

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6624305号  
(P6624305)

(45) 発行日 令和1年12月25日 (2019. 12. 25)

(24) 登録日 令和1年12月6日 (2019. 12. 6)

(51) Int. Cl.	F I	
C O 9 K 19/56 (2006. 01)	C O 9 K 19/56	
C O 9 K 19/38 (2006. 01)	C O 9 K 19/38	
C O 9 K 19/54 (2006. 01)	C O 9 K 19/54	Z
C O 9 K 19/30 (2006. 01)	C O 9 K 19/30	
C O 9 K 19/32 (2006. 01)	C O 9 K 19/32	
請求項の数 12 (全 186 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号	特願2018-552896 (P2018-552896)	(73) 特許権者	000002886
(86) (22) 出願日	平成30年5月17日 (2018. 5. 17)		D I C株式会社
(86) 国際出願番号	PCT/JP2018/019055		東京都板橋区坂下3丁目35番58号
(87) 国際公開番号	W02018/221236	(74) 代理人	100177471
(87) 国際公開日	平成30年12月6日 (2018. 12. 6)		弁理士 小川 眞治
審査請求日	平成30年10月5日 (2018. 10. 5)	(74) 代理人	100163290
(31) 優先権主張番号	特願2017-109172 (P2017-109172)		弁理士 岩本 明洋
(32) 優先日	平成29年6月1日 (2017. 6. 1)	(74) 代理人	100149445
(33) 優先権主張国・地域又は機関	日本国 (JP)		弁理士 大野 孝幸
早期審査対象出願		(72) 発明者	間宮 純一
			埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472番地1
			D I C株式会社 埼玉工場内
		最終頁に続く	

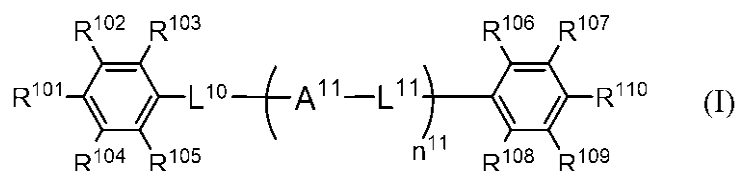
(54) 【発明の名称】 重合性モノマー、それを用いた液晶組成物及び液晶表示素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

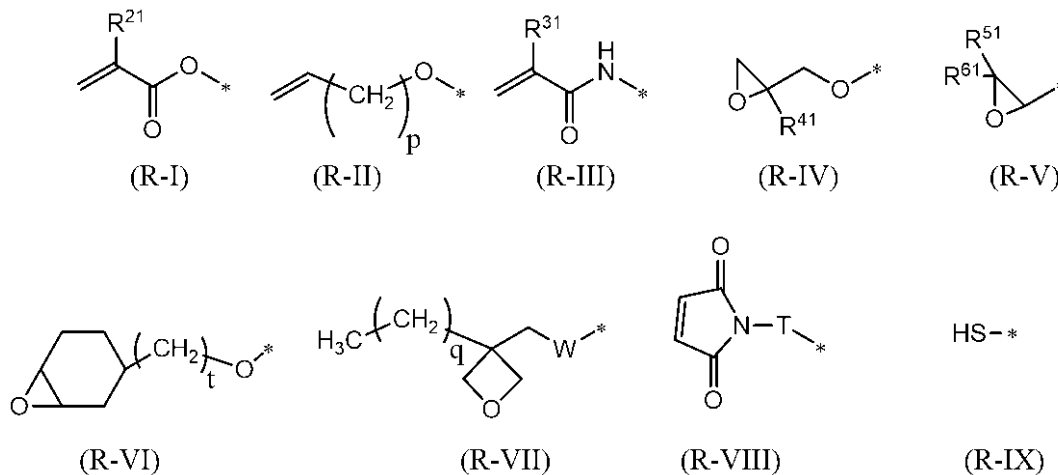
以下の一般式 (I) で表される重合性モノマーと、  
前記一般式 (I) で表される重合性モノマーとは異なる化学構造を備え、かつ極性基を有する自発配向性モノマーと、を有する液晶組成物。

【化 1】



(上記一般式 (I) 中、 $\text{R}^{101}$ 、 $\text{R}^{102}$ 、 $\text{R}^{103}$ 、 $\text{R}^{104}$ 、 $\text{R}^{105}$ 、 $\text{R}^{106}$ 、 $\text{R}^{107}$ 、 $\text{R}^{108}$ 、 $\text{R}^{109}$  及び  $\text{R}^{110}$  は、それぞれ独立して、 $\text{P}^{11}$ - $\text{S}^{11}$ -、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、ハロゲン原子又は水素原子のいずれかを表し、 $\text{P}^{11}$  は、以下の式 (R-I) から式 (R-IX) のいずれかを表し、

## 【化 2】



10

(上記式 (R-I) ~ (R-IX) 中、 $R^{21}$ 、 $R^{31}$ 、 $R^{41}$ 、 $R^{51}$  および  $R^{61}$  はお互いに独立して、水素原子、炭素原子数 1 ~ 5 個のアルキル基であり、W は単結合、-O- またはメチレン基であり、T は単結合または -COO- であり、p、t および q はそれぞれ独立して、0、1 または 2 である。)

$S^{11}$  は、単結合又は炭素原子数 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<sub>2</sub>- は、酸素原子が直接隣接しないように、-O-、-OCO- 又は -COO- で置換されてよく、

20

$n^{11}$  は 0 を表し、

$A^{11}$  は、下記の基 (a) 及び基 (b) :

(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<sub>2</sub>- 又は隣接していない 2 個以上の -CH<sub>2</sub>- は -O- に置き換えられてもよい。)

(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= に置き換えられてもよい。)

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a) 及び基 (b) は、それぞれ独立して、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、シアノ基、ニトロ基又は  $P^{11}$  -  $S^{11}$  - で置換されていても良く、

30

$L^{10}$  および  $L^{11}$  は、それぞれ独立して、単結合、-OCH<sub>2</sub>-、-CH<sub>2</sub>O-、-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-、-OC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O-、-CH=CR<sup>a</sup>-COO-、-CH=CR<sup>a</sup>-OCO-、-COO-CR<sup>a</sup>=CH-、-OCO-CR<sup>a</sup>=CH-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-COO-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-OCO-、-OCO-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-、-COO-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-、-CH=CH-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>- 又は -C-C- (式中、R<sup>a</sup> 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、z はそれぞれ独立して 1 ~ 4 の整数を表す。) を表し、

上記一般式 (I) の 1 分子内に少なくとも 2 以上の  $P^{11}$  -  $S^{11}$  - を有し、

上記一般式 (I) の 1 分子内に 1 つ以上の炭素原子数 1 ~ 3 個のアルキル基を有し、少なくとも 1 つの前記炭素原子数 1 ~ 3 個のアルキル基が、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、および  $A^{11}$  の 2 位または 3 位のいずれかであり、

40

$P^{11}$ 、 $S^{11}$ 、 $L^{11}$  及び  $A^{11}$  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も良い。)

## 【請求項 2】

前記一般式 (I) で表される化合物の 1 分子内にそれぞれ同一または異なる 2 つの  $P^{11}$  -  $S^{11}$  - を有する、請求項 1 に記載の液晶組成物。

## 【請求項 3】

前記一般式 (I) 中、 $L^{10}$  は単結合である、請求項 1 または 2 に記載の液晶組成物。

## 【請求項 4】

前記一般式 (I) 中の  $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$

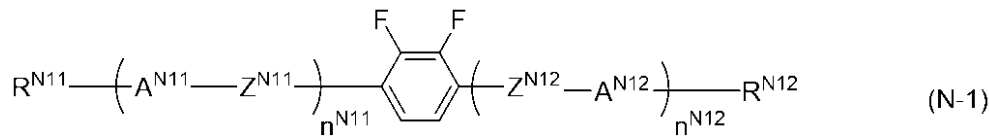
50

、 $R^{108}$  および  $R^{109}$  のうち、少なくとも 2 つがアルキル基である、請求項 3 に記載の液晶組成物。

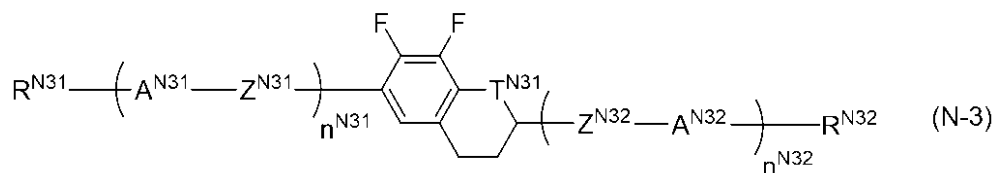
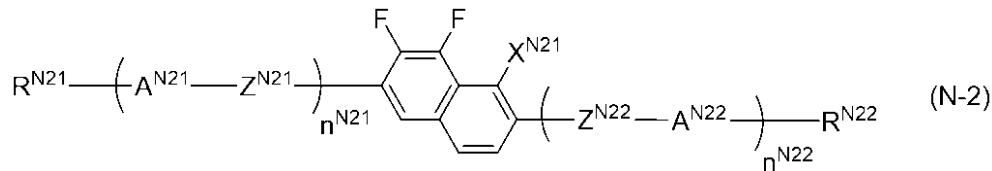
【請求項 5】

一般式 (N-1)、(N-2) 及び (N-3)

【化 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 ~ 8 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  $-\text{CH}_2-$  はそれぞれ独立して  $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$  又は  $-\text{OCO}-$  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  $-\text{CH}_2-$  - 又は隣接していない 2 個以上の  $-\text{CH}_2-$  は  $-\text{O}-$  に置き換えられてもよい。)

(b) 1, 4 - フェニレン基 (この基中に存在する 1 個の  $-\text{CH}=\text{CH}-$  - 又は隣接していない 2 個以上の  $-\text{CH}=\text{CH}-$  は  $-\text{N}=\text{N}-$  に置き換えられてもよい。)

30

(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  $-\text{CH}=\text{CH}-$  - 又は隣接していない 2 個以上の  $-\text{CH}=\text{CH}-$  は  $-\text{N}=\text{N}-$  に置き換えられてもよい。)

及び

(d) 1, 4 - シクロヘキセニレン基

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a)、基 (b)、基 (c) 及び基 (d) 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、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{CH}=\text{N}-\text{N}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$  又は  $-\text{C}=\text{C}-$  を表し、

40

$X^{N21}$  は水素原子又はフッ素原子を表し、

$T^{N31}$  は  $-\text{CH}_2-$  - 又は酸素原子を表し、

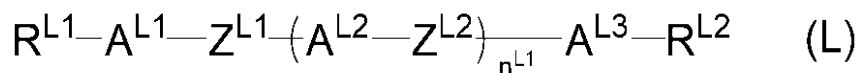
$n^{N11}$ 、 $n^{N12}$ 、 $n^{N21}$ 、 $n^{N22}$ 、 $n^{N31}$  及び  $n^{N32}$  は、それぞれ独立して、0 ~ 3 の整数を表すが、 $n^{N11} + n^{N12}$ 、 $n^{N21} + n^{N22}$  及び  $n^{N31} + n^{N32}$  は、それぞれ独立して、1、2 又は 3 であり、 $A^{N11} \sim A^{N32}$ 、 $Z^{N11} \sim Z^{N32}$  が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なってもよい。) で表される化合物から選ばれる化合物を 1 種類又は 2 種類以上含有する請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

50

## 【請求項 6】

一般式 (L)

## 【化 4】



(式中、 $R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  は、それぞれ独立して、炭素原子数 1 ~ 8 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  $-CH_2-$  は隣接していない 2 個以上の  $-CH_2-$  は  $-O-$  に置き換えられてもよい。)

(b) 1, 4 - フェニレン基 (この基中に存在する 1 個の  $-CH=$  は隣接していない 2 個以上の  $-CH=$  は  $-N=$  に置き換えられてもよい。) 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  $-CH=$  は隣接していない 2 個以上の  $-CH=$  は  $-N=$  に置き換えられてもよい。)

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 (N - 1)、一般式 (N - 2) および一般式 (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 種類又は 2 種類以上含有する請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

## 【請求項 7】

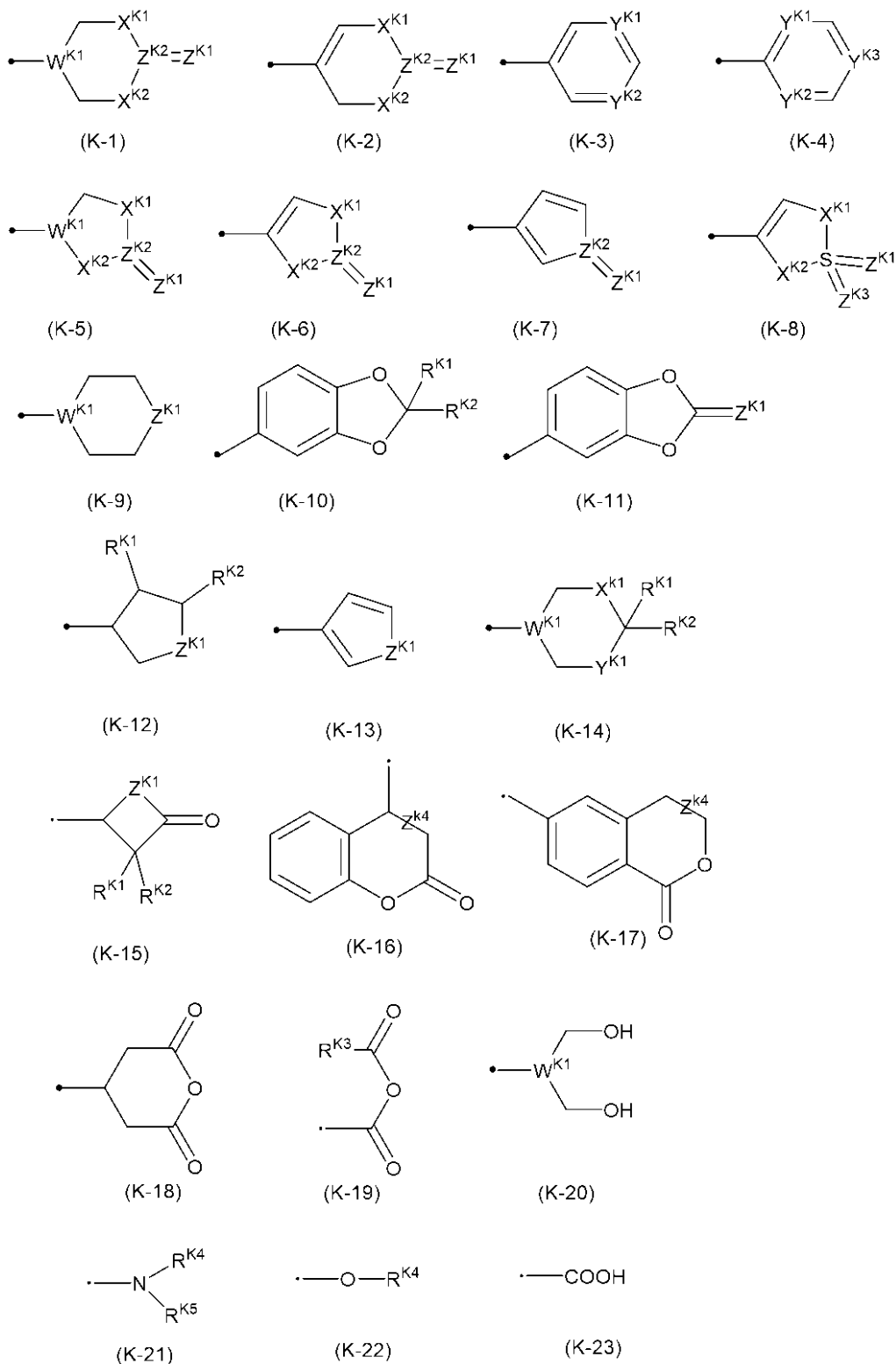
前記極性基は、以下の式 (K - 1) ~ (K - 28) からなる群から選択される 1 種または 2 種以上である、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

10

20

30

## 【化 5】



(上記式 (K-1) ~ (K-23) 中、 $R^{K1}$  および  $R^{K2}$  はそれぞれ独立して、水素原子または炭素原子数 1 ~ 5 の直鎖または分岐のアルキル基またはアルキルオキシ基を表し、 $R^{K3}$  は、水素原子又は 1 ~ 20 の直鎖または分岐のアルキル基を表し、このアルキル基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の  $-CH_2-$  は  $-O-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよく、 $R^{K4}$  および  $R^{K5}$  はそれぞれ独立して、水素原子または炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基を表し、

$W^{K1}$  は、メチン基、 $C-CH_3$ 、 $C-C_2H_5$ 、 $C-C_3H_7$ 、 $C-C_4H_9$ 、 $C-C_5H_{11}$ 、 $C-C_6H_{13}$  または窒素原子を表し、

10

20

30

40

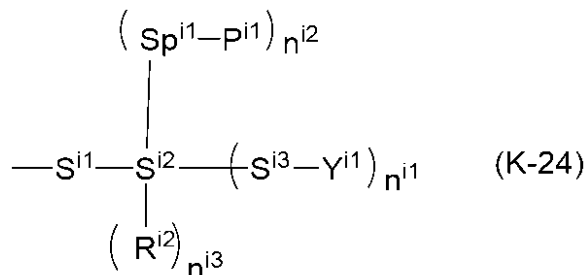
50

$X^{K1}$  及び  $X^{K2}$  はそれぞれ独立して、 $-CH_2-$ 、酸素原子、 $-C(=O)-$  又は硫黄原子を表し、

$Y^{K1}$ 、 $Y^{K2}$  及び  $Y^{K3}$  はそれぞれ独立して、メチン基又は窒素原子を表し、

$Z^{K1}$  は酸素原子又は硫黄原子を表し、 $Z^{K2}$  は炭素原子又はケイ素原子を表し、 $Z^{K3}$  は酸素原子を表し、 $Z^{K4}$  は単結合または二重結合を表す。）

【化 6】



10

(式中、 $Y^{i1}$  は、炭素原子数 3 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は  $-(C=X^{i1})-$  及び / 又は  $-(CH-CN)-$  で置換されており、また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように  $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよく、 $X^{i1}$  は、酸素原子、硫黄原子、 $NH$  又は  $NR^{i3}$  を表し、

20

$S^{i1}$  及び  $S^{i3}$  はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 6 のアルキレン基又は単結合を表し、該アルキレン基中の  $-CH_2-$  は酸素原子が直接隣接しないように  $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-C(=CH_2)-$ 、 $-C(=CHR^{i3})-$ 、 $-C(=CR^{i3}_2)-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-C=O-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよく、

$S^{i2}$  は炭素原子、窒素原子又はケイ素原子を表し、

$R^{i2}$  は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、これらの基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように  $-O-$ 、 $-CH=CH-$  又は  $-C-C-$  で置換されてもよく、

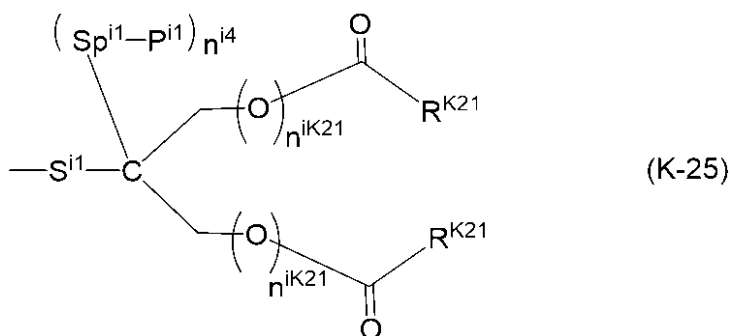
$P^{i1}$  は重合性基を表し、

$Sp^{i1}$  はスペーサー基又は単結合を表し、

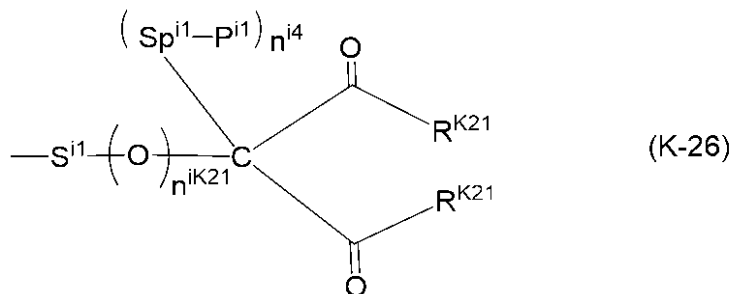
30

$n^{i1}$  は 1 ~ 3 の整数を表し、 $n^{i2}$  及び  $n^{i3}$  はそれぞれ独立して 0 ~ 2 の整数を表すが、 $S^{i2}$  が炭素原子又はケイ素原子を表す場合、 $n^{i1} + n^{i2} + n^{i3}$  は 3 であり、 $S^{i2}$  が窒素原子を表す場合、 $n^{i1} + n^{i2} + n^{i3}$  は 2 である。 $R^{i3}$  は炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基であり、一般式 (K-24) 中に  $R^{i2}$ 、 $X^{i1}$ 、 $Y^{i1}$ 、 $S^{i1}$ 、 $S^{i3}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  が複数存在する場合、それらは同一であっても異なっても良い。）

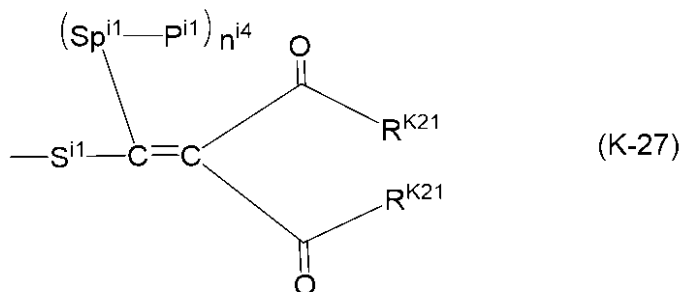
## 【化 7】



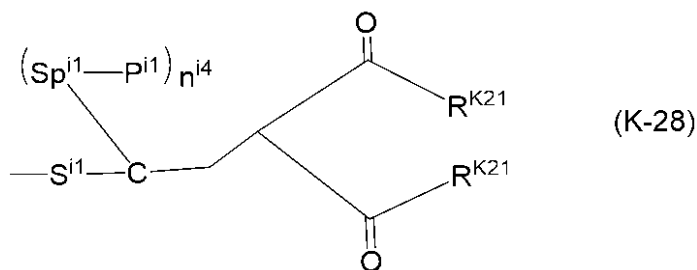
10



20



30



(式中、 $\text{Si}^{i1}$ 、 $\text{Pi}^{i1}$ 及び $\text{Sp}^{i1}$ は一般式(K-24)中の $\text{Si}^{i1}$ 、 $\text{Pi}^{i1}$ 及び $\text{Sp}^{i1}$ とそれぞれ同じ意味を表し、 $\text{R}^{\text{K}21}$ は炭素原子数1~10の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも2個以上の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}(\text{C})-$ 、 $-\text{O}-$ 、又は $-\text{NH}-$ で置換されてもよく、 $n^{i4}$ 、 $n^{i\text{K}21}$ はそれぞれ独立して0又は1を表す。)

