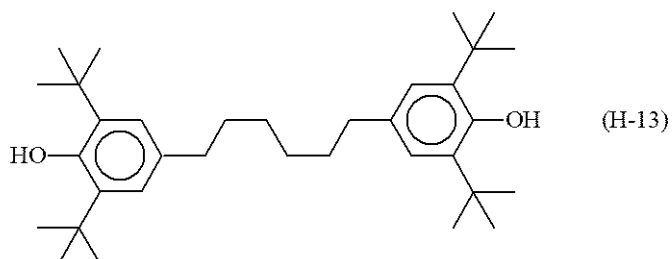
【0166】

【化43】

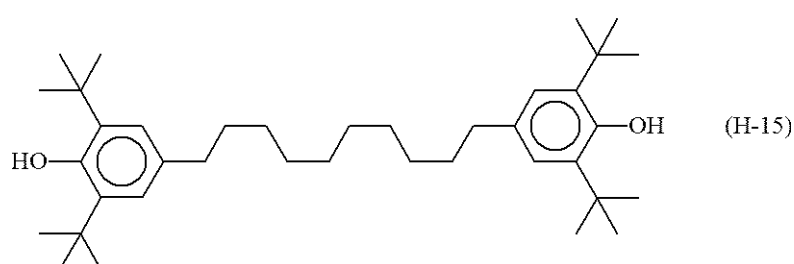
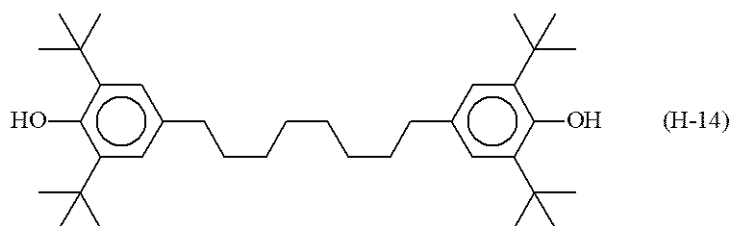
10



20



30



40

【0167】

本発明の液晶組成物は、酸化防止剤を 1 質量 ppm 以上含有しても良いが、10 質量 ppm 以上が好ましく、20 質量 ppm 以上が好ましく、50 質量 ppm 以上が好ましい。酸化防止剤の含有量の上限は 10000 質量 ppm であるが、1000 質量 ppm が好ましく、500 質量 ppm が好ましく、100 質量 ppm が好ましい。

【0168】

本発明において、一般式 (i) で表される化合物は、以下のようにして製造することが

50

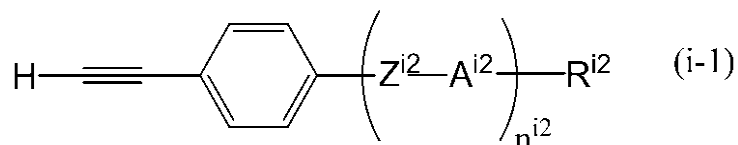
できる。勿論本発明の趣旨及び適用範囲は、これら製造例により制限されるものではない。

(製法 1)

一般式 (i - 1)

【0169】

【化44】



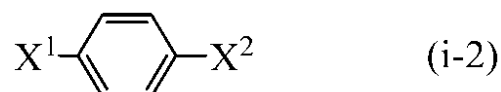
10

【0170】

(式中、 A^{i2} 、 Z^{i2} 、 n^{i2} 及び R^{i2} は一般式 (i) における A^{i2} 、 Z^{i2} 、 n^{i2} 及び R^{i2} と同じ意味を表す。) で表される化合物と、一般式 (i - 2)

【0171】

【化45】

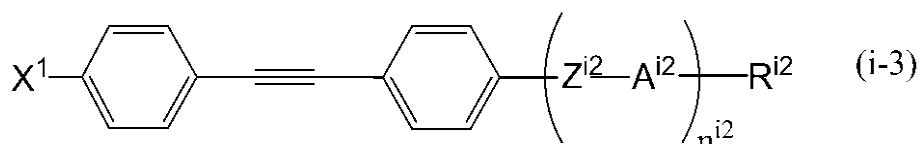


【0172】

(式中、 X^1 及び X^2 はそれぞれ独立して塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、トリフルオロメタンスルホニルオキシ基を表す。) で表される化合物を、有機溶媒中において遷移金属触媒、銅触媒及び塩基の存在下反応させることで、一般式 (i - 3)

【0173】

【化46】



30

【0174】

(式中、 A^{i2} 、 Z^{i2} 、 n^{i2} 及び R^{i2} は一般式 (i) における A^{i2} 、 Z^{i2} 、 n^{i2} 及び R^{i2} と同じ意味を表し、 X^1 は塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、トリフルオロメタンスルホニルオキシ基を表す。) で表される化合物を得ることが出来る。

【0175】

使用する有機溶媒としては、反応を好適に進行させることが出来ればいずれでも構わないが、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル又はテトラヒドロフラン等のエーテル系溶媒又は N, N - ジメチルホルムアミド、N, N - ジメチルアセトアミド又は N - メチルピロリジノン等のアミド系溶媒が好ましく、テトラヒドロフラン、N, N - ジメチルホルムアミド、N, N - ジメチルアセトアミド又は N - メチルピロリジノンが特に好ましい。また、必要に応じて複数の溶媒を混合してもよい。

40

【0176】

反応温度は、反応を好適に進行させることが出来ればいずれでも構わないが、室温から有機溶媒が還流するまでの温度が好ましく、40 から有機溶媒が還流するまでの温度が更に好ましく、60 から溶媒が還流するまでの温度が特に好ましい。

【0177】

使用する銅触媒としては、反応を好適に進行させることが出来ればいずれでも構わないが、塩化銅 (I)、臭化銅 (I) 又はヨウ化銅 (I) が好ましく、ヨウ化銅 (I) であることが更に好ましい。

【0178】

50

使用する遷移金属触媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)、酢酸パラジウム(II)、二塩化ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)、二塩化[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)又は二塩化ビス[ジ-tert-ブチル(4-ジメチルアミノフェニル)ホスフィン]パラジウム(II)等のパラジウム系遷移金属触媒又はニッケル系遷移金属触媒が好ましく、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)、酢酸パラジウム(II)、二塩化ビス[ジ-tert-ブチル(4-ジメチルアミノフェニル)ホスフィン]パラジウム(II)又は二塩化[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)が更に好ましい。また、反応の進行を促進するため、必要に応じてホスフィン系配位子を加えても良い。

10

使用する塩基としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、アンモニア水溶液、トリエチルアミン又はジイソプロピルアミン等のアミン系試薬、ピリジン又は2,6-ジメチルピリジン等のピリジン系試薬、炭酸カリウム、炭酸水素カリウム、炭酸ナトリウム又は炭酸セシウム等の炭酸塩が好ましく、トリエチルアミン、ジイソプロピルアミンが更に好ましい。

【0179】

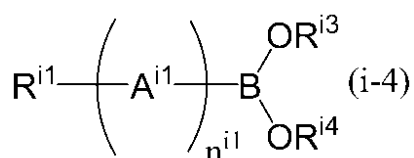
目的とする一般式(i-3)で表される化合物を効率よく得るためには、一般式(i-2)における X^1 及び X^2 が異なることが好ましい。

続いて、一般式(i-3)で表される化合物を、一般式(i-4)

20

【0180】

【化47】



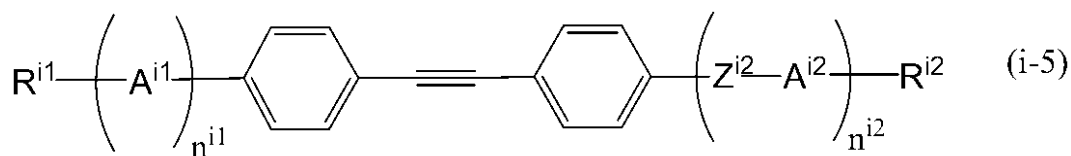
【0181】

(式中、 A^{i1} 、 n^{i1} 及び R^{i1} は一般式(i)における A^{i1} 、 n^{i1} 及び R^{i1} と同じ意味を表し、 R^{i3} 及び R^{i4} はそれぞれ独立して直鎖であっても又は分岐していても良い炭素数1から5のアルキル基を表す。)で表される化合物を、有機溶媒中において遷移金属触媒及び塩基の存在下反応させる事で、一般式(i-5)

30

【0182】

【化48】



【0183】

(式中、 A^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i2} 、 R^{i1} 、 R^{i2} 、 n^{i2} 及び n^{i1} は一般式(i)における A^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i2} 、 R^{i1} 、 R^{i2} 、 n^{i2} 及び n^{i1} と同じ意味を表す。)で表される化合物を得ることが出来る。

40

【0184】

使用する有機溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、1,4-ジオキサン又はテトラヒドロフラン等のエーテル系溶媒、ヘキサン、ヘプタン、トルエン又はキシレン等の炭化水素系溶媒、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド等のN-メチルピロリジノン等のアミド系溶媒、メタノール、エタノール、プロパノール又はイソプロピルアルコール等のアルコール系溶媒が好ましく、1,4-ジオキサン、テトラヒドロフラン

50

、メタノール、エタノールが更に好ましい。

【0185】

反応温度は、反応を好適に進行する温度であればいずれでも構わないが、室温から有機溶媒が還流するまでの温度が好ましく、40 から有機溶媒が還流するまでの温度が更に好ましく、60 から有機溶媒が還流するまでの温度が特に好ましい。

使用する遷移金属触媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)、酢酸パラジウム(II)、二塩化ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)、二塩化[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)又は二塩化ビス[ジ-tert-ブチル(4-ジメチルアミノフェニル)ホスフィン]パラジウム(II)等のパラジウム系遷移金属触媒又はニッケル系遷移金属触媒が好ましく、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)、酢酸パラジウム(II)、二塩化ビス[ジ-tert-ブチル(4-ジメチルアミノフェニル)ホスフィン]パラジウム(II)又は二塩化[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)が更に好ましい。また、反応の進行を促進するため、必要に応じてホスフィン系配位子を加えても良い。

10

使用する塩基としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム等の水酸化アルカリ金属類、炭酸ナトリウム炭酸水素ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸水素カリウム、炭酸セシウム等の炭酸塩類が好ましく、炭酸カリウム又は炭酸セシウムである事が更に好ましい。また、必要に応じて水溶液として使用する事も好ましい。

20

続いて、一般式(i-5)で表される化合物を有機溶媒中、金属触媒存在下、水素ガスと反応させる事で一般式(i)で表される化合物を得ることが出来る。

【0186】

使用する有機溶剤としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、ジイソプロピルエーテル、ジエチルエーテル、1,4-ジオキサン又はテトラヒドロフラン等のエーテル系溶媒、ヘキサン、ヘプタン、トルエン又はキシレン等の炭化水素系溶媒、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロピルアルコール又はブタノール等のアルコール系溶媒、酢酸エチル又は酢酸ブチル等のエステル系溶媒が好ましく、テトラヒドロフラン、ヘキサン、ヘプタン、トルエン、エタノール又は酢酸エチルが好ましい。また、必要に応じて塩酸、酢酸又は硫酸等の酸を添加する事も好ましい。