40

## 【請求項 8】

請求項1から7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 9】

請求項1から7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 10】

請求項1から7のいずれか1項に記載の液晶組成物を用いたPSAモード、PSVAモード、PS-IPSモード又はPS-FSSモード用液晶表示素子。

50

**【請求項 1 1】**

一对の基板のうち少なくとも一方の基板表面に配向膜を備えていない液晶表示素子に使用する液晶組成物であって、請求項 1 から 7 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

**【請求項 1 2】**

対向に配置された第一の基板および第二の基板と、

前記第一の基板と前記第二の基板との間に充填された液晶層と、

前記第一の基板上に、マトリクス状に配置される複数のゲートバスライン及びデータバスライン、前記ゲートバスラインとデータバスラインとの交差部に設けられる薄膜トランジスタならびに前記薄膜トランジスタにより駆動される画素電極を画素毎に有する電極層と、

10

前記第一の基板または前記第二の基板上に形成された共通電極と、

前記第一の基板および前記第二の基板の間に請求項 1 から 7 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物に含まれている重合性化合物が硬化された樹脂成分と、を有する、少なくとも一方の基板表面に配向膜を備えていない液晶表示素子。

**【発明の詳細な説明】****【技術分野】****【0001】**

本発明は、新規な重合性モノマー及び当該重合性モノマーと自発配向性モノマーとを含有する液晶組成物並びにこれを使用した液晶表示素子に関する。

**【背景技術】**

20

**【0002】**

一般に、液晶パネルや液晶ディスプレイなどの液晶表示素子は、液晶分子の配列の状態を電場等の外部刺激によって変化させて、これに伴う光学特性の変化を表示に利用している。このような液晶表示素子は、二枚の透明基板の間隙に液晶分子を充填された状態の構成をしており、当該液晶分子と当接する基板の表面には液晶分子を予め特定の方向に配列させるための配向膜を形成しているのが一般的である。

**【0003】**

しかし、液晶表示素子の製造工程において配向膜表面に生じた傷やほこりが原因で配向欠陥が発生する問題や基板のサイズが大型化に伴い、基板全面に亘って、かつ長期間均一な配向を得るための配向膜の設計および管理が困難になるという問題がある。

30

**【0004】**

そこで、近年、液晶分子の配向を制御する自発配向材を含む液晶組成物を液晶層に用いることで、配向膜を必要としない液晶表示素子の開発が求められている。

**【0005】**

例えば、特許文献 1 では、液晶分子との相互作用が比較的弱いラウリルアクリレートの代わりに、オクチル基を備えた高い直線性を示す単官能のビフェニルモノマーと、ステアリル基を備えた低い直線性を示す二官能のビフェニルモノマーとを含む液晶組成物により、電圧保持率の低下を抑制する自発配向材を含む液晶組成物が記載されている。また、特許文献 2 では、配向膜の代わりに液晶分子の配向を制御する重合性自己配向添加剤を含む液晶組成物について種々開示されており、ネマチック LC 媒体と、重合性自己配向添加剤と、必要により重合性化合物とを含む液晶組成物を配向層なしの試験セル中に充填すると、基板表面に関して自発的なホメオトロピック（垂直）配向を有することおよびこの垂直配向は、透明点までずっと安定であり、形成した VA セルを、電圧印加により可逆的に切り換えることができると記載している。

40

**【先行技術文献】****【特許文献】****【0006】**

【特許文献 1】米国特許公開 2017 - 0123275 号公報

【特許文献 2】特表 2015 - 168826 号公報

**【発明の概要】**

50



## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0007】

しかしながら、上記の特許文献1で示すようなアルキル鎖が長くビフェニル骨格を備えた疎水性のモノマーを2種含む組成物は、一对の基板間に充填された液晶層の液晶分子との相互作用はラウリルアクリレートより強くなると考えられるが、基板に対する吸着力が低いことことに起因して液晶分子の配向方向を規制できないという問題が生じる。

## 【0008】

また、特許文献2では、水酸基などの極性基を備えた重合性自己配向添加剤を使用しているため、基板に対する吸着力は上記特許文献1のモノマーより高いと考えられる。しかし、重合性自己配向添加剤の基板に対する吸着力が高すぎると、重合性自己配向添加剤が基板上に均一に展開しないため配向ムラが生じるという問題が生じる。さらには、特許文献2で使用しているような対称性の高い化学構造の重合性化合物と、水酸基などの極性基を備えた重合性自己配向添加剤とを含む液晶組成物を液晶層として一对の基板間に充填された系では、液晶層は疎水性の性質を示すことから、自由エネルギーの観点で当該重合性化合物が基板に対して水平な方向で存在するため、それに倣って配向する液晶分子にとっては基板に対して垂直配向を形成し難いという問題が生じる。また、水酸基などの極性基を備えた重合性自己配向添加剤を含む液晶組成物は、疎水性である液晶分子との相溶性が低下するため液晶化合物や重合性化合物などが析出するという問題も生ずる。

## 【0009】

そこで本発明が解決しようとする課題は、垂直配向性と相溶性に優れた新規な重合性モノマー又は垂直配向性と相溶性に優れた液晶組成物を提供すること、及びこれを用いた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】

## 【0010】

本発明者らが鋭意検討した結果、1種または2種以上の自己配向重合性モノマーと、1種または2種以上の特定の化学構造を有する重合性モノマー（または重合性化合物）と、を含む液晶組成物およびそれを用いた液晶表示素子により、上記課題を解決できることを見出し、本願発明を完成するに至った。

## 【発明の効果】

## 【0011】

本発明に係る液晶組成物は、高い相溶性と液晶分子に対する優れた垂直配向性を示す。

## 【0012】

本発明に係る液晶組成物は、基板に対して優れた展開性（濡れ広がり）を示す。

## 【0013】

本発明に係る液晶組成物は、配向ムラが無いまたは配向ムラを低減することができる。

## 【0014】

本発明に係る液晶表示素子は、配向ムラが無いまたは低減された配向ムラを示す。

## 【0015】

本発明に係る重合性モノマーは、高い相溶性と液晶分子に対する優れた垂直配向性を示す。

## 【0016】

本発明に係る重合性モノマーを含む液晶組成物は、基板に対して優れた展開性（濡れ広がり）を示す。

## 【0017】

本発明に係る重合性モノマーを含む液晶組成物は、配向ムラが無いまたは配向ムラを低減することができる。

## 【図面の簡単な説明】

## 【0018】

【図1】比較例の配向試験の評価結果を示す図

10

20

30

40

50

【図 2】本発明の配向試験の評価結果を示す図

【発明を実施するための形態】

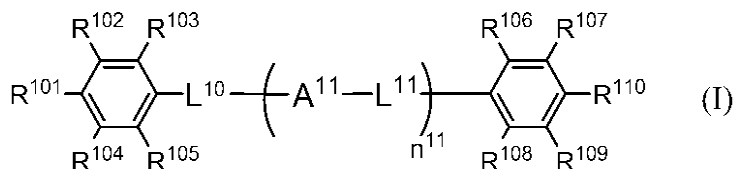
【0019】

本発明の第一は、以下の一般式（I）で表される重合性モノマーと、前記一般式（I）で表される重合性モノマーとは異なる化学構造を備え、かつ極性基を有する自発配向性モノマーと、を有する液晶組成物である。

である。

【0020】

【化 1】



10

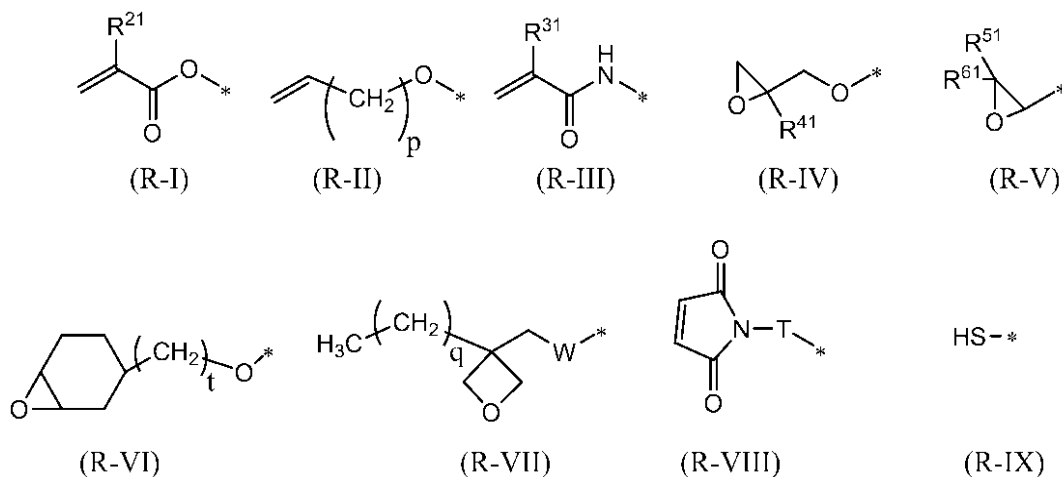
【0021】

（上記一般式（I）中、 $R^{101}$ 、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$ 、 $R^{109}$  及び  $R^{110}$  は、それぞれ独立して、 $P^{11}-S^{11}$  -、炭素原子数 1 から 18 のアルキル基、炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基、ハロゲン原子又は水素原子のいずれかを表し、 $P^{11}$  は、以下の式（R-I）から式（R-IX）のいずれかを表し、

20

【0022】

【化 2】



30

【0023】

（上記式（R-I）～（R-IX）中、 $R^{21}$ 、 $R^{31}$ 、 $R^{41}$ 、 $R^{51}$  および  $R^{61}$  はお互いに独立して、水素原子、炭素原子数 1 ～ 5 個のアルキル基または炭素原子数 1 ～ 5 個のハロゲン化アルキル基であり、W は単結合、-O- またはメチレン基であり、T は単結合または -COO- であり、p、t および q はそれぞれ独立して、0、1 または 2 である。）

40

$S^{11}$  は、単結合又は炭素原子数 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<sub>2</sub>- は、酸素原子が直接隣接しないように、-O-、-OCO- 又は -COO- で置換されてよく、

$n^{11}$  は、0、1 又は 2 を表し、

$A^{11}$  は、下記の基（a）、基（b）及び基（c）：

（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<sub>2</sub>- は隣接していない 2 個以上の -CH<sub>2</sub>- は -O- に置き換えられてもよい。）

（b） 1，4-フェニレン基（この基中に存在する 1 個の -CH= は隣接していない 2 個以上の -CH= は -N= に置き換えられてもよい。）及び

50

(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 = に置き換えられても良い。)

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、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、シアノ基、ニトロ基又は  $P^{11} - S^{11}$  - で置換されていても良く、

$L^{10}$  および  $L^{11}$  は、それぞれ独立して、単結合、- OCH<sub>2</sub> -, - CH<sub>2</sub> O -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - OC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O -, - COO -, - OCO -, - CH = CR<sup>a</sup> - COO -, - CH = CR<sup>a</sup> - OCO -, - COO - CR<sup>a</sup> = CH -, - OCO - CR<sup>a</sup> = CH -, - (CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub> - COO -, - (CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub> - OCO -, - OCO - (CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub> -, - COO - (CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub> -, - CH = CH -, - CF<sub>2</sub>O -, - OCF<sub>2</sub> - 又は - C C - (式中、R<sup>a</sup> 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、z はそれぞれ独立して 1 ~ 4 の整数を表す。) を表し、

上記一般式 (I) の 1 分子内に少なくとも 2 以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を有し、

上記一般式 (I) の 1 分子内に炭素原子数 1 ~ 18 個のアルキル基を有し、該アルキル基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の - CH<sub>2</sub> - はそれぞれ独立して - O - によって置換されていてもよく、

$P^{11}$ 、 $S^{11}$ 、 $L^{10}$ 、 $L^{11}$  及び  $A^{11}$  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も良い。) 20

これにより、液晶分子に対して優れた垂直配向性を付与し、かつ相溶性に優れた液晶組成物を提供する。また、当該液晶組成物は、配向膜を必須とすることなく液晶分子を垂直に配向させることができる。

#### 【0024】

上記一般式 (I) において、 $A^{11}$  は、以下の (a) ~ (c) からなる群より選ばれる基を表し、下記の基 (a)、基 (b) 及び基 (c) は、それぞれ独立して、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、シアノ基、ニトロ基又は  $P^{11} - S^{11}$  - で置換されていても良い。

(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<sub>2</sub> - 又は隣接していない 2 個以上の - CH<sub>2</sub> - は - O - に置き換えられてもよい。) 30

(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 = に置き換えられてもよい。) 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 = に置き換えられても良い。)

上記一般式 (I) において、 $A^{11}$  は、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、シアノ基、ニトロ基又は  $P^{11} - S^{11}$  - で置換されていても良い 1, 4 - フェニレン基又はナフタレン - 2, 6 - ジイル基であることが好ましく、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、シアノ基、ニトロ基又は  $P^{11} - S^{11}$  - で置換されていても良い 1, 4 - フェニレン基であることが更に好ましい。 40

#### 【0025】

上記一般式 (I) において、 $L^{10}$  は、単結合、- OCH<sub>2</sub> -, - CH<sub>2</sub> O -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - COO -, - OCO -, - CH = CH - COO -, - CH = CH - OCO -, - COO - CH = CH -, - OCO - CH = CH -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - COO -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - OCO -, - OCO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - COO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - CH = CH -, - CF<sub>2</sub>O -, - OCF<sub>2</sub> - 又は - C C - が好ましく、単結合、- OCH<sub>2</sub> -, - CH<sub>2</sub> O -, 50

- C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - COO -, - OCO -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - COO -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - OCO -,  
 - OCO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - COO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - CF<sub>2</sub>O -, - OCF<sub>2</sub> - 又は - C  
 C - がより好ましく、単結合であることが特に好ましい。

#### 【0026】

上記の連結基 L<sup>10</sup> が偶数連結であり、分子が直線状であることによって液晶分子にな  
 じみやすい。

#### 【0027】

上記一般式 (I) において、L<sup>11</sup> は、単結合、- OCH<sub>2</sub> -, - CH<sub>2</sub>O -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -,  
 - COO -, - OCO -, - CH=CH - COO -, - CH=CH - OCO -,  
 - COO - CH=CH -, - OCO - CH=CH -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - COO -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - OCO -,  
 - OCO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - COO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - CH=CH -, - CF<sub>2</sub>O -,  
 - OCF<sub>2</sub> - 又は - C C - が好ましく、単結合、- OCH<sub>2</sub> -, - CH<sub>2</sub>O -,  
 - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - COO -, - OCO -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - COO -, - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> - OCO -,  
 - OCO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - COO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> -, - CH=CH -, - CF<sub>2</sub>O -, - OCF<sub>2</sub> - 又は - C C - がより好ましく、単結合であることが特に好ましい。

10

#### 【0028】

上記の連結基 L<sup>11</sup> が偶数連結であり、分子が直線状であることによって液晶分子にな  
 じみやすい。

#### 【0029】

上記一般式 (I) において、L<sup>10</sup> と L<sup>11</sup> とはお互い同一でも異なってもよいが、L<sup>10</sup> と L<sup>11</sup> とは同一であることがより好ましい。

20

#### 【0030】

上記一般式 (I) において、R<sup>101</sup>、R<sup>102</sup>、R<sup>103</sup>、R<sup>104</sup>、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup>、R<sup>108</sup>、R<sup>109</sup> 及び R<sup>110</sup> は、それぞれ独立して、P<sup>11</sup>-S<sup>11</sup>-、炭素原子数 1 から 18 のアルキル基、炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基、ハロゲン原子又は水素原子のいずれかを表すが、この場合、前記アルキル基およびアルコキシ基の好ましい炭素原子数は、液晶の配向性を重要視する場合には 10 ~ 18 が好ましく、液晶化合物への溶解性を重要視する場合には 1 ~ 4 が好ましい。また、前記アルキル基およびアルコキシ基は、直鎖状または分岐状であってもよいが、直鎖状が特に好ましい。

30

#### 【0031】

また、R<sup>101</sup>、R<sup>102</sup>、R<sup>103</sup>、R<sup>104</sup>、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup>、R<sup>108</sup>、R<sup>109</sup> 及び R<sup>110</sup> の少なくとも 1 つ以上が、炭素原子数 1 から 18 のアルキル基を表す場合、前記アルキル基の好ましい炭素原子数は、液晶の配向性を重要視する場合には 10 ~ 18 が好ましく、液晶化合物への溶解性を重要視する場合には 1 ~ 4 が好ましい。また、前記アルキル基は、直鎖状または分岐状であってもよいが、直鎖状が特に好ましい。

#### 【0032】

上記一般式 (I) において、R<sup>101</sup>、R<sup>102</sup>、R<sup>103</sup>、R<sup>104</sup>、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup>、R<sup>108</sup>、R<sup>109</sup> 及び R<sup>110</sup> は、それぞれ独立して、P<sup>11</sup>-S<sup>11</sup>-、炭素原子数 1 ~ 10 のアルキル基、ハロゲン原子又は水素原子のいずれかを表すことが好ましく、P<sup>11</sup>-S<sup>11</sup>-、炭素原子数 1 から 3 のアルキル基、フッ素原子又は水素原子のいずれかを表すことが更に好ましい。溶解性の観点からアルキル鎖はあまり長すぎないほうが良い。

40

#### 【0033】

上記一般式 (I) 表される重合性モノマーの 1 分子内に少なくとも 2 以上の P<sup>11</sup>-S<sup>11</sup>- を有する。上記一般式 (I) で表される重合性モノマーにおいて、重合性基を 2 つ以上備えていると架橋密度の観点で好ましい。

#### 【0034】

上記一般式 (I) において、R<sup>101</sup>、R<sup>102</sup>、R<sup>103</sup>、R<sup>104</sup>、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup>、R<sup>108</sup>、R<sup>109</sup> 及び R<sup>110</sup> のうち、少なくとも 2 つ以上の P<sup>11</sup>

50

$1 - S^{11}$  - を備えていることが好ましく、2 ~ 4 つの  $P^{11} - S^{11}$  - を備えていることがより好ましく、2 ~ 3 つの  $P^{11} - S^{11}$  - を備えていることがさらに好ましい。

#### 【0035】

上記一般式 (I) で表される重合性モノマーにおいて、重合性の観点で重合性基をメソゲン骨格の外側部分に1 ~ 4 つ備えていることが好ましい。

#### 【0036】

すなわち、一般式 (I) で表される重合性モノマーは、1 分子内に少なくとも2 以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を有する。この場合、(1)  $A^{11}$  に2 以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている形態と、(2)  $A^{11}$  に1 以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えており、かつ  $R^{101}$ 、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$ 、 $R^{109}$  及び  $R^{110}$  のいずれかで、少なくとも1 つ以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている形態と、(3)  $R^{101}$ 、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$ 、 $R^{109}$  及び  $R^{110}$  のいずれかで、少なくとも2 つ以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている形態の3 つに分けられる。

#### 【0037】

上記一般式 (I) において、(1)  $A^{11}$  が2 以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている形態の場合、 $A^{11}$  は6 員環の基が好ましく、かつ2 位と5 位に  $P^{11} - S^{11}$  - が置換されている構造が好ましく、 $A^{11}$  が1、4 フェニレン基の場合であって、かつ2 位と5 位に  $P^{11} - S^{11}$  - が置換されている構造がより好ましい。

#### 【0038】

上記一般式 (I) において、(2)  $A^{11}$  が1 以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えており、かつ  $R^{101}$ 、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$ 、 $R^{109}$  及び  $R^{110}$  のいずれで、少なくとも1 つ以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている形態の場合、 $A^{11}$  が6 員環の基であり、かつ6 員環である  $A^{11}$  の2 位または3 位の一方が  $P^{11} - S^{11}$  - を有し、さらに  $R^{101}$  または  $R^{110}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - を有している構造が好ましい。

#### 【0039】

上記一般式 (I) において、(3)  $R^{101}$ 、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$ 、 $R^{109}$  及び  $R^{110}$  のいずれかで、2 つ以上の  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている好ましい形態としては、 $R^{101}$  および  $R^{110}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - である構造 ( $P^{11}$  及び  $S^{11}$  は、それぞれ同一であっても異なっても良い)、 $R^{101}$  および  $R^{107}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - である構造 ( $P^{11}$  及び  $S^{11}$  は、それぞれ同一であっても異なっても良い)、 $R^{108}$  および  $R^{110}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - である構造 ( $P^{11}$  及び  $S^{11}$  は、それぞれ同一であっても異なっても良い) などが挙げられる。

#### 【0040】

$R^{101}$  および  $R^{110}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - であると液晶化合物への溶解性という観点で好ましい。

#### 【0041】

一般式 (I) で表される重合性モノマー1 分子内に3 つの  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている好ましい形態としては、 $R^{101}$ 、 $R^{110}$  および  $R^{107}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - である構造 ( $P^{11}$  及び  $S^{11}$  は、それぞれ同一であっても異なっても良い) と、 $R^{101}$ 、 $R^{110}$  および  $R^{102}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - である構造 ( $P^{11}$  及び  $S^{11}$  は、それぞれ同一であっても異なっても良い) と、 $A^{11}$  が6 員環の基であり、かつ6 員環である  $A^{11}$  の2 位または3 位の一方が  $P^{11} - S^{11}$  - を有し、さらに  $R^{101}$  および  $R^{110}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - である構造と、が挙げられる。

#### 【0042】

一般式 (I) で表される重合性モノマー1 分子内に4 つの  $P^{11} - S^{11}$  - を備えている好ましい形態としては、 $R^{102}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{107}$  および  $R^{109}$  が  $P^{11} - S^{11}$  - である構造 ( $P^{11}$  及び  $S^{11}$  は、それぞれ同一であっても異なっても良い) と

、 $R^{102}$ 、 $R^{104}$ および $R^{107}$ が $P^{11}-S^{11}$ であり、かつ6員環である $A^{11}$ の2位または3位の方が $P^{11}-S^{11}$ を有する構造とが挙げられる。

【0043】

上記のように $P^{11}$ 及び $S^{11}$ が複数存在する場合は、 $P^{11}$ 及び $S^{11}$ は、それぞれ同一であっても異なっても良いことはいうまでもない。

【0044】

上記一般式(I)の1分子内に炭素原子数1~18個のアルキル基を少なくとも1つ有し、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 $-O-$ によって置換されていてもよい。

【0045】

これにより長鎖アルキル基が疎水性である液晶層側に向き、液晶分子もそれに倣って基板に対して垂直方向に並ぶため、垂直配向性向上という効果を奏する。

上記一般式(I)で表される重合性モノマー1分子内に1つ以上有する炭素原子数1~18個のアルキル基(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 $-O-$ によって置換されていてもよい。)の例としては、炭素原子数1~18個のアルキル基または炭素原子数1~18個のアルコキシ基であることが好ましく、炭素原子数1~18個のアルキル基であることがより好ましい。

上記一般式(I)で表される重合性モノマーにおいて、1分子内に1つ以上のアルキル基を備えているとアルキル部位が疎水性である液晶となじみやすく、液晶層側へブラシ状に並び、それに倣って液晶分子が垂直配向するため好ましい。

【0046】

また、上記一般式(I)で表される重合性モノマー1分子内に1つ以上有する炭素原子数1~18個のアルキル基(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 $-O-$ によって置換されていてもよい。)の好ましい形態としては、直鎖または分岐が挙げられ、直鎖が好ましい。さらに、アルキル基の好ましい炭素原子数としては、液晶組成物の溶解性や展開性を重視する場合、1~3個が好ましい。一方、液晶分子に対する垂直配向性を重視する場合は、10~19個が好ましい。

【0047】

上記一般式(I)で表される重合性モノマーの1分子内に、1~2つの炭素原子数1~18個のアルキル基(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 $-O-$ によって置換されていてもよい)を備えていることが好ましい。

【0048】

上記一般式(I)であらわれる重合性モノマーの1分子内に、1~2つの炭素原子数1~18個のアルキル基を有していると配向性の観点で好ましい。

【0049】

上記一般式(I)であらわれる重合性モノマーの1分子内に、1つの炭素原子数1~18個のアルキル基(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 $-O-$ によって置換されていてもよい)を備えている場合、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ および6員環である $A^{11}$ の2位または3位のいずれかであることが好ましい。また、上記一般式(I)で表される重合性モノマーの1分子内に、2つの炭素原子数1~18個のアルキル基(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 $-O-$ によって置換されていてもよい)を備えている場合、当該2つのアルキル基の位置の組み合わせは、 $R^{102}$ および $R^{104}$ 、 $R^{103}$ および $R^{105}$ 、 $R^{102}$ および $R^{103}$ 、 $R^{106}$ および $R^{108}$ 、 $R^{107}$ および $R^{109}$ 、または $R^{106}$ および $R^{107}$ の組み合わせが好ましく、 $R^{102}$ および $R^{104}$ 、 $R^{103}$ および $R^{105}$ 、 $R^{106}$ および $R^{108}$ または $R^{107}$ および $R^{109}$ の組み合わせがより好ましい。

【0050】

上記一般式(I)において、 $n^{11}$ は0、1又は2を表し、 $n^{11}$ は0又は1が好ましく、 $n^{11}$ は0がより好ましい。

## 【0051】

また、上記一般式(Ⅰ)において、 $n^{11}$ が2の場合、 $L^{11}$ および $A^{11}$ はそれぞれ同一でも異なってもよい。

## 【0052】

一般式(Ⅰ)で表される化合物は、2つのベンゼン環と、必要により環 $A^{11}$ とが連結した構造であり、これら2つのベンゼン環および環 $A^{11}$ において $P^{11}-S^{11}$ を少なくとも2つ有していることから、一般式(Ⅰ)で表される化合物は重合性モノマーとしての作用・効果を奏する。

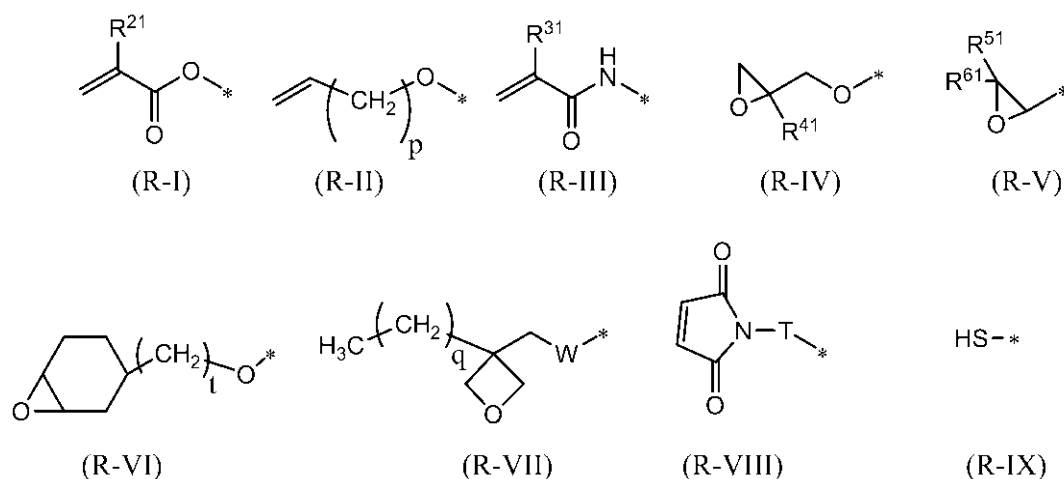
## 【0053】

一般式(Ⅰ)において、 $P^{11}$ は、以下の式(R-I)から式(R-IX)のいずれかを表す。

10

## 【0054】

## 【化3】



20

## 【0055】

(上記式(R-I)～(R-IX)中、 $R^{21}$ 、 $R^{31}$ 、 $R^{41}$ 、 $R^{51}$ および $R^{61}$ はお互いに独立して、水素原子、炭素原子数1～5個のアルキル基または炭素原子数1～5個のハロゲン化アルキル基であり、Wは単結合、-O-またはメチレン基であり、Tは単結合または-COO-であり、p、tおよびqはそれぞれ独立して、0、1または2である。)

30

このうち、上記一般式(Ⅰ)において、 $P^{11}$ はそれぞれ独立して、式(R-1)、式(R-2)、式(R-3)、式(R-4)、式(R-5)または式(R-7)であることが好ましく、式(R-1)、式(R-2)、式(R-3)または式(R-4)であることがより好ましく、式(R-1)であることがより好ましく、アクリル基またはメタクリル基であることが更に好ましく、メタクリル基であることがよりさらに好ましい。

## 【0056】

一般式(Ⅰ)において、 $S^{11}$ は、単結合又は炭素原子数1～3のアルキレン基であることが好ましく、単結合であることが更に好ましい。

40

## 【0057】

本発明の液晶組成物における一般式(Ⅰ)で表される重合性モノマーの含有量の下限は、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、0.12質量%が好ましく、0.15質量%が好ましく、0.17質量%が好ましく、0.2質量%が好ましく、0.22質量%が好ましく、0.25質量%が好ましく、0.27質量%が好ましく、0.3質量%が好ましく、0.32質量%が好ましく、0.35質量%が好ましく、0.37質量%が好ましく、0.4質量%が好ましく、0.42質量%が好ましく、0.45質量%が好ましく、0.5質量%が好ましく、0.55質量%が好ましい

50

。本発明の液晶組成物における一般式 (I) で表される重合性化合物の含有量の上限は、2.5 質量% が好ましく、2.3 質量% が好ましく、2.1 質量% が好ましく、2 質量% が好ましく、1.8 質量% が好ましく、1.6 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% が好ましく、0.5 質量% が好ましく、0.45 質量% が好ましく、0.4 質量% が好ましい。

#### 【0058】

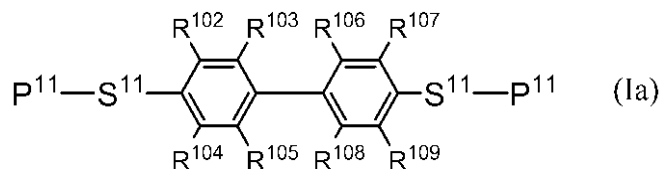
本発明に係る液晶組成物は、1 種または 2 種以上の一般式 (I) で表される重合性モノマーを含み、1 種～5 種の一般式 (I) で表される重合性モノマーを含むことが好ましく、1 種～4 種の一般式 (I) で表される重合性モノマーを含むことが好ましく、1 種～3 種の一般式 (I) で表される重合性モノマーを含むことが好ましい。また別の実施形態では、垂直配向性や配向ムラの向上の観点から、2 種～5 種の一般式 (I) で表される重合性モノマーを含むことが好ましく、2 種～4 種の一般式 (I) で表される重合性モノマーを含むことが好ましい。

#### 【0059】

本発明に係る一般式 (I) で表される重合性モノマーの好適な形態は、一般式 (Ia) で表されることが好ましい。

#### 【0060】

##### 【化 4】

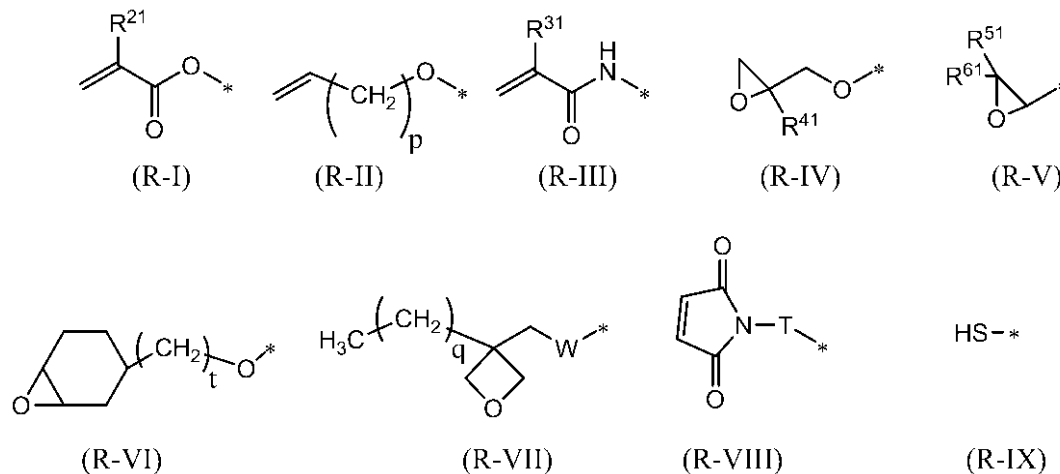


#### 【0061】

(上記一般式 (Ia) 中、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$  及び  $R^{109}$  はそれぞれ独立して、 $P^{11}-S^{11}-$ 、炭素原子数 1 から 18 のアルキル基、炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基、ハロゲン原子又は水素原子のいずれかを表し、 $P^{11}$  は、以下の式 (R-I) から式 (R-IX) のいずれかを表し、

#### 【0062】

##### 【化 5】



#### 【0063】

(上記式 (R-I) ～ (R-IX) 中、 $R^{21}$ 、 $R^{31}$ 、 $R^{41}$ 、 $R^{51}$  および  $R^{61}$  はお互いに独立して、水素原子、炭素原子数 1 ～ 5 個のアルキル基または炭素原子数 1 ～ 5 個のハロゲン化アルキル基であり、W は単結合、 $-O-$  またはメチレン基であり、T は単



結合または - C O O - であり、p、t および q はそれぞれ独立して、0、1 または 2 である。) )

S<sup>11</sup> は、単結合又は炭素原子数 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 - C H<sub>2</sub> - は、酸素原子が直接隣接しないように、- O -、- O C O - 又は - C O O - で置換されてよく、

R<sup>102</sup>、R<sup>103</sup>、R<sup>104</sup>、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup>、R<sup>108</sup> および R<sup>109</sup> の少なくとも一つは炭素原子数 1 から 18 のアルキル基、炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基である。但し、複数ある P<sup>11</sup> および S<sup>11</sup> は、それぞれ同一であっても異なっても良い。) )

上記一般式 (I a) において、R<sup>102</sup>、R<sup>103</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup> のいずれかが炭素原子数 1 から 18 のアルキル基または炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基であることが好ましい。また、上記一般式 (I a) において、2 つの炭素原子数 1 ~ 18 個のアルキル基または炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基を備えている場合、当該 2 つのアルキル基の位置の組み合わせは、R<sup>102</sup> および R<sup>104</sup>、R<sup>103</sup> および R<sup>105</sup>、R<sup>102</sup> および R<sup>103</sup>、R<sup>106</sup> および R<sup>108</sup>、R<sup>107</sup> および R<sup>109</sup>、または R<sup>106</sup> および R<sup>107</sup> の組み合わせが好ましく、R<sup>102</sup> および R<sup>104</sup>、R<sup>103</sup> および R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup> および R<sup>108</sup> または R<sup>107</sup> および R<sup>109</sup> の組み合わせがより好ましい。

#### 【0064】

上記一般式 (I a) において、P<sup>11</sup> は、それぞれ独立して、式 (R - 1)、式 (R - 2)、式 (R - 3)、式 (R - 4)、式 (R - 5) または式 (R - 7) であることが好ましく、式 (R - 1)、式 (R - 2)、式 (R - 3) または式 (R - 4) であることがより好ましく、式 (R - 1) であることがより好ましく、アクリル基またはメタクリル基であることが更に好ましく、メタクリル基であることがよりさらに好ましい。また、上記一般式 (I a) の 2 つ以上の P<sup>11</sup> は同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。

#### 【0065】

上記一般式 (I a) において、S<sup>11</sup> は、単結合又は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキレン基であることが好ましく、単結合であることが更に好ましい。また、上記一般式 (I a) の 2 つ以上の S<sup>11</sup> は同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。

#### 【0066】

なお、炭素原子数 1 から 18 のアルキル基、炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基の好ましい態様は、一般式 (I) と同様である。

#### 【0067】

本発明の液晶組成物における一般式 (I a) で表される重合性モノマーの含有量の下限は、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、0.12 質量% が好ましく、0.15 質量% が好ましく、0.17 質量% が好ましく、0.2 質量% が好ましく、0.22 質量% が好ましく、0.25 質量% が好ましく、0.27 質量% が好ましく、0.3 質量% が好ましく、0.32 質量% が好ましく、0.35 質量% が好ましく、0.37 質量% が好ましく、0.4 質量% が好ましく、0.42 質量% が好ましく、0.45 質量% が好ましく、0.5 質量% が好ましく、0.55 質量% が好ましい。本発明の液晶組成物における一般式 (I) で表される重合性化合物の含有量の上限は、2.5 質量% が好ましく、2.3 質量% が好ましく、2.1 質量% が好ましく、2 質量% が好ましく、1.8 質量% が好ましく、1.6 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% が好ましく、0.5 質量% が好ましく、0.45 質量% が好ましく、0.4 質量% が好ま

しい。

【 0 0 6 8 】

本発明に係る液晶組成物は、1種または2種以上の一般式(Ⅰa)で表される重合性モノマーを含むことが好ましい。本発明に係る液晶組成物に含まれる一般式(Ⅰa)で表される重合性モノマーの種類は、1種～5種、1種～4種、1～3種、1～2種であることが好ましい。また別の実施形態では、垂直配向性や配向ムラの向上の観点から、2種～5種、2種～4種、2種～3種を含むことが好ましい。