30

【0187】

反応温度としては、反応を好適に進行させる温度であればいずれでも構わないが、0 から80 が好ましく、室温から60 が更に好ましい。

【0188】

使用する金属触媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、パラジウム炭素、ルテニウム炭素、白金黒又は酸化白金が好ましく、パラジウム炭素が更に好ましい。

【0189】

反応する際の水素圧は、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、大気圧から0.5MPaであることが好ましく、0.2MPaから0.5MPaであることが更に好ましい。

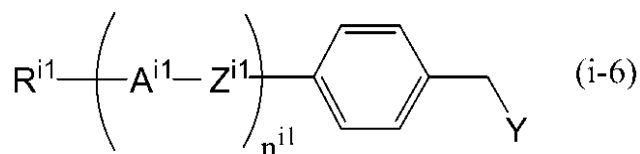
40

(製法2)

一般式(i-6)

【0190】

【化 4 9】



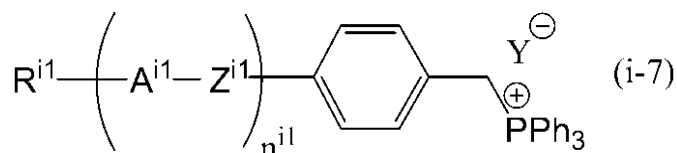
【 0 1 9 1】

(式中、 A^{i1} 、 Z^{i1} 、 n^{i1} 及び R^{i1} は一般式 (i) における A^{i1} 、 Z^{i1} 、 n^{i1} 及び R^{i1} と同じ意味を表し、Y はそれぞれ独立して塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子を表す。) で表される化合物を有機溶媒中又は無溶媒条件においてトリフェニルホスフィンと反応させる事で、一般式 (i - 7)

10

【 0 1 9 2】

【化 5 0】



【 0 1 9 3】

(式中、 A^{i1} 、 Z^{i1} 、 n^{i1} 及び R^{i1} は一般式 (i) における A^{i1} 、 Z^{i1} 、 n^{i1} 及び R^{i1} と同じ意味を表し、Y はそれぞれ独立して塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子を表し、Ph はフェニル基を表す。) で表される化合物を得ることが出来る。

20

【 0 1 9 4】

有機溶媒を使用する場合には、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、ヘキサン、ヘプタン、シクロヘキサン又はメチルシクロヘキサン等の飽和炭化水素系溶媒、トルエン、キシレン又はメシチレン等の芳香族系溶媒、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、テトラヒドロフラン又は 1, 4 - ジオキサン等のエーテル系溶媒、N, N - ジメチルホルムアミド、N, N - ジメチルアセトアミド等の N - メチルピロリジノン等のアミド系溶媒が好ましく、飽和炭化水素系溶媒又は芳香族系溶媒が更に好ましく、トルエン、キシレンであることが特に好ましい。

30

【 0 1 9 5】

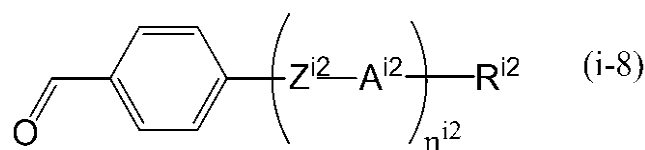
反応温度としては、反応を好適に進行させる温度であればいずれの温度でも構わないが、室温から有機溶媒が還流するまでの温度が好ましく、50 から有機溶媒が還流するまでの温度が更に好ましく、90 から有機溶媒が還流するまでの温度であることが特に好ましい。

【 0 1 9 6】

続いて、一般式 (i - 7) で表される化合物を有機溶媒中塩基と反応させてリンイリド試薬を調製したのち、一般式 (i - 8)

【 0 1 9 7】

【化 5 1】



40

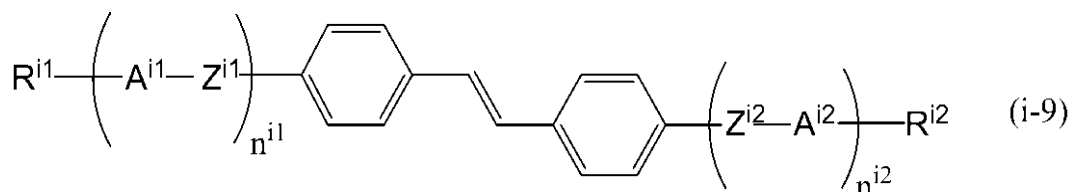
【 0 1 9 8】

(式中、 A^{i2} 、 Z^{i2} 、 n^{i2} 及び R^{i2} は一般式 (i) における A^{i2} 、 Z^{i2} 、 n^{i2} 及び R^{i2} と同じ意味を表す。) で表される化合物と反応させる事で、一般式 (i - 9)

【 0 1 9 9】

50

【化 5 2】



【 0 2 0 0 】

(式中、 A^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i1} 、 Z^{i2} 、 R^{i1} 、 R^{i2} 、 n^{i2} 及び n^{i1} は一般式 (i) における A^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i1} 、 Z^{i2} 、 R^{i1} 、 R^{i2} 、 n^{i2} 及び n^{i1} と同じ意味を表す。) で表される化合物を得ることが出来る。