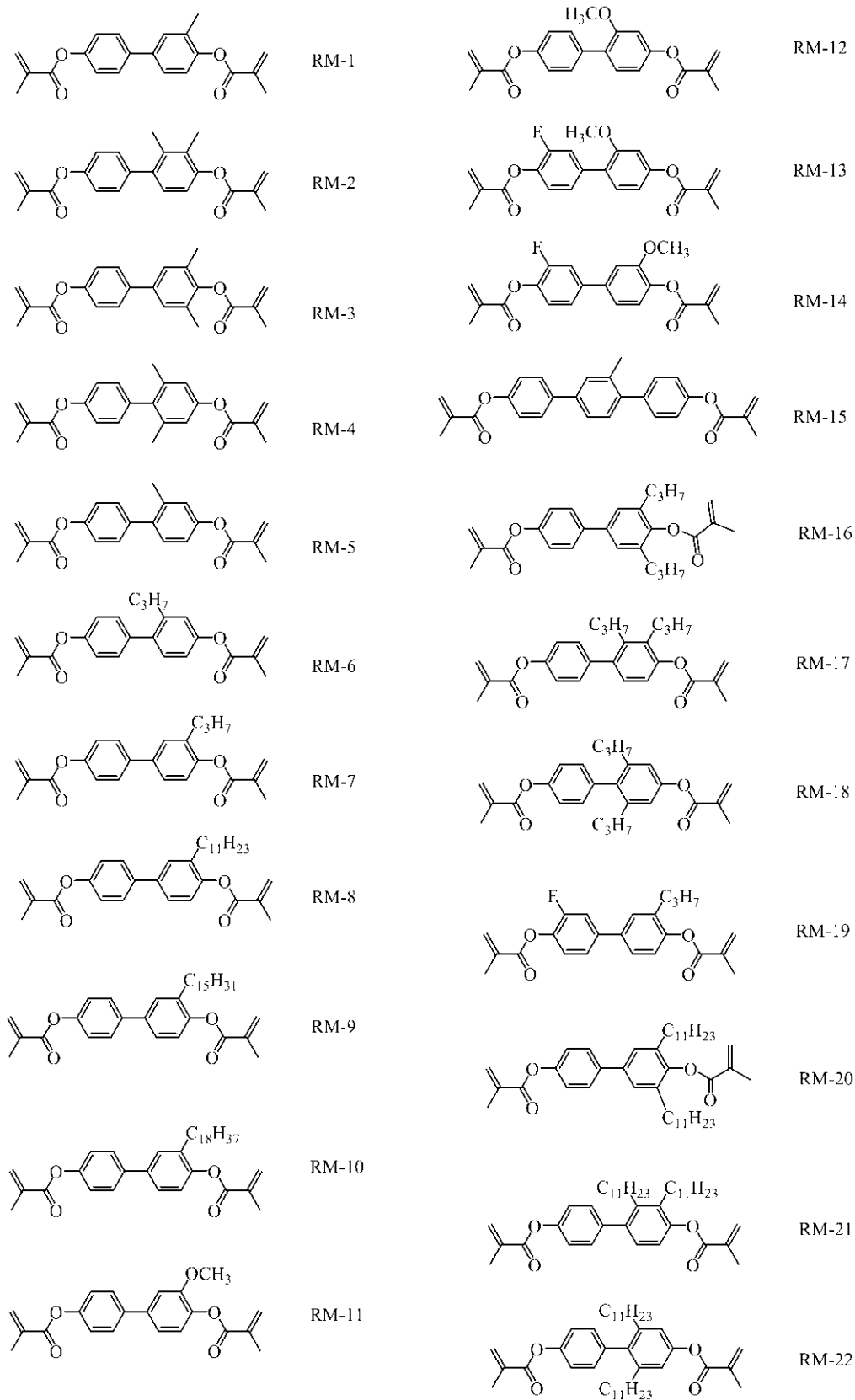
【 0 0 6 9 】

本発明に係る一般式(Ⅰ)で表される重合性モノマーの好適な化合物としては、以下の式RM-1～RM-75-6が挙げられる。

10

【 0 0 7 0 】

## 【化 6】



## 【 0 0 7 1 】

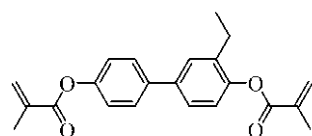
10

20

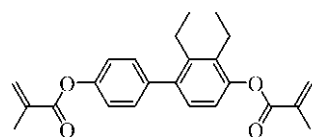
30

40

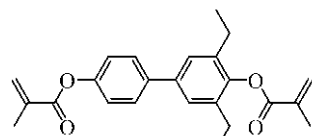
## 【化 7】



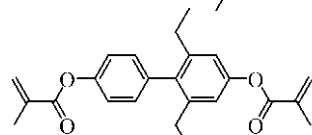
RM-23



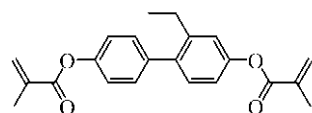
RM-24



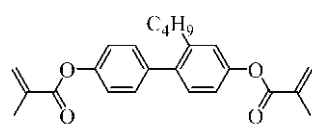
RM-25



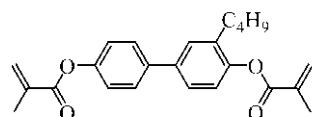
RM-26



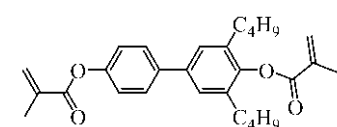
RM-27



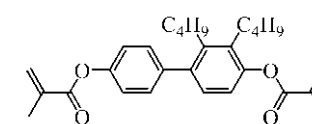
RM-28



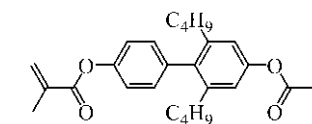
RM-29



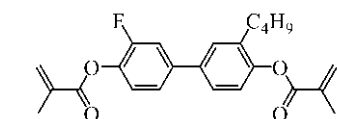
RM-30



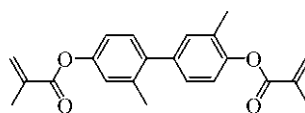
RM-31



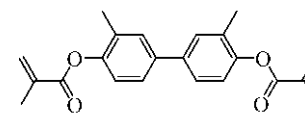
RM-32



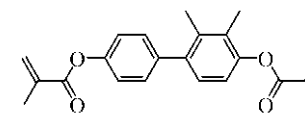
RM-33



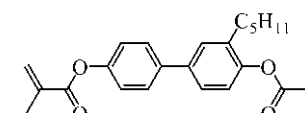
RM-34



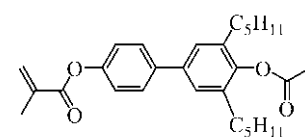
RM-35



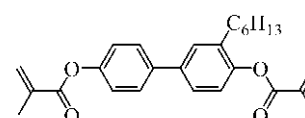
RM-36



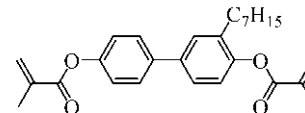
RM-37



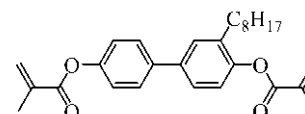
RM-38



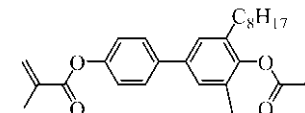
RM-39



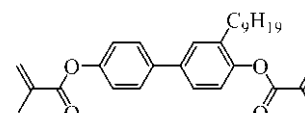
RM-40



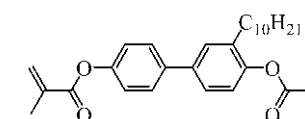
RM-41



RM-42



RM-43



RM-44

## 【 0 0 7 2 】

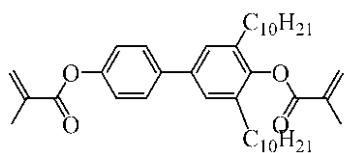
10

20

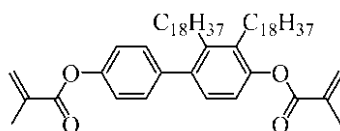
30

40

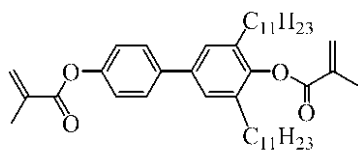
## 【化 8】



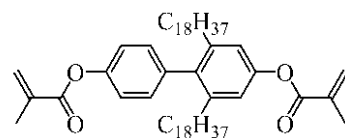
RM-45



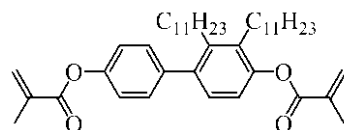
RM-56



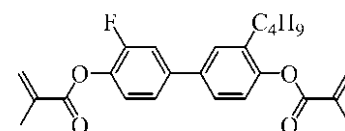
RM-46



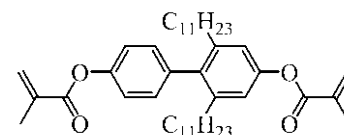
RM-57



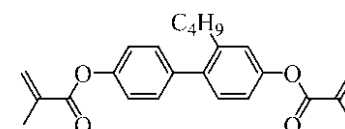
RM-47



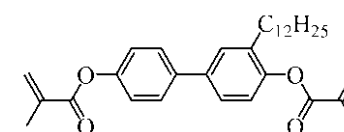
RM-58



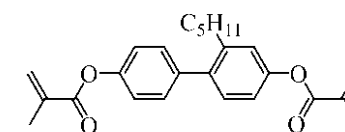
RM-48



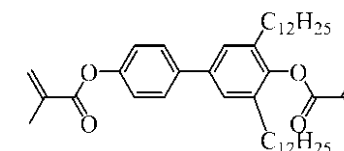
RM-59



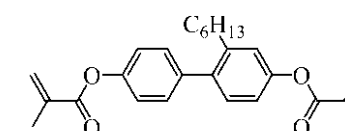
RM-49



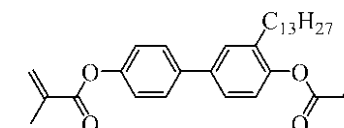
RM-60



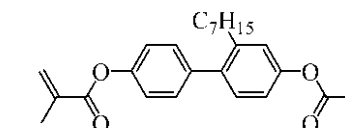
RM-50



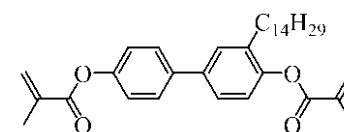
RM-61



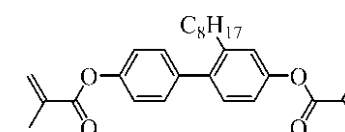
RM-51



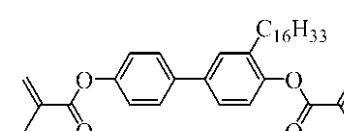
RM-62



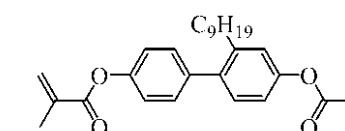
RM-52



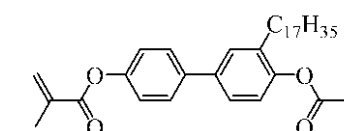
RM-63



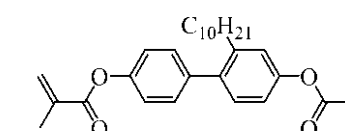
RM-53



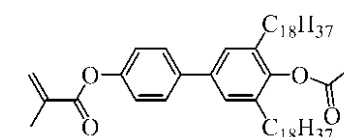
RM-64



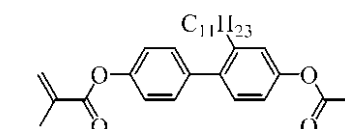
RM-54



RM-65



RM-55



RM-66

## 【 0 0 7 3 】

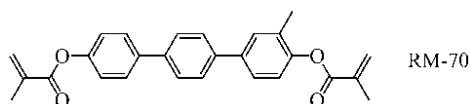
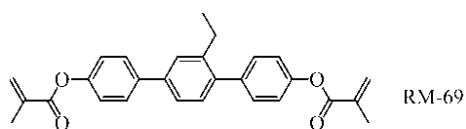
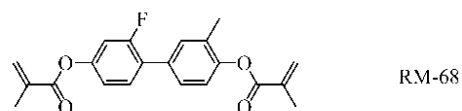
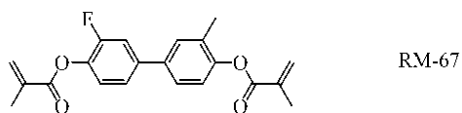
10

20

30

40

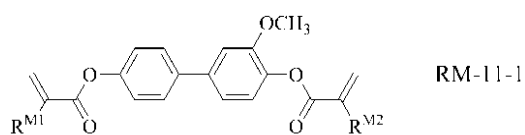
## 【化 9】



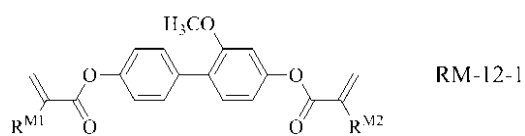
10

## 【 0 0 7 4】

## 【化 1 0】

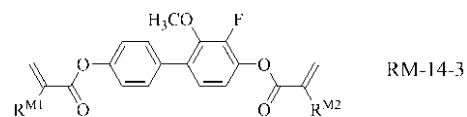
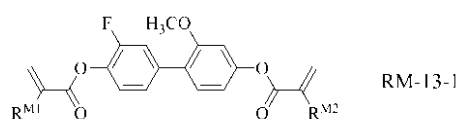


20

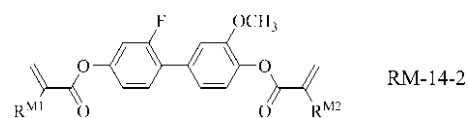
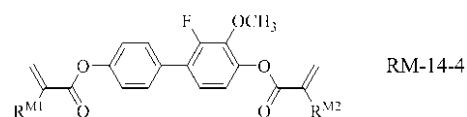
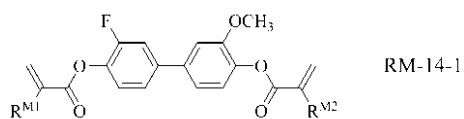


## 【 0 0 7 5】

## 【化 1 1】

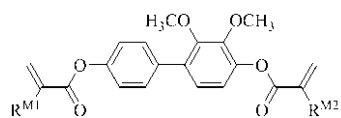


30

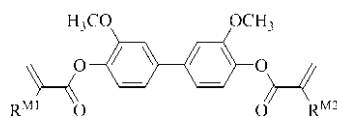


## 【 0 0 7 6】

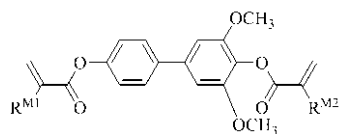
## 【化 1 2】



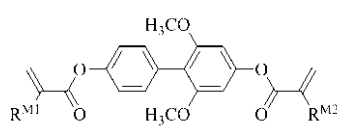
RM-71-1



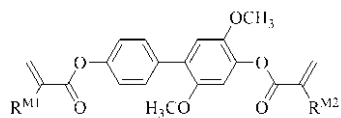
RM-71-5



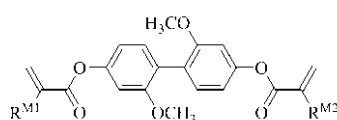
RM-71-2



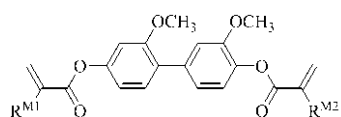
RM-71-6



RM-71-3



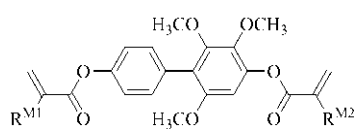
RM-71-7



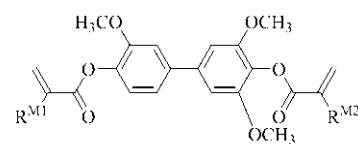
RM-71-4

## 【 0 0 7 7】

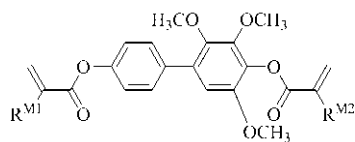
## 【化 1 3】



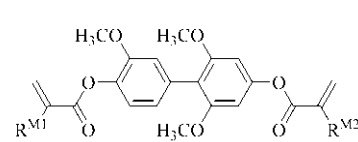
RM-72-1



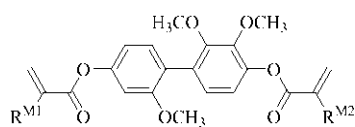
RM-72-6



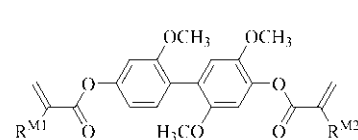
RM-72-2



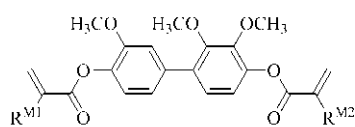
RM-72-7



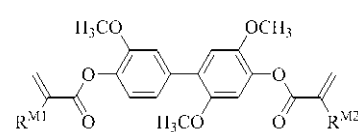
RM-72-3



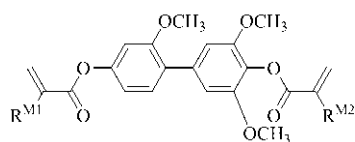
RM-72-8



RM-72-4



RM-72-9



RM-72-5

## 【 0 0 7 8】

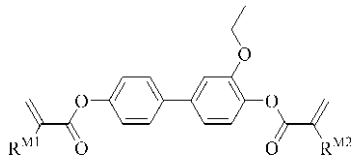
10

20

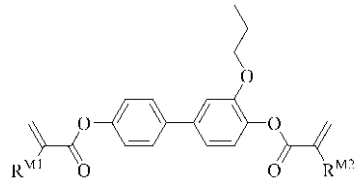
30

40

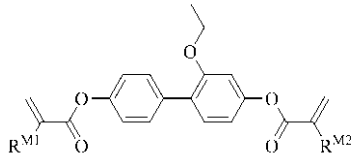
## 【化 1 4】



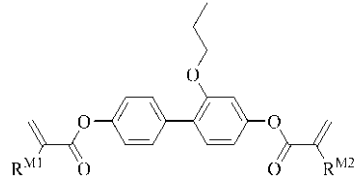
RM-73-1



RM-73-3



RM-73-2

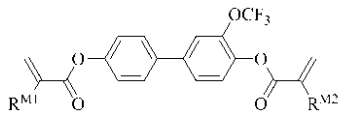


RM-73-4

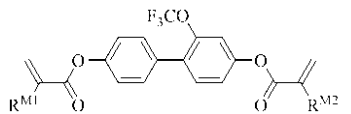
10

## 【 0 0 7 9】

## 【化 1 5】



RM-74-1

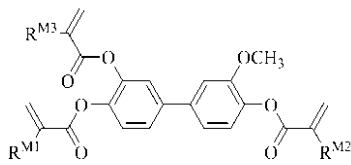


RM-74-2

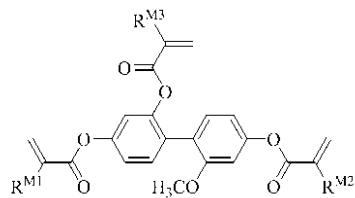
20

## 【 0 0 8 0】

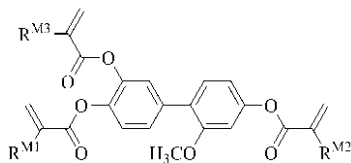
## 【化 1 6】



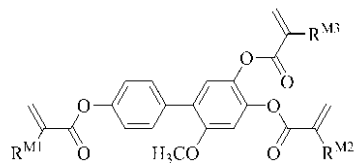
RM-75-1



RM-75-4

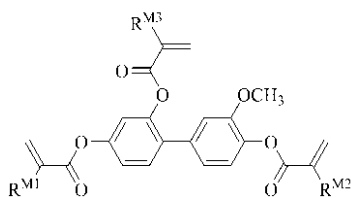


RM-75-2

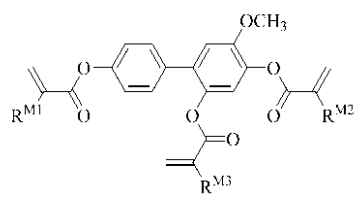


RM-75-5

30



RM-75-3



RM-75-6

40

## 【 0 0 8 1】

上記式中、 $R^{M1}$ 、 $R^{M2}$  及び  $R^{M3}$  は、それぞれ独立して、炭素原子数 1 から 5 のアルキル基、フッ素原子又は水素原子のいずれかを表すが、炭素原子数 1 のアルキル基又は水素原子を表すことがより好ましい。

## 【 0 0 8 2】

上記式 RM - 1 から RM - 66 が好ましく、RM - 2 ~ RM - 4、RM - 16 ~ RM - 18、RM - 20 ~ RM - 26、RM - 30 ~ RM - 32、RM - 34 ~ RM - 36、RM - 38、RM - 42、RM - 45 ~ RM - 48、RM - 50 および RM - 55 ~ RM - 57 がより好ましく、RM - 2 ~ RM - 4 および RM - 16 ~ RM - 18、がさらに好ましい。

50



## 【 0 0 8 3 】

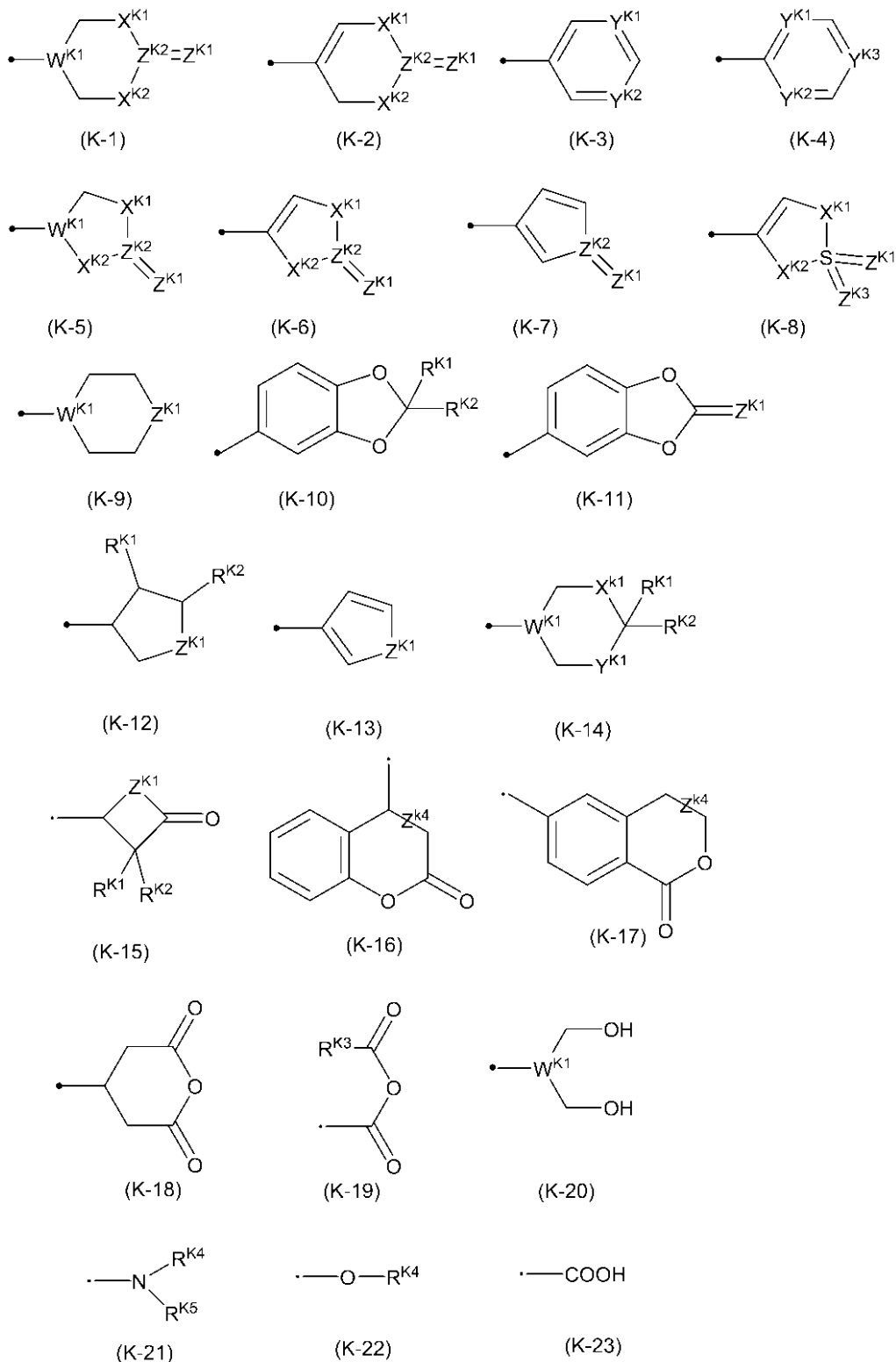
本発明に係る液晶組成物は、液晶分子の配向を制御する自発配向性モノマーを必須に含む。また、当該自発配向性モノマーは、極性基を少なくとも一つ備えており、かつ本発明に係る一般式（Ⅰ）で表される重合性モノマーとは異なる化学構造を備えている。上記極性基は、基板や膜、電極、と吸着する吸着部位の役割を備えていることが好ましい。

## 【 0 0 8 4 】

本発明に係る自発配向性モノマーが有する極性基は、以下の式（K - 1）～（K - 28）からなる群から選択される1種または2種以上であることが好ましい。

## 【 0 0 8 5 】

## 【化 17】



## 【0086】

(上記式 (K-1) ~ (K-23) 中、 $R^{K1}$  および  $R^{K2}$  はそれぞれ独立して、水素原子または炭素原子数 1 ~ 5 の直鎖または分岐のアルキル基またはアルキルオキシ基を表し、 $R^{K3}$  は、水素原子又は 1 ~ 20 の直鎖または分岐のアルキル基を表し、このアルキル基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の  $-CH_2-$  は  $-O-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよく、 $R^{K4}$  および  $R^{K5}$  はそれぞれ独立して、水素原子または炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基を表し、 $W^{K1}$  は、メチン基、 $C-CH_3$ 、 $C-C_2H_5$ 、 $C-C_3H_7$ 、 $C-C_4H_9$ 、 $C-C_5H_{11}$ 、 $C-C_6H_{13}$  または窒素原子を表

10

20

30

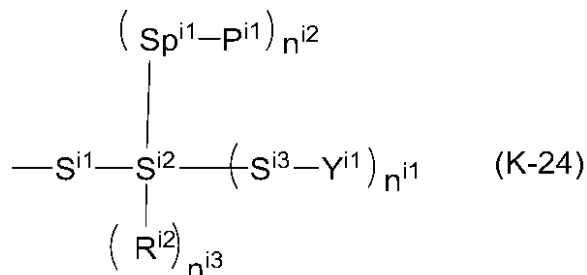
40

50

し、 $X^{K1}$  及び  $X^{K2}$  はそれぞれ独立して、 $-CH_2-$ 、酸素原子、 $-C(=O)-$  又は硫黄原子を表し、 $Y^{K1}$ 、 $Y^{K2}$  及び  $Y^{K3}$  はそれぞれ独立して、メチン基又は窒素原子を表し、 $Z^{K1}$  は酸素原子又は硫黄原子を表し、 $Z^{K2}$  は炭素原子又はケイ素原子を表し、 $Z^{K3}$  は酸素原子を表し、 $Z^{K4}$  は単結合または二重結合を表す。)

【0087】

【化18】



10

【0088】

(式中、 $Y^{i1}$  は、炭素原子数 3 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は  $-(C=X^{i1})-$  及び / 又は  $-(CH-CN)-$  で置換されており、また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように  $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよく、 $X^{i1}$  は、酸素原子、硫黄原子、NH 又は  $NR^{i1}$  を表し、

20

$S^{i1}$  及び  $S^{i3}$  はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 6 のアルキレン基又は単結合を表し、該アルキレン基中の  $-CH_2-$  は酸素原子が直接隣接しないように  $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-C(=CH_2)-$ 、 $-C(=CHR^{i3})-$ 、 $-C(=CR^{i3}_2)-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-C=O-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよく、

$S^{i2}$  は炭素原子、窒素原子又はケイ素原子を表し、

$R^{i2}$  は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、これらの基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように  $-O-$ 、 $-CH=CH-$  又は  $-C-C-$  で置換されてもよく、

$P^{i1}$  は重合性基を表し、

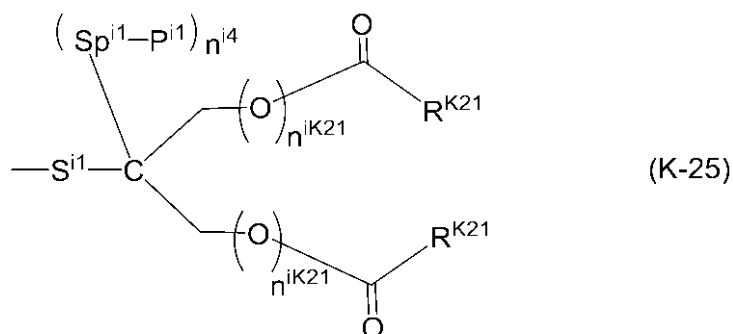
30

$Sp^{i1}$  はスペーサー基又は単結合を表し、

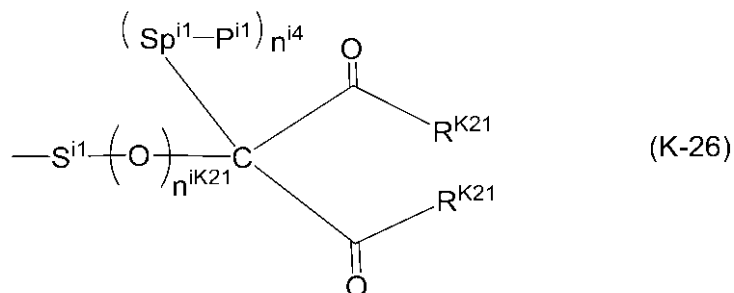
$n^{i1}$  は 1 ~ 3 の整数を表し、 $n^{i2}$  及び  $n^{i3}$  はそれぞれ独立して 0 ~ 2 の整数を表すが、 $S^{i2}$  が炭素原子又はケイ素原子を表す場合、 $n^{i1} + n^{i2} + n^{i3}$  は 3 であり、 $S^{i2}$  が窒素原子を表す場合、 $n^{i1} + n^{i2} + n^{i3}$  は 2 である。 $R^{i3}$  は一般式 (i) 中の  $R^{i3}$  と同じ意味を表し、一般式 (K-1) 中に  $R^{i2}$ 、 $X^{i1}$ 、 $Y^{i1}$ 、 $S^{i1}$ 、 $S^{i3}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  が複数存在する場合、それらは同一であっても異なっても良い。)