10

【 0 2 0 1 】

使用する有機溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、テトラヒドロフラン又は 1 , 4 - ジオキサン等のエーテル系溶媒、ヘキサン、ヘプタン、シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、トルエン又はキシレン等の炭化水素系溶媒であることが好ましく、テトラヒドロフランであることが好ましい。また、必要に応じて複数の溶媒を混合して使用することも好ましい。

【 0 2 0 2 】

反応温度は、好適に反応を進行させる温度であればいずれの温度でも構わないが、 - 6 0 から 2 0 であることが好ましく、 - 4 0 から 0 であることが更に好ましい。

20

【 0 2 0 3 】

使用する塩基としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム等の水酸化物塩、ナトリウムメトキシド、ナトリウムエトキシド又はカリウムターシャリーブトキシド等のアルコキシド系試薬、ブチルリチウム、セカンダリーブチルリチウム又はターシャリーブチルリチウム等のアルキルリチウム系試薬、水素化ナトリウムであることが好ましく、水酸化カリウム、カリウムターシャリーブトキシド、水素化ナトリウム、ブチルリチウムであることが更に好ましい。

続いて、一般式 (i - 9) で表される化合物を有機溶媒中、金属触媒存在下、水素ガスと反応させる事で一般式 (i) で表される化合物を得ることが出来る。

30

【 0 2 0 4 】

使用する有機溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、ジイソプロピルエーテル、ジエチルエーテル、1 , 4 - ジオキサン又はテトラヒドロフラン等のエーテル系溶媒、ヘキサン、ヘプタン、トルエン又はキシレン等の炭化水素系溶媒、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロピルアルコール又はブタノール等のアルコール系溶媒、酢酸エチル又は酢酸ブチル等のエステル系溶媒が好ましく、テトラヒドロフラン、ヘキサン、ヘプタン、トルエン、エタノール又は酢酸エチルが好ましい。また、必要に応じて塩酸、酢酸又は硫酸等の酸を添加する事も好ましい。

【 0 2 0 5 】

反応温度としては、反応を好適に進行させる温度であればいずれでも構わないが、 0 から 8 0 が好ましく、室温から 6 0 が更に好ましい。

40

【 0 2 0 6 】

使用する金属触媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、パラジウム炭素、ルテニウム炭素、白金黒又は酸化白金が好ましく、パラジウム炭素が更に好ましい。

【 0 2 0 7 】

反応する際の水素圧は、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、大気圧から 0 . 5 M P a であることが好ましく、 0 . 2 M P a から 0 . 5 M P a であることが更に好ましい。

【 0 2 0 8 】

50

本発明の液晶組成物を用いた液晶表示素子は、表示不良がない又は抑制された、表示品位の優れた応答速度の速いものであり、特に、アクティブマトリックス駆動のVA型、PSVA型、PSA型、FFS型、IPS型又はECB型に適用できる。

【実施例】

【0209】

以下に実施例を挙げて本発明を更に詳述するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。また、以下の実施例及び比較例の組成物における「%」は『質量%』を意味する。相転移温度の測定は温度調節ステージを備えた偏光顕微鏡及び示差走査熱量計(DSC)を併用して行った。

【0210】

化合物記載に下記の略号を使用する。

【0211】

DMF : N, N - ジメチルホルムアミド

THF : テトラヒドロフラン

Me : メチル基、Et : エチル基、Pr : n - プロピル基

また、実施例において化合物の記載について以下の略号を用いる。

(側鎖)

- n	- C _n H _{2n+1}	炭素数 n の直鎖状のアルキル基
n -	C _n H _{2n+1} -	炭素数 n の直鎖状のアルキル基
- On	- O C _n H _{2n+1}	炭素数 n の直鎖状のアルコキシル基
n O -	C _n H _{2n+1} O -	炭素数 n の直鎖状のアルコキシル基
- V	- CH = CH ₂	
V -	CH ₂ = CH -	
- V1	- CH = CH - CH ₃	
1V -	CH ₃ - CH = CH -	
- 2V	- CH ₂ - CH ₂ - CH = CH ₃	
V2 -	CH ₃ = CH - CH ₂ - CH ₂ -	
- 2V1	- CH ₂ - CH ₂ - CH = CH - CH ₃	
1V2 -	CH ₃ - CH = CH - CH ₂ - CH ₂ -	

(連結基)

- CF ₂ O -	- CF ₂ - O -
- OCF ₂ -	- O - CF ₂ -
- 1O -	- CH ₂ - O -
- O1 -	- O - CH ₂ -
- COO -	- COO -
- 2 -	- CH ₂ - CH ₂ -

(環構造)