【0089】

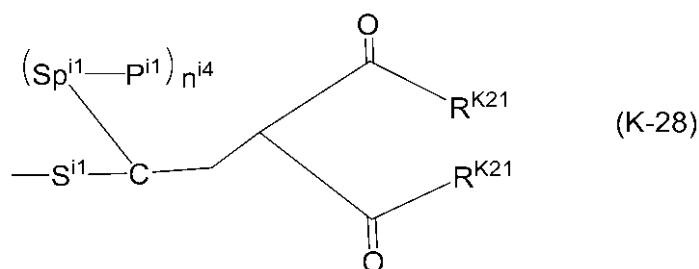
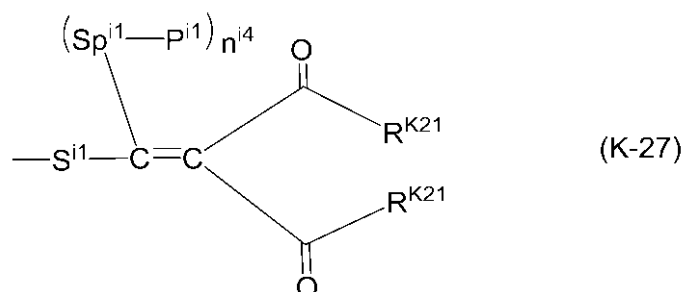
## 【化 19】



10



20



30

## 【0090】

(式中、 $\text{Si}^{i1}$ 、 $\text{Pi}^1$  及び  $\text{Sp}^{i1}$  は一般式 (K-1) 中の  $\text{Si}^{i1}$ 、 $\text{Pi}^1$  及び  $\text{Sp}^{i1}$  とそれぞれ同じ意味を表し、 $\text{R}^{K21}$  は炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -CH=CH-、-C≡C-、-O-、又は -NH- で置換されてもよく、 $n^{i4}$ 、 $n^{iK21}$  はそれぞれ独立して 0 又は 1 を表す。)

40

本発明に係る自発配向性モノマーは、少なくとも一つの極性基と、メソゲン基と、少なくとも一つの重合性基とを備えており、かつ本発明に係る一般式 (I) で表される重合性モノマーとは異なる化学構造を備えている。当該極性基はスペーサーを介して、メソゲン基または重合性基と結合してもよい。

## 【0091】

当該スペーサーとしては、単結合又は炭素原子数 1 ~ 15 のアルキレン基を表すことが好ましく、該アルキレン基中の 1 つ又は 2 つ以上の -CH<sub>2</sub>- は、酸素原子が直接隣接し

50

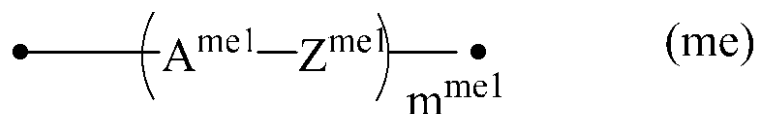
ないように、 $-O-$ 、 $-OCO-$ 又は $-COO-$ で置換されてよい。

【0092】

当該メソゲン基は、一般式 (me) :

【0093】

【化20】



10

【0094】

(式中、 $Z^{me1}$ は、単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH_2-CH_2COO-$ 、 $-OCOCH_2-CH_2-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、又は炭素原子数2~20のアルキレン基を表し、このアルキレン基中の1個又は隣接しない2個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、ただし $K^{i1}$ が $(K-11)$ の場合はメソゲン基に少なくとも $-CH_2-CH_2COO-$ 、 $-OCOCH_2-CH_2-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ の何れか一つを含み、

20

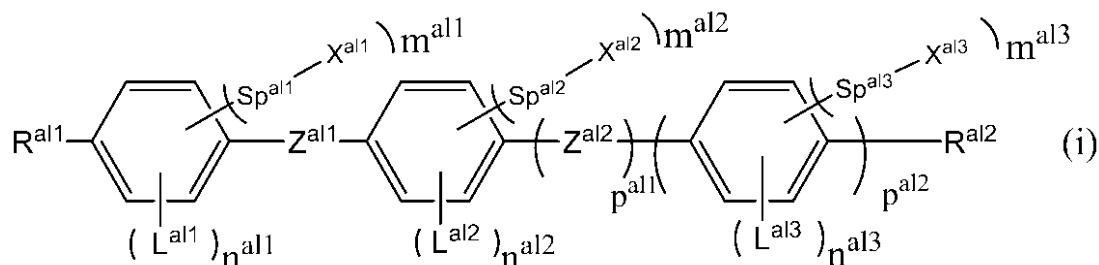
$A^{me1}$ は、2価の6員環芳香族基、2価の6員環複素芳香族基、2価の6員環脂肪族基、2価の6員環複素脂肪族基を表し、これらの環構造中の水素原子はハロゲン原子、又は $P^{11}-S^{11}-$ 、及び極性基で置換されていてもよい。また、 $Z^{me1}$ 及び $A^{me1}$ がそれぞれ複数存在する場合は、それぞれ互いに同一であっても異なってもよく、 $m^{me1}$ は、1~5の整数を表し、式(me)中、左端の黒点および右端の黒点は結合手を表す。)

本発明に係る自発配向性モノマーは、一般式(i)、一般式(ii)、一般式(iii)及び一般式(iv)で表される化合物からなる群から選択される1種または2種以上の化合物であることが好ましい。

30

【0095】

【化21】



40

【0096】

(上記一般式(i)中、 $R^{al1}$ 、 $R^{al2}$ 、 $Z^{al1}$ 、 $Z^{al2}$ 、 $L^{al1}$ 、 $L^{al2}$ 、 $L^{al3}$ 、 $Sp^{al1}$ 、 $Sp^{al2}$ 、 $Sp^{al3}$ 、 $X^{al1}$ 、 $X^{al2}$ 、 $X^{al3}$ 、 $m^{al1}$ 、 $m^{al2}$ 、 $m^{al3}$ 、 $n^{al1}$ 、 $n^{al2}$ 、 $n^{al3}$ 、 $p^{al1}$ および $p^{al2}$ はそれぞれ互いに独立して、

$R^{al1}$ は、水素原子、ハロゲン原子、1~20個の炭素原子を有する直鎖状、分枝状もしくは環状アルキルを示し、ここで当該アルキル基において、1または2つ以上の隣接していない $CH_2$ 基は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-O$

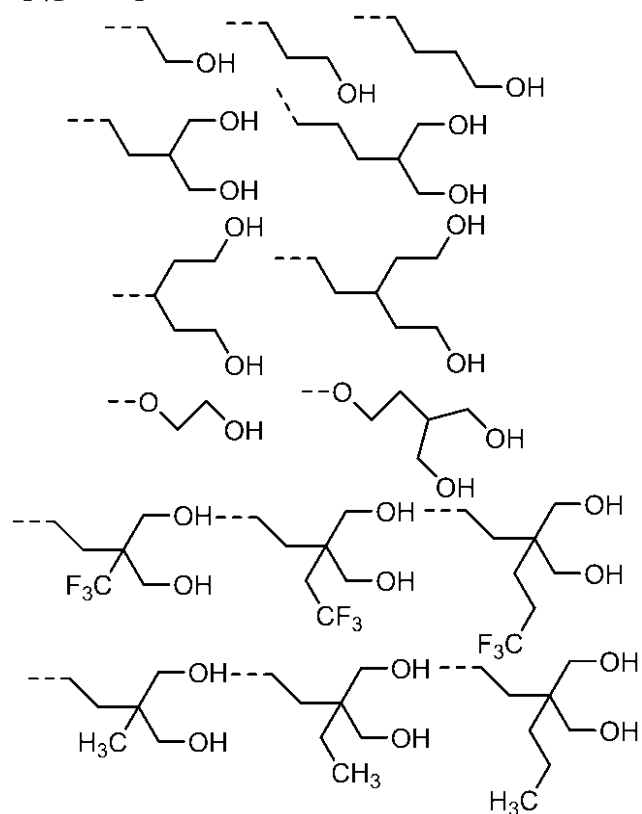
50

- C O - O - によって、O および / または S 原子が互いに直接結合しないように置換されてもよく、さらに 1 個または 2 個以上の水素原子は、F または C l によって置き換えられていてもよい、

R<sup>a 1 2</sup> は、以下のいずれかの部分構造を備えた基を表し、

【 0 0 9 7 】

【 化 2 2 】

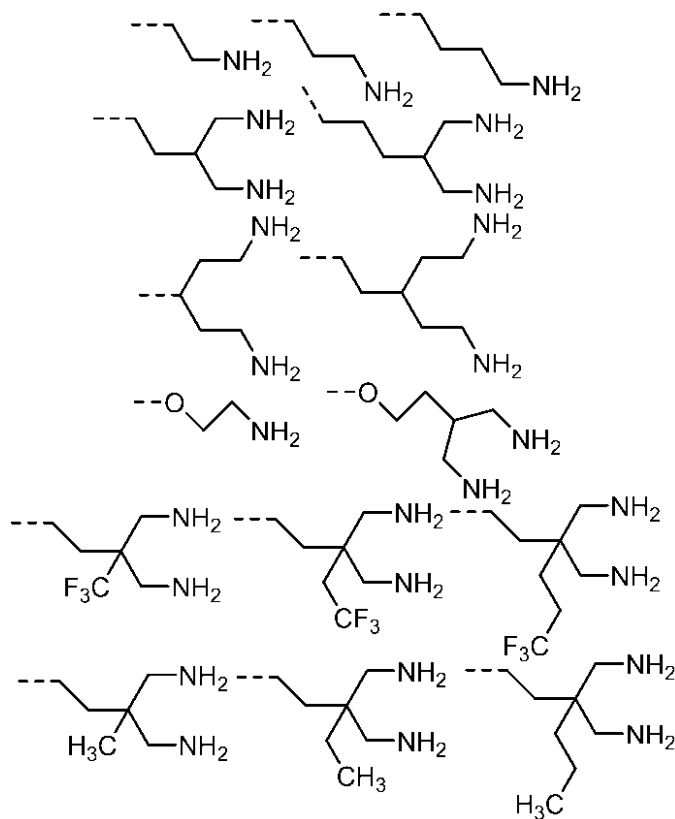


【 0 0 9 8 】

10

20

## 【化 2 3】



10

20

## 【0099】

$Sp^{a11}$ 、 $Sp^{a12}$  および  $Sp^{a13}$  はそれぞれ互いに独立して、炭素原子数 1 ~ 12 個のアルキル基または単結合を表し、

$X^{a11}$ 、 $X^{a12}$  および  $X^{a13}$  はそれぞれ互いに独立して、アルキル基、アクリル基、メタクリル基またはビニル基を示し、

$Z^{a11}$  は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-OCO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-SCH_2-$ 、 $-CH_2S-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2S-$ 、 $-SCF_2-$ 、 $-(CH_2)_n^{a11}$ 、 $-CF_2CH_2-$ 、 $-CH_2CF_2-$ 、 $-(CF_2)_n^{a11}$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CC-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-(CR^{a13}R^{a14})_n^{a11}$ 、 $-CH(-Sp^{a11}-X^{a11})-$ 、 $-CH_2CH(-Sp^{a11}-X^{a11})-$ 、 $-CH(-Sp^{a11}-X^{a11})CH(-Sp^{a11}-X^{a11})-$  を示し、

30

$Z^{a12}$  はそれぞれ互いに独立して、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-OCO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-SCH_2-$ 、 $-CH_2S-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2S-$ 、 $-SCF_2-$ 、 $-(CH_2)_n^{a12}$ 、 $-CF_2CH_2-$ 、 $-CH_2CF_2-$ 、 $-(CF_2)_n^{a12}$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CC-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-(CR^{a13}R^{a14})_n^{a12}$ 、 $-CH(-Sp^{a11}-X^{a11})-$ 、 $-CH_2CH(-Sp^{a11}-X^{a11})-$ 、 $-CH(-Sp^{a11}-X^{a11})CH(-Sp^{a11}-X^{a11})-$  を示し、

40

$L^{a11}$ 、 $L^{a12}$ 、 $L^{a13}$  はそれぞれ互いに独立して、水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-NCO$ 、 $-NCS$ 、 $-OCN$ 、 $-SCN$ 、 $-C(=O)N(R^{a13})_2$ 、 $-C(=O)R^{a13}$ 、3 ~ 15 個の炭素原子を有する任意に置換されたシリル基、任意に置換されたアリール基もしくはシクロアルキル基または 1 ~ 25 個の炭素原子を表すが、ここで、1 個もしくは 2 個以上の水素原子がハロゲン原子（フッ素原子、塩素原子）によって置き換えられていてもよく、

上記  $R^{a13}$  は、1 ~ 12 個の炭素原子を有するアルキル基を表し、上記  $R^{a14}$  は、水

50

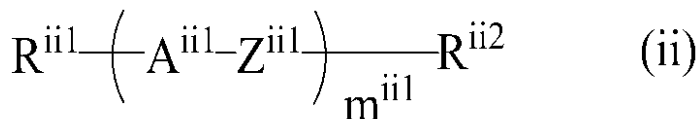
素原子または 1 ~ 12 個の炭素原子を有するアルキル基を表し、上記  $n^{a1}$  は、1 ~ 4 の整数を表し、

$p^{a11}$  および  $p^{a12}$  はそれぞれ互いに独立して、0 または 1 を表し、 $m^{a11}$ 、 $m^{a12}$  および  $m^{a13}$  はそれぞれ互いに独立して、0 ~ 3 の整数を表し、 $n^{a11}$ 、 $n^{a12}$  および  $n^{a13}$  はそれぞれ互いに独立して、0 ~ 3 の整数を表す。

一般式 (ii) :

【0100】

【化24】



10

【0101】

(式中、 $Z^{ii1}$  は、単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH_2-CH_2COO-$ 、 $-OCOCH_2-CH_2-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、又は炭素原子数 2 ~ 20 のアルキレン基を表し、このアルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の  $-CH_2-$  は  $-O-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよく、ただし  $K^{i1}$  が (K-11) の場合はメソゲン基に少なくとも  $-CH_2-CH_2COO-$ 、 $-OCOCH_2-CH_2-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$  の何れか一つを含み、

20

$A^{ii1}$  は、2 価の 6 員環芳香族基、2 価の 6 員環複素芳香族基、2 価の 6 員環脂肪族基、2 価の 6 員環複素脂肪族基を表し、これらの環構造中の水素原子はハロゲン原子、又は  $P^{i1}-Sp^{i1}$ 、及び一般式  $K^{i1}$  で表される置換基を有する 1 価の有機基又は  $R^{i1}$  で置換されていてもよいが、少なくとも一つは  $P^{i1}-Sp^{i1}$  で置換されており、

$Z^{ii1}$  及び  $A^{ii1}$  がそれぞれ複数存在する場合は、それぞれ互いに同一であっても異なっているとしてもよく、

30

$m^{ii1}$  は、1 ~ 5 の整数を表し、

$R^{ii1}$  及び  $R^{ii2}$  はそれぞれ独立して、水素原子、炭素原子数 1 ~ 40 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基、又は  $P^{i1}-Sp^{i1}$  を表し、該アルキル基中の  $-CH_2-$  は  $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$  又は  $-OCO-$  で置換されてもよいが  $-O-$  は連続にはならず、 $R^{ii1}$  及び  $R^{ii2}$  は少なくとも一つは、 $K^{i1}$  で表される置換基を有する 1 価の有機基を表し、一般式 (ii) 中に 1 つ又は 2 つ以上の  $P^{i1}-Sp^{i1}$  を有しており、1 つ又は 2 つ以上の  $K^{i1}$  で表される置換基を有する 1 価の有機基を有しておりかつ 1 つ又は 2 つ以上の  $R^{i1}$  を有している。ただし  $K^{i1}$  が (K-11) の場合は、 $Z^{ii1}$  は、 $-CH_2-CH_2COO-$ 、 $-OCOCH_2-CH_2-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$  の何れかである) で表される化合物 (以下「化合物 (ii)」ともいう)

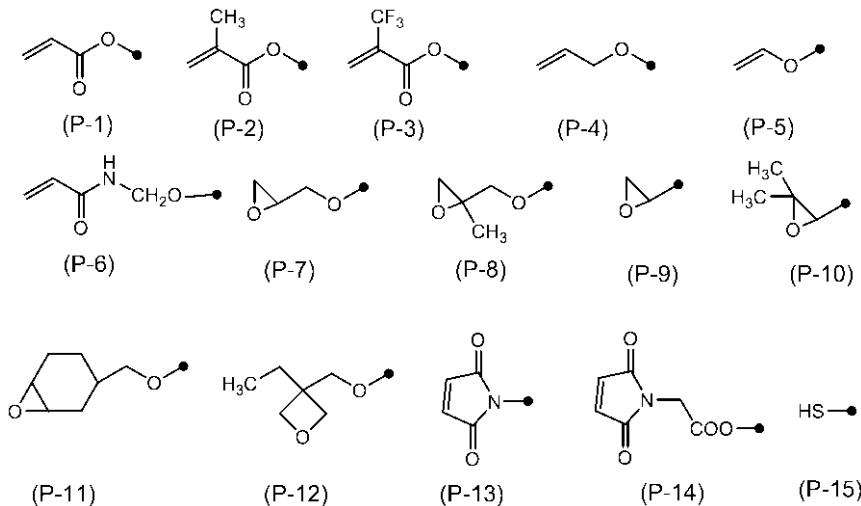
40

上記  $P^{i1}-Sp^{i1}$  ( $P^{i1}$  は、重合性基を表し、以下の一般式 (P-1) ~ 一般式 (P-15) で表される群より選ばれる置換基を表し (式中、右端の黒点は結合手を表す。))、

【0102】



## 【化 2 5】



10

## 【0103】

$Sp^{i1}$  はスペーサー基を表す。)、 $K^{i1}$  で表される置換基を有する 1 価の有機基 ( $K^{i1}$  は、以下の一般式 (K-1) ~ 一般式 (K-11) で表される置換基を表す。) 及び  $R^{i1}$  ( $R^{i1}$  は、水素原子、炭素原子数 1 ~ 40 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基、又は  $P^{i1} - Sp^{i1}$  - を表し、該アルキル基中の -  $CH_2$  - は -  $CH = CH -$ 、-  $C(C) -$ 、-  $O -$ 、-  $NH -$ 、-  $COO -$  又は -  $OCO -$  で置換されてもよいが、-  $O -$  は連続にはならない)

20

上記一般式 (ii) において、 $Z^{ii1}$  は、好ましくは、単結合、-  $CH = CH -$ 、-  $C(C) -$ 、-  $COO -$ 、-  $OCO -$ 、-  $OCOO -$ 、-  $OOCO -$ 、-  $CH = CHCOO -$ 、-  $OCOCH = CH -$ 、-  $CH_2 - CH_2COO -$ 、-  $OCOCH_2 - CH_2 -$ 、-  $CH = C(CH_3)COO -$ 、-  $OCOC(CH_3) = CH -$ 、-  $CH_2 - CH(CH_3)COO -$ 、-  $OCOCH(CH_3) - CH_2 -$ 、-  $OCH_2CH_2O -$ 、又は炭素原子数 1 ~ 40 の直鎖状又は分岐状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の -  $CH_2$  - が -  $O -$  で置換された基を表し、より好ましくは、単結合、-  $COO -$ 、-  $OCO -$ 、-  $CH = CHCOO -$ 、-  $OCOCH = CH -$ 、-  $CH_2 - CH_2COO -$ 、-  $OCOCH_2 - CH_2 -$ 、-  $CH = C(CH_3)COO -$ 、-  $OCOC(CH_3) = CH -$ 、-  $CH_2 - CH(CH_3)COO -$ 、-  $OCOCH(CH_3) - CH_2 -$ 、-  $OCH_2CH_2O -$ 、又は炭素原子数 1 ~ 40 の直鎖状又は分岐状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の -  $CH_2$  - が -  $O -$  で置換された基、又は炭素原子数 2 ~ 15 の直鎖状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の -  $CH_2$  - が -  $O -$  で置換された基、又は炭素原子数 2 のアルキレン基 (エチレン基 (-  $CH_2CH_2 -$ )) 若しくはエチレン基中の -  $CH_2$  - の 1 個が -  $O -$  で置換された基 (-  $CH_2O -$ 、-  $OCH_2 -$ )、又は炭素原子数 3 ~ 13 の直鎖状のアルキレン基若しくは該アルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の -  $CH_2$  - が -  $O -$  で置換された基を表す。

30

40

## 【0104】

$A^{ii1}$  は、好ましくは、2 価の 6 員環芳香族基又は 2 価の 6 員環脂肪族基を表すが、2 価の無置換の 6 員環芳香族基、2 価の無置換の 6 員環脂肪族基又はこれらの環構造中の水素原子は、置換されていないか炭素原子数 1 ~ 6 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 6 のアルコキシ基、ハロゲン原子で置換されていることが好ましく、2 価の無置換の 6 員環芳香族基若しくはこの環構造中の水素原子がフッ素原子で置換された基、又は 2 価の無置換の 6 員環脂肪族基が好ましく、置換基上の水素原子が、ハロゲン原子、アルキル基又は

50

アルコキシ基によって置換されていても良い 1, 4 - フェニレン基、2, 6 - ナフタレン基又は 1, 4 - シクロヘキシル基が好ましいが、少なくとも一つの置換基は  $P^{i1} - S^{p_{i1}}$  で置換されている。

【0105】

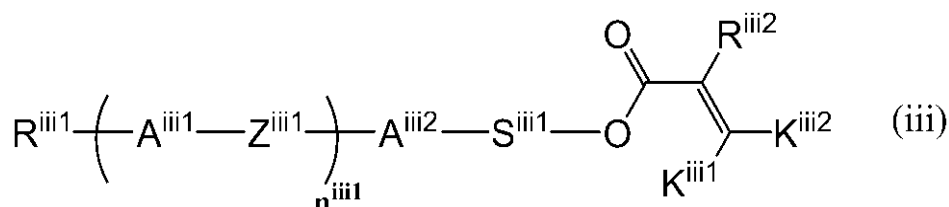
$m^{i1}$  は、好ましくは 2 ~ 5 の整数を表し、更に好ましくは 2 ~ 4 の整数を表す。

【0106】

一般式 (iii) ;

【0107】

【化26】



10

【0108】

(上記一般式 (iii) 中、 $R^{i1}$  は、炭素原子数 1 から 15 のアルキル基であり、当該アルキル基において、少なくとも 1 つの  $-CH_2-$  は、 $-O-$  または  $-S-$  で置換されてもよく、少なくとも 1 つの  $-(CH_2)_2-$  は、 $-CH=CH-$  または  $-C \equiv C-$  で置換されてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素原子は、ハロゲン原子で置換されてもよく、

20

$A^{i1}$  および  $A^{i4}$  はそれぞれ独立して、1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - シクロヘキセニレン、1, 4 - フェニレン、ナフタレン - 2, 6 - ジイル、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、テトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイル、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル、ピリミジン - 2, 5 - ジイル、ピリジン - 2, 5 - ジイル、フルオレン - 2, 7 - ジイル、フェナントレン - 2, 7 - ジイル、アントラセン - 2, 6 - ジイル、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン - 3, 17 - ジイル、または 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17 - テトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン - 3, 17 - ジイルであり、これらの環において、少なくとも 1 つの水素原子は、フッ素原子、塩素原子、炭素原子数 1 から 12 のアルキル基、炭素原子数 2 から 12 のアルケニル基、炭素原子数 1 から 11 のアルコキシ基、または炭素原子数 2 から 11 のアルケニルオキシ基で置換されてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素原子は、フッ素原子または塩素原子で置換されてもよく、

30

$Z^{i1}$  は、単結合または炭素原子数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの  $-CH_2-$  は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または  $-OCOO-$  で置換されてもよく、少なくとも 1 つの  $-(CH_2)_2-$  は、 $-CH=CH-$  または  $-C \equiv C-$  で置換されてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素原子は、ハロゲン原子で置換されてもよく、

$S^{i1}$  は、単結合または炭素原子数 1 から 10 のアルキレン基であり、当該アルキレン基において、少なくとも 1 つの  $-CH_2-$  は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または  $-OCOO-$  で置換されてもよく、少なくとも 1 つの  $-(CH_2)_2-$  は、 $-CH=CH-$  または  $-C \equiv C-$  で置換されてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素原子は、ハロゲン原子で置換されてもよく、

40

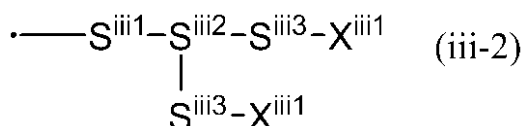
$K^{i1}$  および  $K^{i2}$  はそれぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、または少なくとも 1 つの水素原子がハロゲン原子 (例えばフッ素原子) で置換された炭素原子数 1 から 5 のアルキル基であり、

$n^{i1}$  は 0、1、2、3、または 4 であり、

$R^{i2}$  は、式 (iii - 1) または式 (iii - 2) で表される基であり、

【0109】

50

$$\cdot\text{---S}^{\text{iii1}}\text{---X}^{\text{iii1}} \quad (\text{iii-1})$$


式 ( i i i - 1 ) および式 ( i i i - 2 ) において、

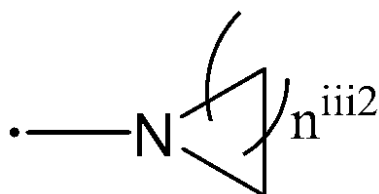
10

 $S^{i_1 i_2 i_3 \dots i_{l-1}}$  は、 $= CH$  - または  $= N$  - であり、

20

式 (X i i i 1) :

【化 2 8】

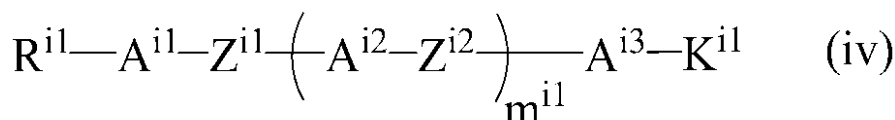


30

(  $n_1 n_2$  は、  $1 \sim 5$  の整数ある。 )

一般式 ( i v ) ;

【化 2 9】



40

50

直配向を助けるために好適に使用される。

【 0 1 1 5 】

加えて、本発明者らは、本実施形態における化合物 ( i v ) を含む液晶組成物が  $K^{i1}$  で表される部分構造を有することにより、液晶分子の配向のみならず、液晶組成物の保存性安定性を確保できることを見出した。

【 0 1 1 6 】

更に、一般式 ( i v ) で表される化合物 ( i v ) を含む液晶組成物は、 $A^{i2}$  又は  $A^{i3}$  の置換基として、或いは、 $K^{i1}$  の置換基として、特定の位置に重合性基を有するため、より良好な配向性を維持できる。

【 0 1 1 7 】

以上の観点から、本実施形態の液晶組成物における化合物 ( i v ) は、分子の末端、好ましくは分子の主鎖の末端に、 $K^{i1}$  で表される部分構造を有していればよく、 $K^{i1}$  で表される部分構造が結合する結合先の化学構造は、液晶組成物の機能を阻害しない範囲であれば特に制限されない。

【 0 1 1 8 】

以下、一般式 ( i v ) で表される化合物の具体例について説明する。

【 0 1 1 9 】

一般式 ( i v ) 中の  $K^{i1}$  は好ましくは、直鎖又は分岐の炭素原子数 3 ~ 40 のアルキル基、炭素原子数 3 ~ 40 の直鎖又は分岐のハロゲン化アルキル基、炭素原子数 3 ~ 40 の直鎖又は分岐のシアノ化アルキル基であり、ここで、 $K^{i1}$  中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は - (  $C = X^{i1}$  ) - 及び / 又は - (  $CH - CN$  ) - で置換されており、 $K^{i1}$  中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は - (  $C = X^{i1}$  ) - で置換されていることが好ましく、少なくとも 3 個以上の第二級炭素原子は - (  $C = X^{i1}$  ) - で置換されていることが好ましく、少なくとも 4 個以上の第二級炭素原子は - (  $C = X^{i1}$  ) - で置換されていることが好ましい。 $X^{i1}$  は電圧保持率 (VHR) 向上の観点から酸素原子が好ましい。 $K^{i1}$  は、好ましくは、炭素原子数 3 ~ 30 の直鎖又は分岐のアルキル基、直鎖又は分岐のハロゲン化アルキル基、直鎖又は分岐のシアノ化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - (  $C = CH_2$  ) - 、 - (  $C = CHR^{i3}$  ) - 、 - (  $C = CR^{i3}_2$  ) - 、 -  $CH = CH$  - 、 -  $C \equiv C$  - 、 -  $O$  - で置換されてもよく、より好ましくは、炭素原子数 3 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基又は直鎖又は分岐のシアノ化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - (  $C = CH_2$  ) - 、 - (  $C = CHR^{i3}$  ) - 、 - (  $C = CR^{i3}_2$  ) - 、 -  $O$  - で置換されてもよく、より好ましくは、炭素原子数 3 ~ 20 の分岐のアルキル基又は分岐のシアノ化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - (  $C = CH_2$  ) - 、 -  $O$  - で置換されてもよい。 $R^{i3}$  は炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 7 のアルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましく、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -  $O$  - 、 -  $CH = CH$  - 又は -  $C \equiv C$  - で置換されてもよい。

【 0 1 2 0 】

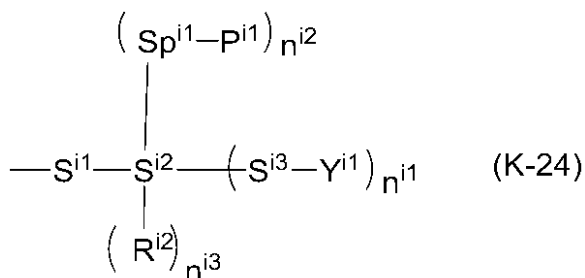
また、 $K^{i1}$  中の水素原子は重合性基、すなわち  $P^{i1} - Sp^{i1}$  - で置換されていることが好ましい。 $K^{i1}$  中に極性基と重合性基が存在していることで、より良好な配向性が得られる。

【 0 1 2 1 】

$K^{i1}$  は、一般式 ( K - 2 4 ) を表すことが好ましい。

【 0 1 2 2 】

## 【化 3 0】



## 【 0 1 2 3】

(式中、 $\text{Y}^{i1}$  は、炭素原子数 3 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は - (  $\text{C} = \text{X}^{i1}$  ) - 及び / 又は - (  $\text{CH} - \text{CN}$  ) - で置換されており、また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -  $\text{CH} = \text{CH}$  - 、 -  $\text{C} - \text{C}$  - 、 -  $\text{O}$  - 、 -  $\text{NH}$  - 、 -  $\text{COO}$  - 又は -  $\text{OCO}$  - で置換されてもよく、また、これらのアルキル基中の水素原子は  $\text{P}^{i1} - \text{Sp}^{i1}$  - で置換されてもよく、 $\text{X}^{i1}$  は、酸素原子、硫黄原子、 $\text{NH}$  又は  $\text{NR}^{i3}$  を表し、

$\text{S}^{i1}$  及び  $\text{S}^{i3}$  はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 6 のアルキレン基又は単結合を表し、該アルキレン基中の -  $\text{CH}_2$  - は酸素原子が直接隣接しないように -  $\text{CH} = \text{CH}$  - 、 -  $\text{C} - \text{C}$  - 、 - (  $\text{C} = \text{CH}_2$  ) - 、 - (  $\text{C} = \text{CHR}^{i3}$  ) - 、 - (  $\text{C} = \text{CR}^{i3}_2$  ) - 、 -  $\text{O}$  - 、 -  $\text{NH}$  - 、 - (  $\text{C} = \text{O}$  ) - 、 -  $\text{COO}$  - 又は -  $\text{OCO}$  - で置換されてもよく、

$\text{S}^{i2}$  は炭素原子、窒素原子又はケイ素原子を表し、

$\text{R}^{i2}$  は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらの基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -  $\text{O}$  - 、 -  $\text{CH} = \text{CH}$  - 、 -  $\text{C} - \text{C}$  - 、 -  $\text{C} (= \text{X}^{i1})$  - 又は -  $\text{CH} ( - \text{CN} )$  - で置換されてもよく、

$\text{P}^{i1}$  は重合性基を表し、

$\text{Sp}^{i1}$  はスペーサー基又は単結合を表し、

$n^{i1}$  は 1 ~ 3 の整数を表し、 $n^{i2}$  及び  $n^{i3}$  はそれぞれ独立して 0 ~ 2 の整数を表すが、 $\text{S}^{i2}$  が炭素原子又はケイ素原子を表す場合、 $n^{i1} + n^{i2} + n^{i3}$  は 3 であり、 $\text{S}^{i2}$  が窒素原子を表す場合、 $n^{i1} + n^{i2} + n^{i3}$  は 2 である。 $\text{R}^{i3}$  は一般式 (  $i$  ) 中の  $\text{R}^{i3}$  と同じ意味を表し、一般式 (  $\text{K} - 1$  ) 中に  $\text{R}^{i2}$ 、 $\text{X}^{i1}$ 、 $\text{Y}^{i1}$ 、 $\text{S}^{i1}$ 、 $\text{S}^{i3}$ 、 $\text{P}^{i1}$  及び  $\text{Sp}^{i1}$  が複数存在する場合、それらは同一であっても異なっても良い。)

一般式 (  $\text{K} - 1$  ) 中の  $\text{S}^{i1}$  及び  $\text{S}^{i3}$  は好ましくは、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖又は分岐のアルキレン基又は単結合であり、該アルキレン基中の -  $\text{CH}_2$  - は酸素原子が直接隣接しないように -  $\text{CH} = \text{CH}$  - 、 - (  $\text{C} = \text{CH}_2$  ) - 、 -  $\text{O}$  - 、 - (  $\text{C} = \text{O}$  ) - 、 -  $\text{COO}$  - 又は -  $\text{OCO}$  - で置換されてもよく、より好ましくは、単結合、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の -  $\text{CH}_2$  - は酸素原子が直接隣接しないように -  $\text{O}$  - で置換された基であることが好ましい。 $\text{S}^{i1}$  及び  $\text{S}^{i3}$  は、具体的には - (  $\text{CH}_2$  )  $n$  - 、 -  $\text{O} - (\text{CH}_2)_n -$  、 - (  $\text{CH}_2$  )  $n - \text{O}$  - 、 - (  $\text{CH}_2$  )  $n - \text{O} - (\text{CH}_2)_m -$  、 -  $\text{COO} - (\text{CH}_2)_n -$  、 -  $\text{OCO} - (\text{CH}_2)_n -$  を表すことが好ましい (  $n$  及び  $m$  は、1 ~ 6 の整数を表す。)

$\text{S}^{i2}$  は炭素原子であることが好ましい。 $\text{R}^{i2}$  は好ましくは、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の -  $\text{CH}_2$  - は -  $\text{O}$  - 、 -  $\text{C} (= \text{X}^{i1})$  - 又は -  $\text{CH} ( - \text{CN} )$  - で置換されてもよく (ただし -  $\text{O}$  - は連続にはならない)、好ましくは、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 7 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の -  $\text{CH}_2$  - は -  $\text{O}$  - 、 -  $\text{C} (= \text{X}^{i1})$  - 又は -  $\text{CH} ( - \text{CN} )$  - で置換 (ただし -  $\text{O}$  - は連続にはならない) されてもよく、より好ましくは、水素原子、炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖アルキル基が好ましい。

## 【 0 1 2 4 】

$Y^{i1}$  は炭素原子数 3 ~ 20 のアルキル基、炭素原子数 3 ~ 20 の直鎖又は分岐のハロゲン化アルキル基、炭素原子数 3 ~ 20 の直鎖又は分岐のシアノ化アルキル基であり、ここで、 $Y^{i1}$  中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は - (  $C = X^{i1}$  ) - 及び / 又は - (  $CH - CN$  ) - で置換されており、 $Y^{i1}$  中の少なくとも 2 個以上の第二級炭素原子は - (  $C = X^{i1}$  ) - で置換されていることが好ましい。 $X^{i1}$  は電圧保持率 (VHR) 向上の観点から酸素原子が好ましい。 $Y^{i1}$  は、好ましくは、炭素原子数 3 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - (  $C = CH_2$  ) - 、 - (  $C = CHR^{i3}$  ) - 、 - (  $C = CR^{i3}_2$  ) - 、 -  $CH = CH$  - 、 -  $C - C$  - 、 -  $O$  - で置換されてもよく、より好ましくは、炭素原子数 3 ~ 7 の直鎖又は分岐のアルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - (  $C = CH_2$  ) - 、 - (  $C = CHR^{i3}$  ) - 、 - (  $C = CR^{i3}_2$  ) - 、 -  $O$  - で置換されてもよく、より好ましくは、炭素原子数 3 ~ 7 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -  $O$  - で置換されてもよい。また、アルキル基中の水素原子は  $P^{i1} - Sp^{i1}$  - で置換されてもよい。

10

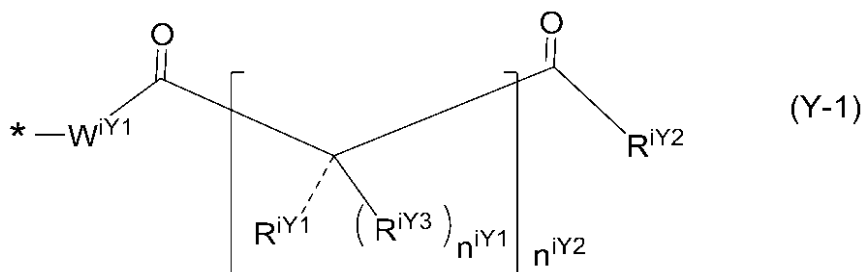
## 【 0 1 2 5 】

$Y^{i1}$  は、一般式 (  $Y - 1$  ) から選ばれる基を表すことが、液晶の配向性を向上させる観点から好ましい。

## 【 0 1 2 6 】

20

## 【 化 3 1 】



## 【 0 1 2 7 】

30

( 式中、 $W^{iY1}$  は単結合又は酸素原子を表し、破線は単結合又は二重結合を表し、 $R^{iY1}$  は、破線が単結合を表す場合、水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基又は  $P^{i1} - Sp^{i1}$  - を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -  $O$  - 、 -  $CH = CH$  - 、 -  $C - C$  - 又は -  $CO$  - で置換されてもよく、破線が二重結合を表す場合、 $=CH_2$  、 $=CHR^{iY4}$  、又は  $=CR^{iY4}_2$  を表し、 $R^{iY4}$  は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -  $O$  - 、 -  $CH = CH$  - 又は -  $C - C$  - で置換されてもよく、 $R^{iY3}$  は、破線が単結合を表す場合の  $R^{iY1}$  と同じ意味を表し、 $R^{iY2}$  は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -  $CH = CH$  - 、 -  $C - C$  - 、 -  $O$  - 、 -  $NH$  - 、 -  $COO$  - 、 -  $OCO$  - 、 -  $C(=O)$  - 又は -  $CH_2(-CN)$  - で置換されてもよく、また、 $R^{iY2}$  は  $P^{i1} - Sp^{i1}$  - を表し、 $n^{iY1}$  は破線が二重結合を表す場合 0 であり、破線が単結合を表す場合 1 であり、 $n^{iY2}$  は 0 ~ 5 の整数を表し、 $P^{i1}$  は重合性基を表し、 $Sp^{i1}$  はスペーサー基又は単結合を表し、 $R^{iY1}$  、 $R^{iY3}$  、 $R^{iY4}$  、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  が複数存在する場合、それらは同一であっても異なってもよく、\*で  $S^{i3}$  と結合する。 )

40

$R^{iY1}$  は、破線が単結合を表す場合、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基が好ましく、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 7 のアルキル基が好ましく、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましく、該アルキル基中の第二級炭素原子

50

は酸素原子が直接隣接しないように - O - 、 - CH = CH - 又は - C C - で置換されてもよい。具体的には、水素原子を表すことが好ましく、また、耐熱性向上の観点から、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 3 のアルコキシ基、 - CO - CH<sub>3</sub>、 - CH<sub>2</sub> - O - CH<sub>3</sub> を表すことが好ましい。また、R<sup>i Y 1</sup> は耐熱性向上の観点から P<sup>i 1</sup> - Sp<sup>i 1</sup> - 表すことも好ましい。R<sup>i Y 1</sup> が P<sup>i 1</sup> - Sp<sup>i 1</sup> - を表す場合、一般式 (i) で表される化合物が熱により分解してしまうことにより生じる分解物が重合されることから、不純物の増加を防ぐことができ、液晶組成物への悪影響が少なくなると考えられる。P<sup>i 1</sup> は重合性基を表し、アクリロイル基、メタクリロイル基、又は後述する一般式 (P - 1) ~ (P - 15) で表される群より選ばれる置換基を表すことが好ましい。Sp<sup>i 1</sup> は好ましくは炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表し、より好ましくは炭素原子数 2 ~ 15 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表し、更に好ましくは炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表す。

10

## 【0128】

また、破線が二重結合を表す場合、= CH<sub>2</sub>、= CHR<sup>i Y 4</sup>、又は = CR<sup>i Y 4</sup><sub>2</sub> を表し、= CH<sub>2</sub> を表すことが好ましい。R<sup>i Y 4</sup> は炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 7 のアルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましく、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O - 、 - CH = CH - 又は - C C - で置換されてもよい。

## 【0129】

R<sup>i Y 3</sup> の好ましい基は、破線が単結合を表す場合の R<sup>i Y 1</sup> の好ましい基と同じである。n<sup>i Y 1</sup> は 0 が好ましい。

20

## 【0130】

R<sup>i Y 1</sup> 及び R<sup>i Y 3</sup> の好ましい組み合わせとして、共に水素原子、共に炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基、共に炭素原子数 1 ~ 3 のアルコキシ基、共に - CH<sub>2</sub> - O - CH<sub>3</sub> 等があげられる。R<sup>i Y 1</sup> 及び R<sup>i Y 3</sup> のいずれか一方が P<sup>i 1</sup> - Sp<sup>i 1</sup> - 又は - CO - CH<sub>3</sub> を表す場合、他方は水素原子を表すことが好ましい。n<sup>i Y 2</sup> は 0 ~ 3 の整数が好ましく、0、1 又は 2 がより好ましく、0 又は 1 がより好ましい。

## 【0131】

R<sup>i Y 2</sup> は、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 10 のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 7 のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましい。また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O - 、 - (C = X<sup>i 2</sup>) - 又は - (CH<sub>2</sub> - CN) - で置換されていることが好ましい。X<sup>i 2</sup> はVHR向上の観点から酸素原子が好ましい。また、R<sup>i Y 2</sup> は、P<sup>i 1</sup> - Sp<sup>i 1</sup> - を表すことが好ましい。R<sup>i Y 2</sup> が P<sup>i 1</sup> - Sp<sup>i 1</sup> - を表す場合、一般式 (i) で表される化合物が熱により分解してしまうことにより生じる分解物が重合されることから、不純物の増加を防ぐことができ、液晶組成物への悪影響が少なくなると考えられる。