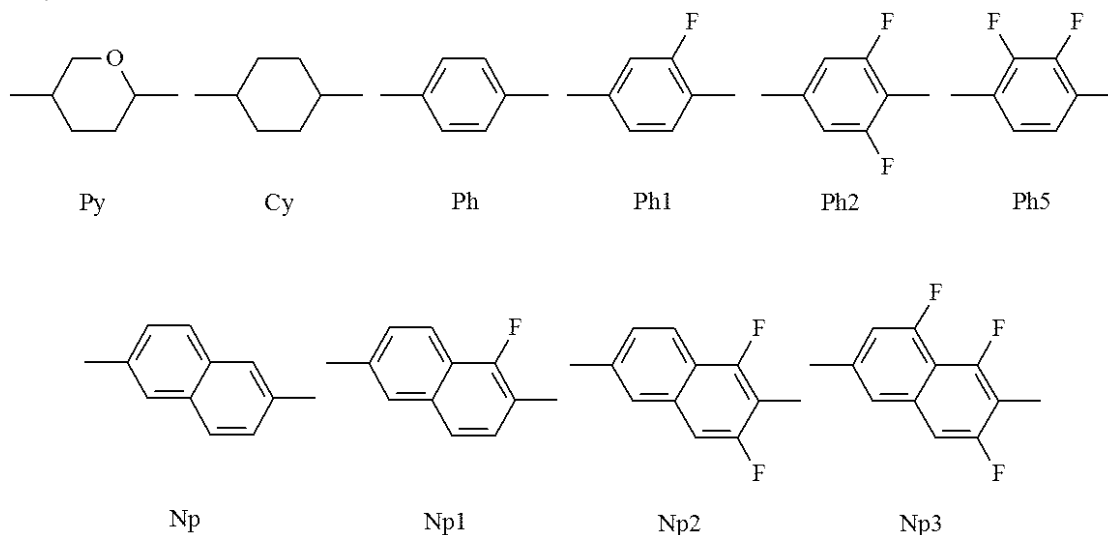
【0212】

10

20

30

【化53】



10

【0213】

実施例中、測定した特性は以下の通りである。

【0214】

T_{NI} : ネマチック相 - 等方性液体相転移温度 ()

n : 25 における屈折率異方性

: 25 における誘電率異方性

: 25 における粘度 (mPa·s)

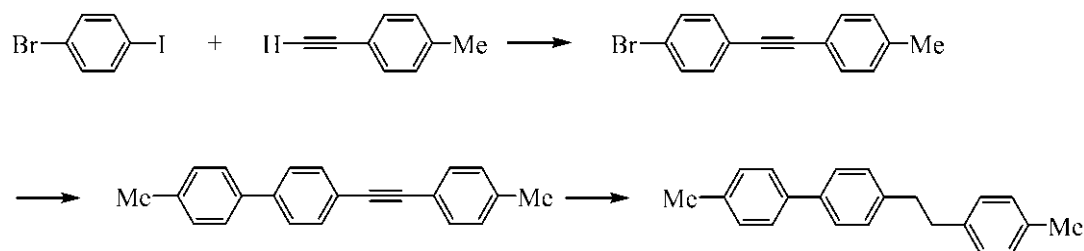
η_1 : 25 における回転粘性 (mPa·s)

K_{33} : 25 における弾性定数 K_{33} (pN)

(実施例1) 4-メチル-4'-[2-(4-メチルフェニル)-1-エチル]ビフェニル (1-Ph-Ph-2-Ph-1) の製造

【0215】

【化54】



30

【0216】

(1-1) 乾燥室素雰囲気下、4-ヨードブロモベンゼン (55.0 g)、ヨウ化銅 (I) (1.36 g)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (4.13 g)、DMF (200 mL) 及びトリエチルアミン (100 mL) を混合し、75 に加熱した。加熱下、4-メチルフェニルアセチレン (24.8 g) を DMF (100 mL) に溶解させた溶液を滴下した後、さらに3時間撹拌した。反応液を室温まで冷却した後、水 (200 mL) 及びトルエン (200 mL) を加えて分液した。有機層を飽和食塩水 (200 mL) で2回洗浄したのち、無水硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。硫酸ナトリウムをろ過し、減圧濃縮したのち、シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。さらに、アセトン及びトルエンの混合溶媒から再結晶する事で、4-プロモ-4'-メチルトラン (50.0 g) を得た。

40

(1-2) 乾燥室素雰囲気下、工程(1-1)で得られた4-プロモ-4'-メチルトラン (20.0 g)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (0.52 g)、THF (100 mL) 及び2 mol/L炭酸カリウム水溶液 (75 mL) を混合し、60 に加熱した。加熱下、4-メチルフェニルホウ酸 (11.0 g) を THF (2

50

5 mL) に溶解させた溶液を滴下したのち、さらに 2 時間攪拌した。反応液を氷冷したのち、水 (400 mL) を加える事で目的化合物を析出させた。目的化合物を濾過したのち、シリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製する事で 4 - (4 - メチルフェニル) - 4' - メチルトラン (21.3 g) を得た。

(1 - 3) 工程 (1 - 2) で得られた 4 - (4 - メチルフェニル) - 4' - メチルトラン (21.3 g)、5 wt % パラジウム炭素 (含水品) (1.1 g) 及び THF (300 mL) をオートクレーブ反応器に仕込み、水素雰囲気下 (0.5 MPa)、室温に於いて 2 時間攪拌した。反応液を濾過する事でパラジウム触媒を除去したのち、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製したのち、トルエン及びアセトンの混合溶媒から再結晶する事で、4 - メチル - 4' - [2 - (4 - メチルフェニル) - 1 - エチル] ビフェニルを 15.8 g 得た。

10

相転移温度 () : Cr 120 (N 112) Iso

MS m/z : 286 [M⁺]

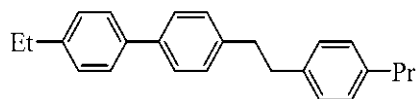
¹H NMR (CDCl₃、TMS 内部標準) (ppm) = 7.50 (4H, t, J = 6.84 Hz), 7.26 (4H, t, J = 6.44 Hz), 7.12 (4H, s), 2.92 (4H, s), 2.39 (3H, s), 2.33 (1H, s)

(実施例 2) 4 - エチル - 4' - [2 - (4 - プロピルフェニル) - 1 - エチル] ビフェニル (2 - Ph - Ph - 2 - Ph - 3) の製造

【0217】

【化 55】

20



【0218】

実施例 1 に記載の方法と同様にして製造する事で、4 - エチル - 4' - [2 - (4 - プロピルフェニル) - 1 - エチル] ビフェニル (2 - Ph - Ph - 2 - Ph - 3) を得た。