30

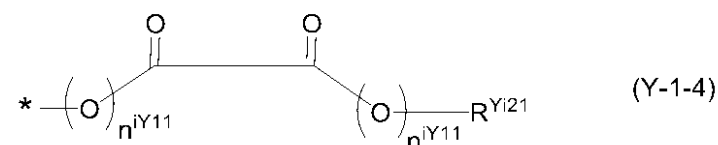
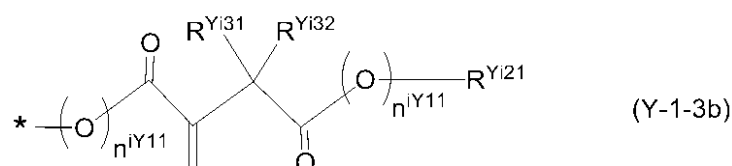
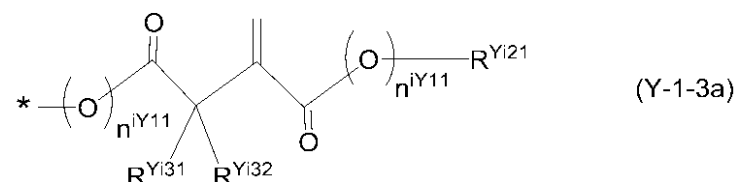
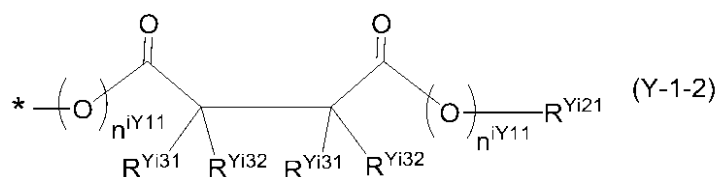
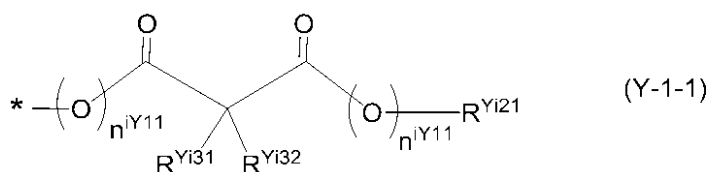
## 【0132】

一般式 (Y - 1) は、より具体的には、式 (Y - 1 - 1)、(Y - 1 - 2)、(Y - 1 - 3 a)、(Y - 1 - 3 b)、(Y - 1 - 4) が好ましい。

40

## 【0133】

## 【化 3 2】



## 【0134】

(式中、 $n^{iY11}$  は 0 又は 1 を表し、 $R^{iY21}$  は炭素原子数 1 ~ 10 のアルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -CH=CH-、-C-C-、-O-、-NH-、-COO-、-OCO-、-(C=O)- 又は -(CH<sub>2</sub>-CN)- で置換されてもよく、また、 $R^{iY21}$  は  $P^{i1}$ - $Sp^{i1}$ - を表し、 $R^{iY31}$  及び  $R^{iY32}$  はそれぞれ独立して水素原子、炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -O-、-CH=CH-、-C-C- 又は -CO- で置換されてもよく、また、 $R^{iY31}$  及び  $R^{iY32}$  は  $P^{i1}$ - $Sp^{i1}$ - を表す。)

$R^{iY21}$  は、炭素原子数 1 ~ 7 のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましい。また、 $R^{iY21}$  は、 $P^{i1}$ - $Sp^{i1}$ - を表すことが好ましい。 $R^{iY31}$  及び  $R^{iY32}$  は水素原子、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 5 のアルコキシ基が好ましく、水素原子又、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 3 のアルコキシ基、-CO-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>3</sub> を表すことが好ましい。また、 $R^{iY31}$  及び  $R^{iY32}$  の少なくともいずれか一方は、 $P^{i1}$ - $Sp^{i1}$ - を表すことが好ましい。

## 【0135】

液晶化合物との相溶性を向上させる観点からは、式 (Y-1-1) の構造を有することが好ましい。式 (Y-1-1) としては、式 (Y-1-1a) ~ 式 (Y-1-1h) が好ましい。

## 【0136】

10

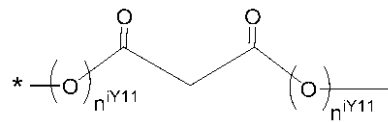
20

30

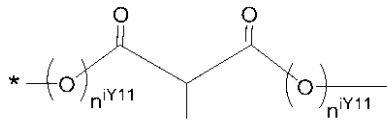
40



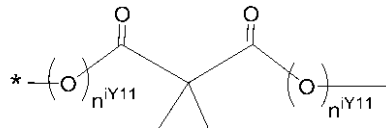
## 【化 3 3】



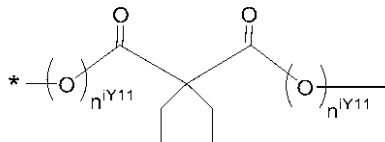
(Y-1-1a)



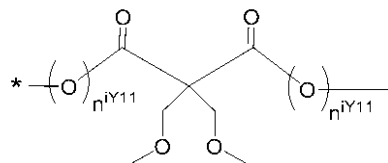
(Y-1-1b)



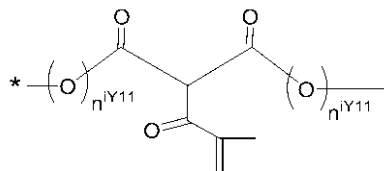
(Y-1-1c)



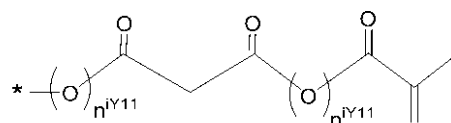
(Y-1-1d)



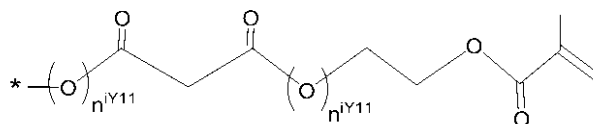
(Y-1-1e)



(Y-1-1f)



(Y-1-1g)



(Y-1-1h)

## 【 0 1 3 7】

(式中、 $n^{iY11}$  は 0 又は 1 を表す。)

液晶化合物との相溶性、耐熱性を向上させる観点からは、式 (Y-1-2) の構造を有することが好ましい。式 (Y-1-2) としては、式 (Y-1-2a) ~ 式 (Y-1-2f) が好ましい。

## 【 0 1 3 8】

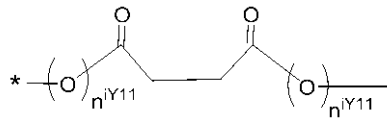
10

20

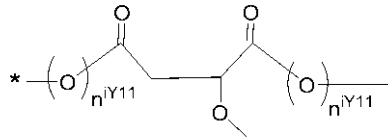
30

40

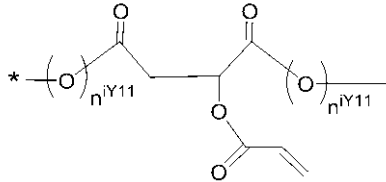
## 【化 3 4】



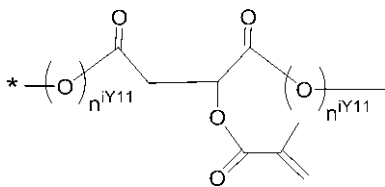
(Y-1-2a)



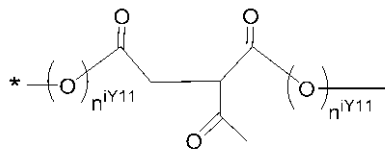
(Y-1-2b)



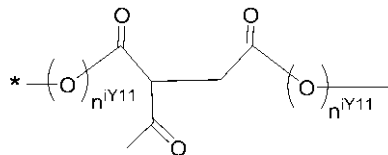
(Y-1-2c)



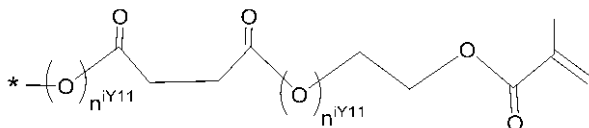
(Y-1-2d)



(Y-1-2e)



(Y-1-2f)



(Y-1-2g)

## 【 0 1 3 9】

(式中、 $n^{iY11}$  は 0 又は 1 を表す。) 耐熱性を向上させる観点からは、式 (Y - 1 - 3 a) 及び式 (Y - 1 - 3 b) の構造を有することが好ましい。式 (Y - 1 - 3 a) としては、式 (Y - 1 - 3 a a)、式 (Y - 1 - 3 b) としては、式 (Y - 1 - 3 b a) が好ましい。

## 【 0 1 4 0】

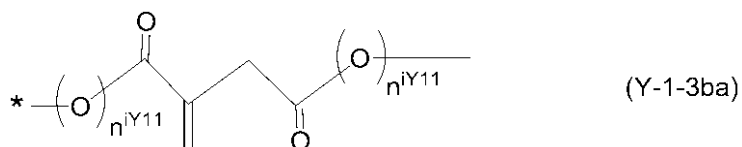
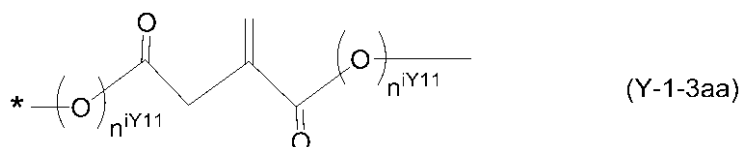
10

20

30

40

## 【化 3 5】



10

## 【 0 1 4 1】

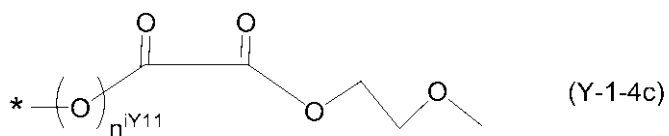
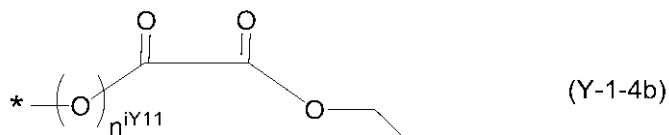
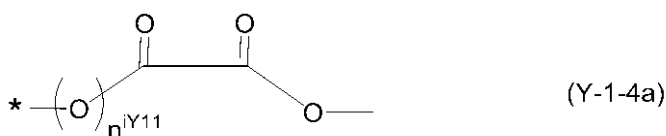
(式中、 $n^{iY11}$  は 0 又は 1 を表す。)

液晶組成物の配向性、電圧保持率を向上させる観点からは、式 (Y - 1 - 4) の構造を有することが好ましい。式 (Y - 1 - 4) としては、式 (Y - 1 - 4 a) ~ 式 (Y - 1 - 4 f) が好ましい。特に、(Y - 1 - 4 a) ~ (Y - 1 - 4 c) の構造は、液晶化合物との相溶性と液晶組成物の配向性のバランスがとれていて好ましい。

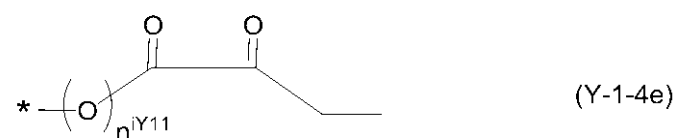
## 【 0 1 4 2】

## 【化 3 6】

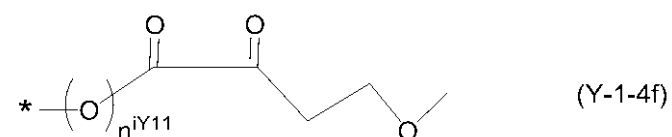
20



30



40



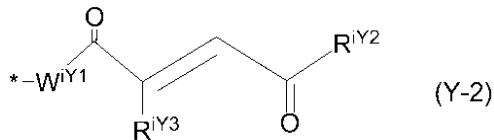
## 【 0 1 4 3】

(式中、 $n^{iY11}$  は 0 又は 1 を表す。)

また、 $Y^{i11}$  は、一般式 (Y - 2) から選ばれる基を表すことが、好ましい。

## 【 0 1 4 4】

## 【化 3 7】



## 【 0 1 4 5】

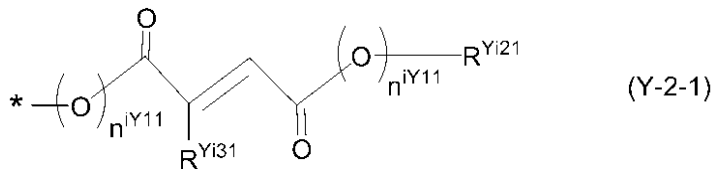
(式中、 $W^{iY1}$ 、 $R^{iY3}$  及び  $R^{iY2}$  は一般式 (Y-1) 中の  $W^{iY1}$ 、 $R^{iY3}$  及び  $R^{iY2}$  と同じ意味を表す。)

一般式 (Y-2) は、一般式 (Y-2-1) を表すことが好ましい。

## 【 0 1 4 6】

10

## 【化 3 8】



## 【 0 1 4 7】

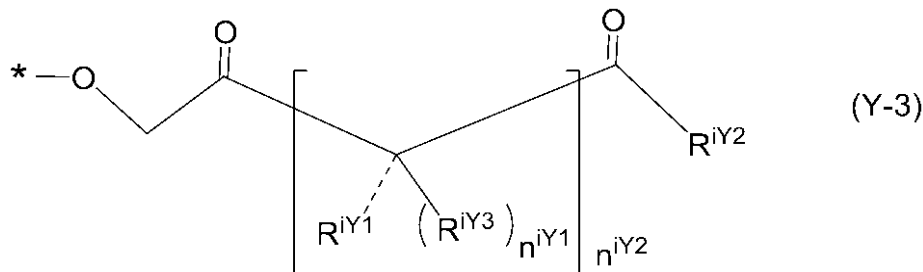
(式中、 $n^{iY11}$ 、 $R^{iY21}$  及び  $R^{iY31}$  は一般式 (Y-1-1) 中の  $n^{iY11}$ 、 $R^{iY21}$  及び  $R^{iY31}$  と同じ意味を表す。)

また、 $Y^{i1}$  は、一般式 (Y-3) から選ばれる基を表すことが、耐熱性向上の観点から好ましい。

20

## 【 0 1 4 8】

## 【化 3 9】



30

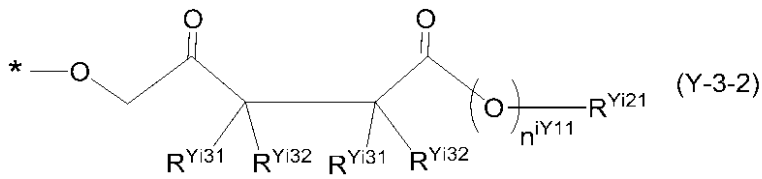
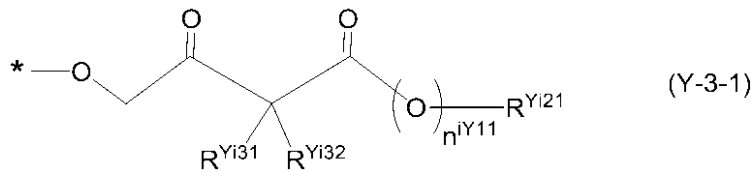
## 【 0 1 4 9】

(式中、 $R^{iY1}$ 、 $R^{iY2}$ 、 $R^{iY3}$ 、 $n^{iY1}$  及び  $n^{iY1}$  は一般式 (Y-1) 中の  $R^{iY1}$ 、 $R^{iY2}$ 、 $R^{iY3}$ 、 $n^{iY1}$  及び  $n^{iY1}$  とそれぞれ同じ意味を表す。)

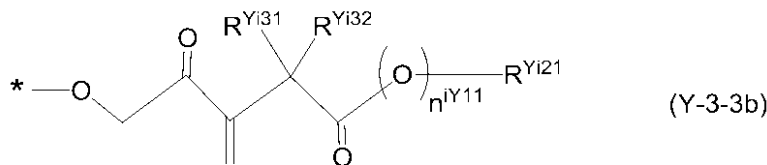
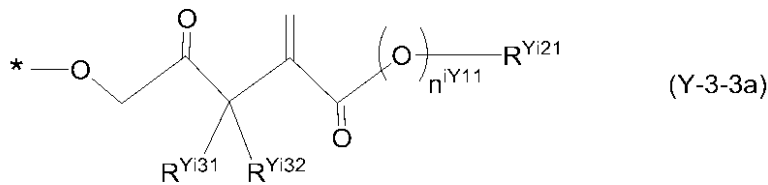
一般式 (Y-3) は、一般式 (Y-3-1) ~ 一般式 (Y-3-4) を表すことが好ましい。

## 【 0 1 5 0】

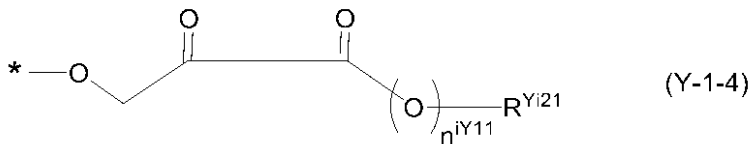
## 【化 4 0】



10



20



## 【 0 1 5 1】

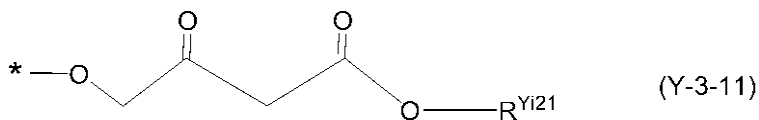
(式中、 $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$  及び  $n^{iY11}$  は一般式 (Y-1-1) 中の  $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$  及び  $n^{iY11}$  とそれぞれ同じ意味を表す。)

30

より具体的には、一般式 (Y-3-1) は一般式 (Y-3-11) が好ましい。

## 【 0 1 5 2】

## 【化 4 1】



## 【 0 1 5 3】

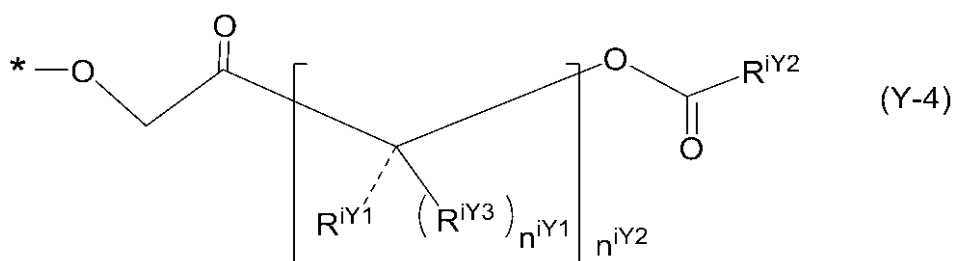
(式中、 $R^{iY21}$  は一般式 (Y-3-1) 中の  $R^{iY21}$  と同じ意味を表す。)

また、 $Y^{i1}$  は、一般式 (Y-4) から選ばれる基を表すことが、耐熱性向上の観点から好ましい。

40

## 【 0 1 5 4】

## 【化 4 2】



50

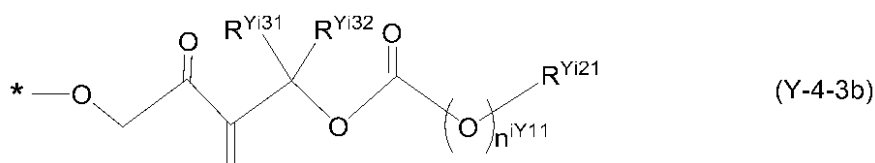
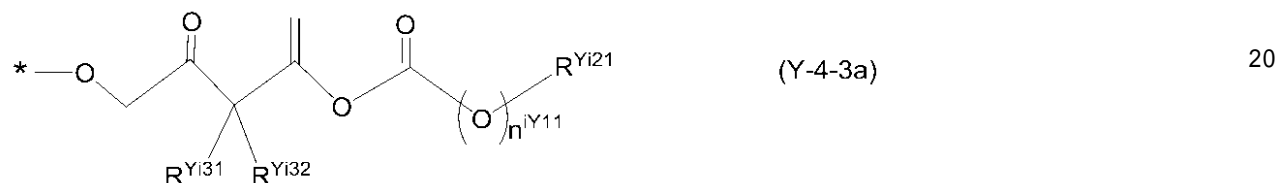
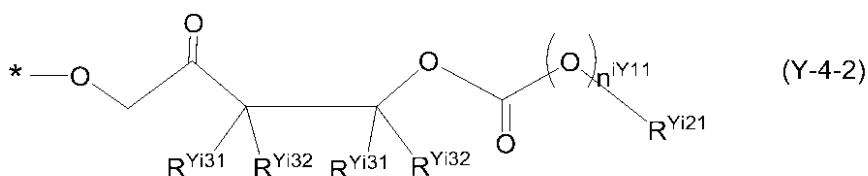
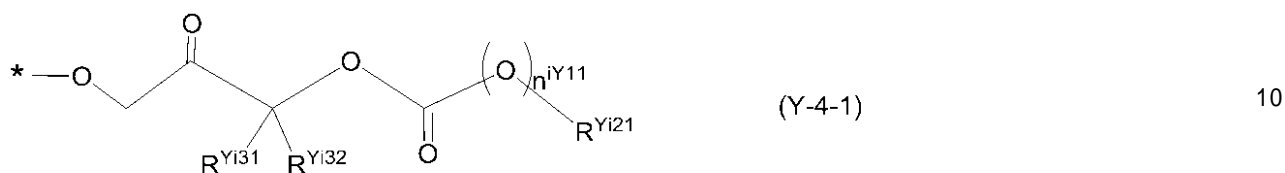
## 【 0 1 5 5 】

(式中、 $R^{iY1}$ 、 $R^{iY2}$ 、 $R^{iY3}$ 、 $n^{iY1}$  及び  $n^{iY1}$  は一般式 (Y-1) 中の  $R^{iY1}$ 、 $R^{iY2}$ 、 $R^{iY3}$ 、 $n^{iY1}$  及び  $n^{iY1}$  とそれぞれ同じ意味を表す。)

一般式 (Y-4) は、一般式 (Y-4-1) ~ 一般式 (Y-4-3b) を表すことが好ましい。

## 【 0 1 5 6 】

## 【 化 4 3 】



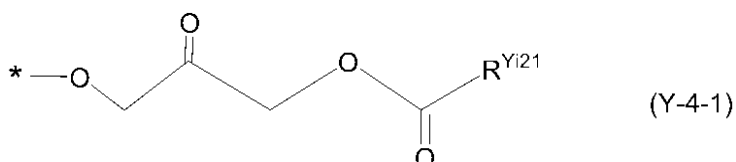
## 【 0 1 5 7 】

(式中、 $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$  及び  $n^{iY11}$  は一般式 (Y-1-1) 中の  $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$  及び  $n^{iY11}$  とそれぞれ同じ意味を表す。)