相転移温度 () : Cr 88 SmX 121 Iso

MS m/z : 328 [M⁺]

¹H NMR (CDCl₃、TMS 内部標準) (ppm) = 7.51 (2H, dd, J₁ = 1.88 Hz, J₂ = 8.28 Hz), 7.26 (4H, dd, J₁ = 3.16 Hz, J₂ = 8.14 Hz), 7.13 (4H, d, J = 4.60 Hz), 2.95 (4H, s), 2.69 (2H, q, J = 7.60 Hz), 2.56 (2H, t, J = 7.52 Hz), 1.63 (2H, sex, J = 7.56 Hz), 1.28 (3H, t, J = 7.56 Hz), 0.94 (3H, t, J = 7.32 Hz)

30

(比較例 1、実施例 3 および実施例 4)

比較例 1 (LC - 1) に対し、実施例 1 において製造した「1 - Ph - Ph - 2 - Ph - 1」を含有する実施例 3 (EX - 3) および実施例 3 よりも T_{NI} の値が大きくなるように調製した実施例 4 (EX - 4) の液晶組成物を調製し、その物性値を測定した。液晶組成物の構成とその物性値の結果は表 1 のとおりであった。

【0219】

40

【表 1】

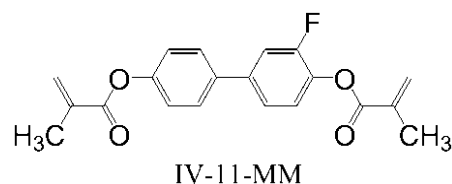
	比較例 1 L C - 1	実施例 3 E X - 3	実施例 4 E X - 4
3-Cy-Cy-V1	12	12	12
3-Cy-Cy-2	20	20	22
3-Cy-Cy-4	4	4	2
3-Ph-Ph-1	10	10	8
3-Cy-Cy-Ph-1			2
3-Cy-Ph-Ph-2	8		
1-Ph-Ph-2-Ph-1 一般式 (i a - 1)		8	8
3-Cy-1O-Ph5-O2	11	11	11
2-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	11	11	11
3-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	11	11	11
1V-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	8	8	8
3-Ph-2-Ph-Ph5-O2	5	5	5
合計	100	100	100
T _M [°C]	76.2	72.7	75.7
Δn	0.096	0.100	0.099
γ ₁ [mPa・s]	93	85	91
Δε	-3.1	-3.1	-3.1
K33 [pN]	15.2	16.2	16.8
γ ₁ / K33	6.1	5.2	5.4

【 0 2 2 0 】

一般式 (i a - 1) で表される化合物である「 1 - P h - P h - 2 - P h - 1 」を含有する実施例 3 および実施例 4 は、比較例 1 と比較して、 n が大きく、 γ_1 / K_{33} が顕著に小さいため、高速応答のテレビ用液晶組成物として非常に有用であることが確認された。また、実施例 3 および実施例 4 は高い V H R が得られることを確認した。なお、これを用いた液晶表示素子には滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がないことを確認した。なお、滴下痕とは、黒表示した場合に液晶組成物を滴下した痕が白く浮かび上がる現象をいい、液晶表示素子作製時に液晶組成物を基板へ注入する方法として滴下注入 (O D F : One Drop Fill) 法を行った際に生じる。更に、実施例 3 および実施例 4 の液晶組成物に、一般式 (I V) で表される重合性化合物として式 (I V - 1 1 - M M) を 3 5 0 0 p p m 添加して P S A 液晶表示素子を作製したところ、良好な配向状態が得られ、滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がないこと、高い透過率および高速応答であることを確認した。

【 0 2 2 1 】

【化 5 6】



【 0 2 2 2 】

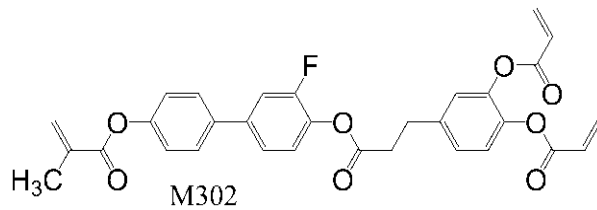
これらの重合性液晶組成物に式 (H - 1 4) で表される酸化防止剤を 5 0 p p m 添加したところ、良好な配向状態が得られ、高い透過率および高速応答であることに加えて、より高い V H R であることを確認した。

更に、実施例 3 および実施例 4 の液晶組成物に、重合性化合物として式 (M 3 0 2) を 4

0 0 0 p p m 添加して P S A 液晶表示素子を作製したところ、良好な配向状態が得られ、滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がないこと、高い透過率および高速応答であることを確認した。

【 0 2 2 3 】

【 化 5 7 】



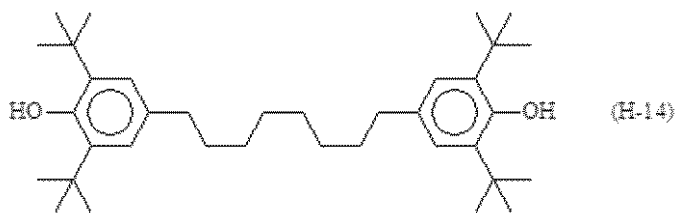
10

【 0 2 2 4 】

これらの重合性液晶組成物に式 (H - 1 4)

【 0 2 2 5 】

【 化 5 8 】



20

【 0 2 2 6 】

で表される酸化防止剤を 1 0 0 p p m 添加したところ、良好な配向状態が得られ、滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がないこと、高い透過率および高速応答であることに加えて、より高い V H R であることを確認した。

実施例 3 および実施例 4 の液晶組成物に、重合性化合物として式 (M 3 0 2) を 2 0 0 0 p p m、式 (I V - 1 1 - M M) を 2 0 0 0 p p m 添加して、P S A 液晶表示素子を作製したところ、良好な配向状態が得られ、高い透過率および高速応答であることを確認した。これらの重合性液晶組成物に式 (H - 1 4) で表される酸化防止剤を 6 0 p p m 添加したところ、良好な配向状態が得られ、滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がないこと、高い透過率および高速応答であることに加えて、より高い V H R であることを確認した。

30

(実施例 5、実施例 6、実施例 7 および実施例 8)

一般式 (i a - 1) および / または一般式 (i b - 1) および / または一般式 (i b - 2) の化合物を含有する実施例 5 (E X - 5)、実施例 6 (E X - 6)、実施例 7 (E X - 7) および実施例 8 (E X - 8) の液晶組成物を調製し、その物性値を測定した。液晶組成物の構成とその物性値の結果は表 2 のとおりであった。

【 0 2 2 7 】

【表 2】

	実施例 5 E X - 5	実施例 6 E X - 6	実施例 7 E X - 7	実施例 8 E X - 8
3-Cy-Cy-VI	6			
3-Cy-Cy-V	35	40	40	40
3-Ph-Ph-I	8	7	7	
1-Ph-Ph-2-Ph-I 一般式 (i a - 1)	6	6	6	4
3-Ph-Ph-2-Ph-I 一般式 (i a - 1)				4
3-Cy-PhI-Ph-2-Ph-I 一般式 (i b - 1)				4
1-Ph-PhI-Ph-2-Ph-I 一般式 (i b - 2)			2	
3-Cy-PhI-Ph-2-Ph-3 一般式 (i b - 1)		4	2	4
3-Cy-Ph5-O2				12
3-Cy-1O-Ph5-O2	7	7	7	7
2-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	11	11	8	
3-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	11	11	12	10
1V-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	6	6	6	8
3-Cy-Ph-Ph5-O2			6	3
1-Ph-2-Ph-Ph5-O2				4
2-Ph-2-Ph-Ph5-O2	5	4		
3-Ph-2-Ph-Ph5-O2	5	4	4	
合計	100	100	100	100
T _M [°C]	73.1	76.4	80.3	77
Δn	0.100	0.101	0.103	0.100
γ ₁ [mPa・s]	75	77	83	84
Δε	-2.7	-2.7	-2.6	-2.7
K33 [pN]	15.6	15.9	16.9	17
γ ₁ / K33	4.8	4.8	4.9	4.9

【 0 2 2 8 】

これらの液晶組成物は、 n が大きく、 γ_1 / K_{33} が顕著に小さいため、高速応答のテレビ用液晶組成物として非常に有用であることが確認された。実際にVA型液晶表示素子を作製し、滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がないことを確認した。これの応答速度を測定したところ、 $3.4 \mu m$ のセル厚のときに $3.7 msec$ という高速応答が得られた。また、実施例 3 および実施例 4 と同様に P S A 型液晶表示素子とした場合にも同様の結果が得られた。

【 0 2 2 9 】

(実施例 9)

一般式 (i a - 1) および一般式 (i b - 1) の化合物を含有する実施例 9 (E X - 9) の液晶組成物を調製し、その物性値を測定した。液晶組成物の構成とその物性値の結果は表 3 のとおりであった。

【 0 2 3 0 】

【表 3】

	実施例 9 E X - 9
3-Cy-Cy-V	30
1-Ph-Ph-2-Ph-1 一般式 (i a - 1)	4
3-Ph-Ph-2-Ph-1 一般式 (i a - 1)	4
3-Cy-Ph1-Ph-2-Ph-1 一般式 (i b - 1)	3
3-Cy-Ph1-Ph-2-Ph-2 一般式 (i b - 1)	2
3-Cy-Ph1-Ph-2-Ph-3 一般式 (i b - 1)	3
3-Ph-Ph5-O2	14
3-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	14
1V-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	8
3-Cy-Cy-Ph5-O2	8
2-Cy-Ph-Ph5-O2	5
3-Cy-Ph-Ph5-O2	5
合計	100
T _{NI} [°C]	81.2
T _{CN} [°C]	G-50
Δn	0.116
γ ₁ [mPa・s]	103
Δε	-3.3
K33 [pN]	16.8
γ ₁ / K33	6.1

10

20

【 0 2 3 1 】

これらの液晶組成物は、 Δn が大きく、 γ_1 / K_{33} が顕著に小さいため、高速応答のテレビ用液晶組成物として非常に有用であることが確認された。実際にVA型液晶表示素子を作製し、応答速度を測定したところ、 $2.9 \mu m$ のセル厚のときに $3.2 msec$ という高速応答が得られた。また、FFS型液晶表示素子とした場合にも同様に優れた電気光学特性が得られた。

30

【 0 2 3 2 】

(実施例 10 および 実施例 11)

一般式 (i a - 1) の化合物を含有する実施例 10 (E X - 10) 及び実施例 11 (E X - 11) の液晶組成物を調製し、その物性値を測定した。液晶組成物の構成とその物性値の結果は表 4 のとおりであった。

【 0 2 3 3 】

【表 4】

	実施例 1 0 E X - 1 0	実施例 1 1 E X - 1 1
3-Cy-Cy-V1	12	12
3-Cy-Cy-2	20	20
3-Cy-Cy-4	4	4
3-Ph-Ph-1	10	10
1-Ph-Ph-2-Ph-1 一般式 (i a - 1)	8	
3-Ph-Ph-2-Ph-1 一般式 (i a - 1)		8
3-Cy-1O-Ph5-O2	11	11
2-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	11	11
3-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	11	11
1V-Cy-Cy-1O-Ph5-O2	8	8
3-Ph-2-Ph-Ph5-O2	5	5
合計	100	100
T _{NI} [°C]	72.7	72.2
Δn	0.100	0.099
γ_1 [mPa·s]	86	90
$\Delta \epsilon$	-3.1	-3.1
K33 [pN]	16.1	15.7
$\gamma_1 / K33$	5.3	5.7

【 0 2 3 4 】

これらの液晶組成物は、 n が大きく、 γ_1 / K_{33} が顕著に小さいため、高速応答のテレビ用液晶組成物として非常に有用であることが確認された。特に、1-Ph-Ph-2-Ph-1を用いた実施例 1 0 は、 γ_1 / K_{33} が実施例 1 1 の値に対して約 1 0 % 程度も小さくなることが確認された。E C - 1 0 及び E X - 1 1 の液晶組成物を用いて実際に VA 型液晶表示素子を作製し、応答速度を測定したところ、 $3.15 \mu\text{m}$ のセル厚のときに 3.2 msec 及び 3.5 msec という高速応答が得られた。また、F F S 型液晶表示素子とした場合にも同様に優れた電気光学特性が得られた。

(比較例 2、3 および実施例 1 2、1 3)

比較例 2 (L C 2) 及び比較例 3 (L C 3) に対し、一般式 (i b - 1) 及び一般式 (i b - 2) を含有する実施例 1 2 および実施例 1 3 の液晶組成物を調製し、その物性値を測定した。液晶組成物の構成とその物性値の結果は表 3 のとおりであった。

【 0 2 3 5 】

【表 5】

		比較例 2	実施例 1 2	比較例 3	実施例 1 3
		L C - 2	E X - 1 2	L C - 3	E X - 1 3
3-Cy-Cy-2		15	15	15	15
3-Cy-Cy-4		5	5	5	5
3-Cy-Cy-5		5	5	5	5
3-Ph-Ph-1		5	5	5	5
3-Cy-Cy-Ph-1		7	7	3	3
3-Cy-Ph-Ph-2		6	2	8	4
5-Cy-Ph-Ph-2		6	2	8	4
3-Cy-Ph1-Ph-2-Ph-1	一般式 (i b - 1)		4		4
2-Ph-Ph1-Ph-2-Ph-3	一般式 (i b - 2)		4		4
3-Cy-1O-Ph5-O1		6	6	6	6
3-Cy-1O-Ph5-O2		6	6	6	6
2-Cy-Cy-1O-Ph5-O2		11	11	11	11
3-Cy-Cy-1O-Ph5-O2		11	11	11	11
1V-Cy-Cy-1O-Ph5-O2		5	5	5	5
3-Cy-Ph-Ph5-O3		6	6	6	6
3-Cy-Ph-Ph5-O4		6	6	6	6
合計		100	100	100	100
T_{NI} [°C]		96.2	100.0	95.4	99.4
Δn		0.103	0.108	0.106	0.111
η_1 [mPa·s]		141	163	134	158
$\Delta\epsilon$		-3.5	-3.6	-3.4	-3.5

【 0 2 3 6 】

一般式 (i b - 1) 及び一般式 (i b - 2) を含有する実施例 1 2 は、比較例 2 と比較して、 T_{NI} が高くなり、 n が大きくなった。同様に、一般式 (i b - 1) 及び一般式 (i b - 2) を含有する実施例 1 3 は、比較例 3 と比較して、 T_{NI} が高くなり、 n が大きくなった。また、実施例 1 2 及び実施例 1 3 は高い V H R が得られることを確認した。実施例 1 2 及び実施例 1 3 の液晶組成物を用いた液晶表示素子は、滴下痕、焼き付き、表示ムラ等の表示不良がないことを確認した。以上のことから、本発明の液晶組成物は、屈折率異方性 (n) が大きく、回転粘性 (η_1) が小さく、弾性定数 (K_{33}) が大きく、更に、電圧保持率 (V H R) が高いというバランスに優れた特性の負の誘電率異方性 () を有するものであり、これを用いた液晶表示素子は滴下痕や焼き付きや表示ムラ等の表示不良がない又は抑制された、表示品位の優れた応答速度の速いものであることが確認された。

フロントページの続き

(51)Int.Cl.			F I		
C 0 9 K	19/32	(2006.01)	C 0 9 K	19/32	
C 0 9 K	19/54	(2006.01)	C 0 9 K	19/54	Z
C 0 7 C	15/18	(2006.01)	C 0 7 C	15/18	C S P
C 0 7 C	25/13	(2006.01)	C 0 7 C	25/13	
C 0 7 C	25/18	(2006.01)	C 0 7 C	25/18	
G 0 2 F	1/13	(2006.01)	G 0 2 F	1/13	5 0 0

審査官 西澤 龍彦

- (56)参考文献 国際公開第97/036847(WO,A1)
 特開2000-053602(JP,A)
 国際公開第99/021816(WO,A1)
 特開2013-224375(JP,A)
 特開平10-045639(JP,A)
 特開2004-115475(JP,A)
 国際公開第00/039063(WO,A1)

- (58)調査した分野(Int.Cl.,DB名)
 C 0 9 K 1 9 / 0 0
 G 0 2 F 1 / 1 3
 C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)