より具体的には、一般式 (Y-4-1) は一般式 (Y-4-11) が好ましい。

## 【 0 1 5 8 】

## 【 化 4 4 】



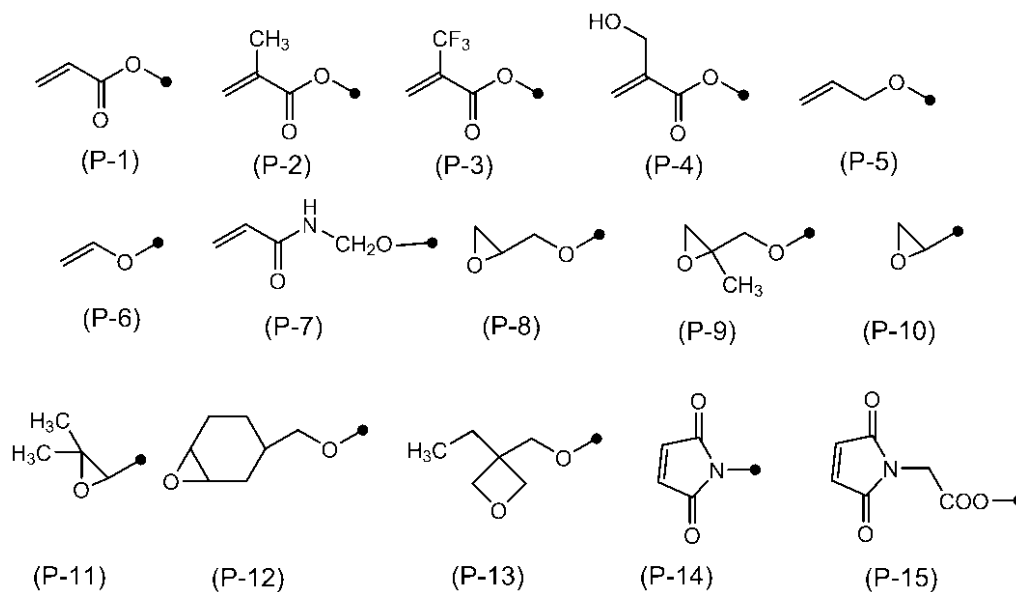
## 【 0 1 5 9 】

(式中、 $R^{iY21}$  は一般式 (Y-4-1) 中の  $R^{iY21}$  と同じ意味を表す。)

$P^{i1}$  は以下の式 (P-1) ~ 一般式 (P-15) で表される群より選ばれる置換基を表すことが好ましい。取り扱いの簡便性、反応性の点から、式 (P-1) ~ (P-3)、(P-14)、(P-15) のいずれかの置換基が好ましく、式 (P-1)、(P-2) が、さらに好ましい。

## 【 0 1 6 0 】

## 【化 4 5】



10

## 【 0 1 6 1 】

(式中、右端の黒点は結合手を表す。)

## 【 0 1 6 2 】

$Sp^{i1}$  は、好ましくは炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表し、より好ましくは炭素原子数 2 ~ 15 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表し、更に好ましくは炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表す。

20

## 【 0 1 6 3 】

$n^{i1}$  は、液晶の配向性と液晶化合物への溶解性を向上させる観点から、1 又は 2 を表すことが好ましい。 $n^{i2}$  は 0 又は 1 を表すことが好ましく、配向性を向上させる観点から 1 を表すことがより好ましい。 $n^{i3}$  は、0 又は 1 を表すことが好ましい。

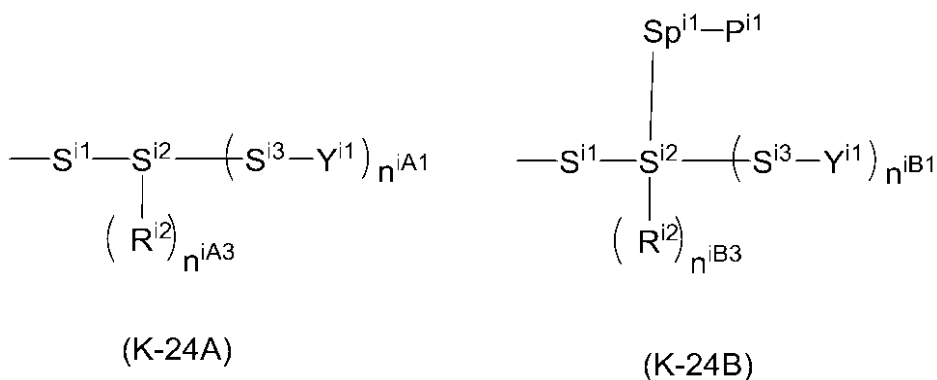
## 【 0 1 6 4 】

一般式 (K - 24) は、一般式 (K - 24A) 又は (K - 24B) から選ばれる基を表すことが好ましい。

30

## 【 0 1 6 5 】

## 【化 4 6】



40

## 【 0 1 6 6 】

(式中、 $Si^i1$ 、 $Si^i2$ 、 $Si^i3$ 、 $Y^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  は、一般式 (K - 1) 中の  $Si^i1$ 、 $Si^i2$ 、 $Si^i3$ 、 $Y^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  とそれぞれ同じ意味を表し、 $n^{iA1}$  は 1 ~ 3 の整数を表し、 $n^{iA3}$  は 0 ~ 2 の整数を表し、 $n^{iB1}$  は 1 ~ 2 の整数を表し、 $n^{iB3}$  は 0 又は 1 を表すが、 $Si^i2$  が炭素原子又はケイ素原子を表す場合、 $n^{iA1} + n^{iA3}$  は 3 であり、 $n^{iB1} + n^{iB3}$  は 2 であり、 $Si^i2$  が窒素原子を表す場合、 $n^{iA1} + n^{iA3}$  は 2 であり、 $n^{iB1}$  は 1、 $n^{iB3}$  は 0 を表す。)

## 【 0 1 6 7 】

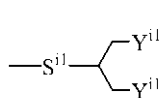
50

式 ( i ) 中の  $K^{i1}$  は液晶組成物を垂直配向させるために重要な構造であり、極性基と重合基が隣接していることで、より良好な配向性が得られ、また液晶組成物への良好な溶解性を示す。従って、液晶の配向性を重要視する場合は、一般式 ( K - 24B ) が好ましい。一方、液晶化合物への溶解性を重要視する場合は、一般式 ( K - 24A ) が好ましい。一般式 ( K - 24A ) ~ ( K - 24B ) の好ましい例としては以下の式 ( K - 24A - 1 ) ~ ( K - 24A - 4 ) 及び式 ( K - 24B - 1 ) ~ ( K - 24B - 6 ) が挙げられるが、液晶組成物への溶解性の点から、式 ( K - 24A - 1 ) ~ ( K - 24A - 3 ) が好ましく、配向性の点からは、式 ( K - 24B - 2 ) ~ ( K - 24B - 4 ) が好ましく、特に好ましくは式 ( K - 24A - 1 )、( K - 24B - 2 ) 及び ( K - 24B - 4 ) が挙げられる。

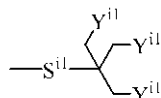
【 0 1 6 8 】

10

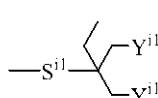
【 化 4 7 】



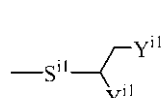
(K-24A-1)



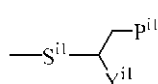
(K-24A-2)



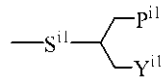
(K-24A-3)



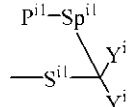
(K-24A-4)



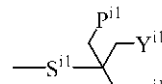
(K-24B-1)



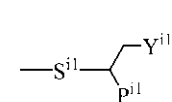
(K-24B-2)



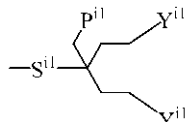
(K-24B-3)



(K-24B-4)



(K-24B-5)



(K-24B-6)

【 0 1 6 9 】

( 式中、 $S^{i1}$ 、 $Y^{i1}$  及び  $P^{i1}$  はそれぞれ独立して一般式 ( K - 24 ) 中の  $S^{i1}$ 、 $Y^{i1}$  及び  $P^{i1}$  と同じ意味を表す。 )

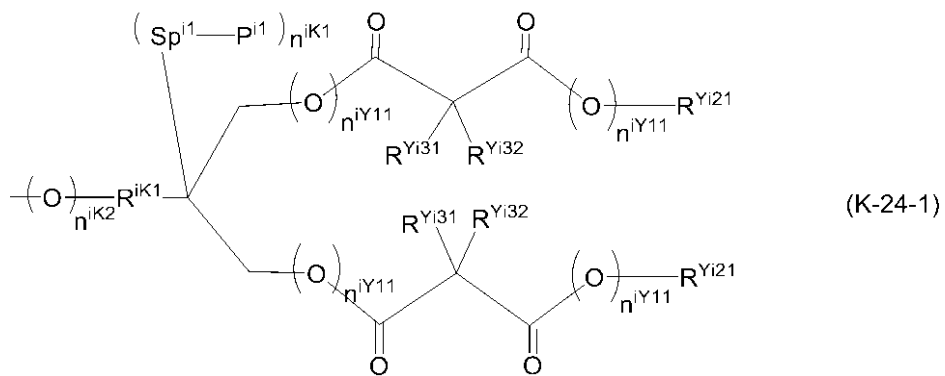
30

また、一般式 ( K - 24 ) は、一般式 ( K - 24 - 1 )、( K - 24 - 2 )、( K - 24 - 3 a )、( K - 24 - 3 b )、( K - 24 - 4 a )、( K - 24 - 4 b ) ( K - 24 - Y 2 )、( K - 24 - Y 3 ) 及び ( K - 24 - Y 4 ) から選ばれる基を表すことが好ましい。

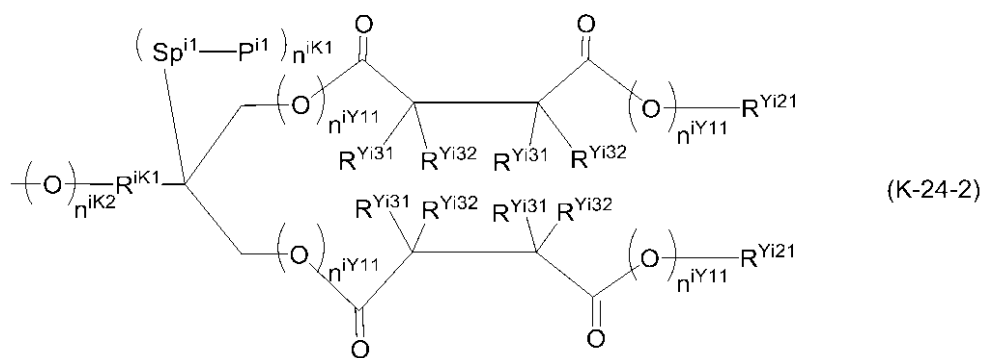
【 0 1 7 0 】



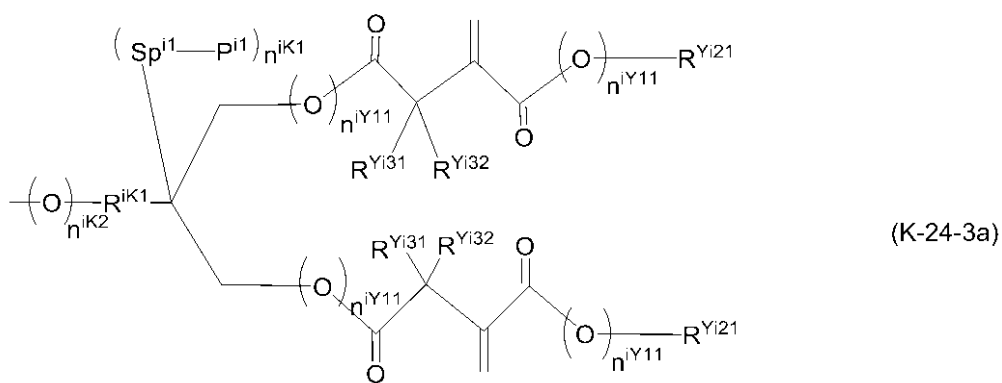
## 【化 4 8】



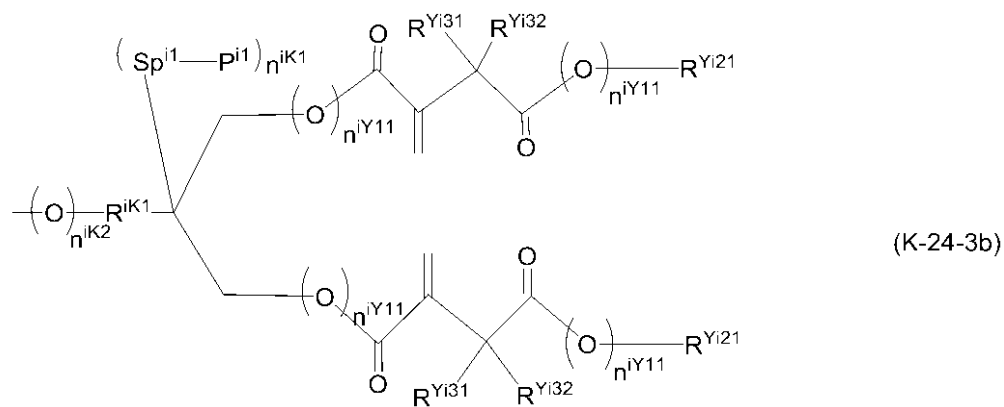
10



20



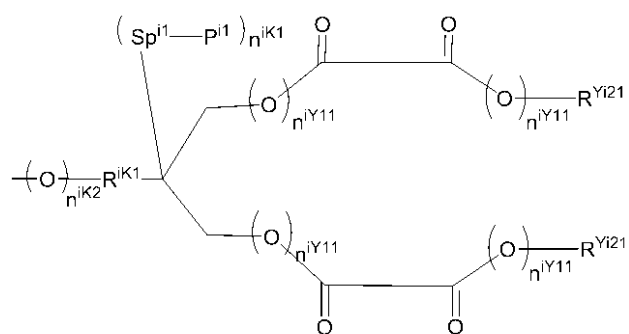
30



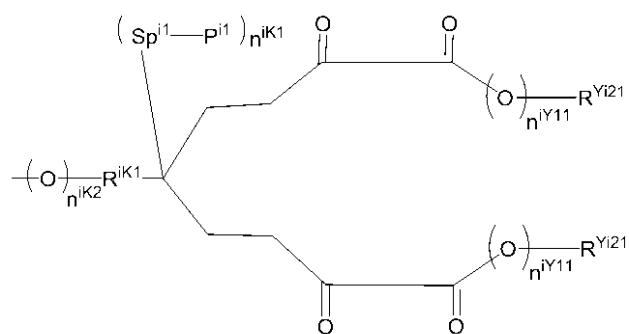
40

## 【 0 1 7 1 】

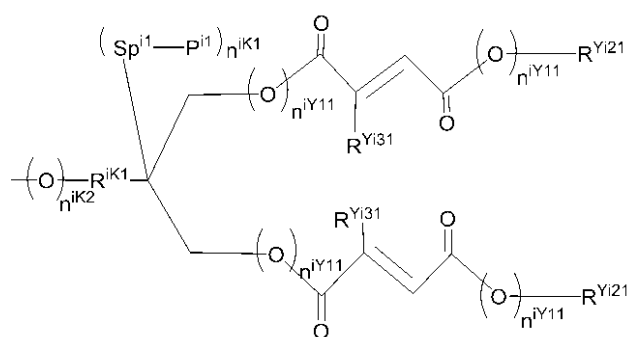
【化 4 9】



10



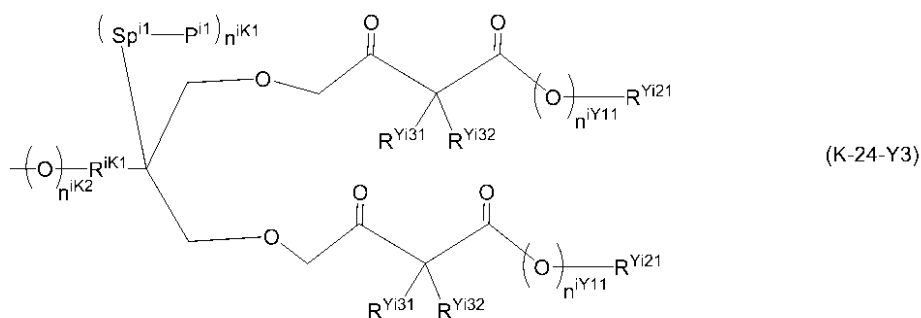
20



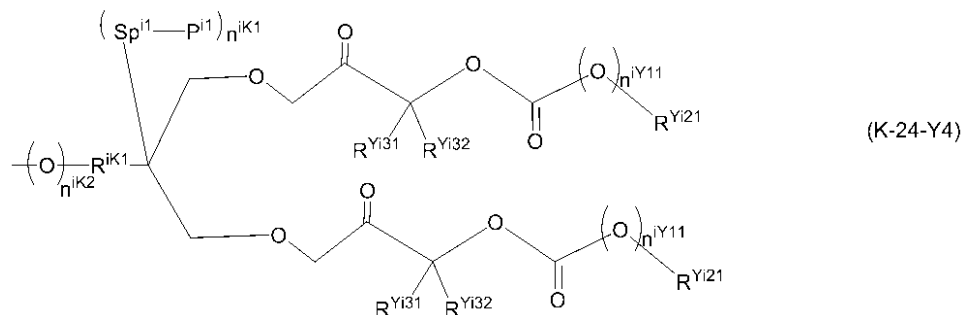
30

【 0 1 7 2 】

## 【化 5 0】



10



20

## 【 0 1 7 3 】

(式中、 $n^{iY11}$ 、 $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$  及び  $R^{iY32}$  はそれぞれ独立して一般式 (Y-1-1) ~ (Y-4) 中の  $n^{iY11}$ 、 $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$  及び  $R^{iY32}$  とそれぞれ同じ意味を表し、 $Sp^{i1}$  及び  $P^{i1}$  は一般式 (i) 中の  $Sp^{i1}$  及び  $P^{i1}$  とそれぞれ同じ意味を表し、 $R^{iK1}$  は炭素原子数 1 ~ 6 のアルキレン基又は単結合を表し、該アルキレン基中の  $-CH_2-$  は酸素原子が直接隣接しないように  $-CH=CH-$ 、 $-C \equiv C-$  又は  $-O-$  で置換されてもよく、 $n^{iK1}$  は及び  $n^{iK2}$  はそれぞれ独立して 0 又は 1 を表す。)

$R^{iK1}$  は炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖のアルキレン基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖のアルキレン基が好ましい。なお、 $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$ 、 $Sp^{i1}$  及び  $P^{i1}$  の好ましい基は一般式 (Y-1-1) ~ (Y-1-4)、(Y-2) ~ (Y-4)、一般式 (i) 中の  $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$ 、 $Sp^{i1}$ 、 $P^{i1}$  と同様である。

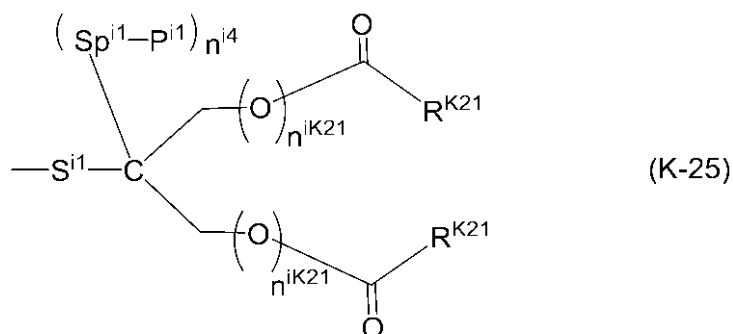
30

## 【 0 1 7 4 】

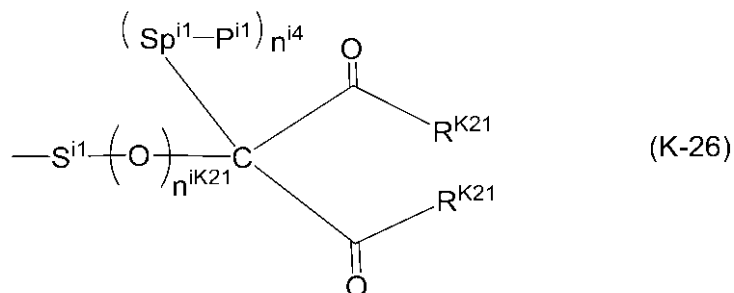
また、 $K^{i1}$  は、一般式 (K-25) ~ (K-28) を表すことが好ましい。

## 【 0 1 7 5 】

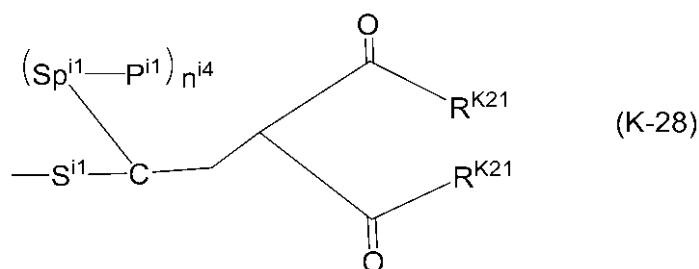
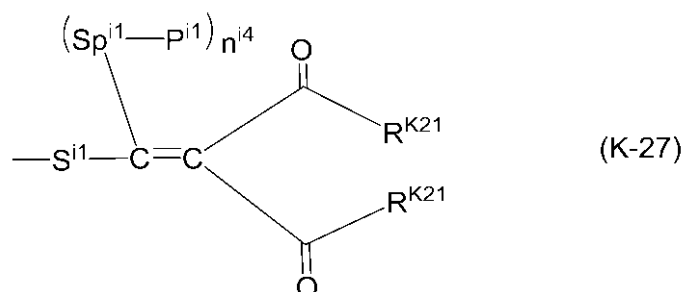
## 【化 5 1】



10



20



30

## 【0176】

(式中、 $\text{Si}^{i1}$ 、 $\text{Pi}^1$ 及び $\text{Sp}^{i1}$ は一般式(K-24)中の $\text{Si}^{i1}$ 、 $\text{Pi}^1$ 及び $\text{Sp}^{i1}$ とそれぞれ同じ意味を表し、 $\text{R}^{\text{K}21}$ は炭素原子数1～10の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも1個以上の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}-\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、又は $-\text{NH}-$ で置換されてもよく、 $n^{i4}$ 、 $n^{i\text{K}21}$ はそれぞれ独立して0又は1を表す。)

40

$\text{R}^{\text{K}21}$ は炭素原子数1～5の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表すことが好ましく、炭素原子数1～3の直鎖アルキル基又はシアノ化アルキル基を表すことがより好ましい。また、これらのアルキル基中の少なくとも1個以上の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-\text{O}-$ で置換されていることが好ましい。 $\text{R}^{\text{K}21}$ は具体的には、炭素原子数1～3のアルキル基、炭素原子数1～3のアルコキシ基、炭素原子数1～3のシアノ化アルキル基が好ましい。

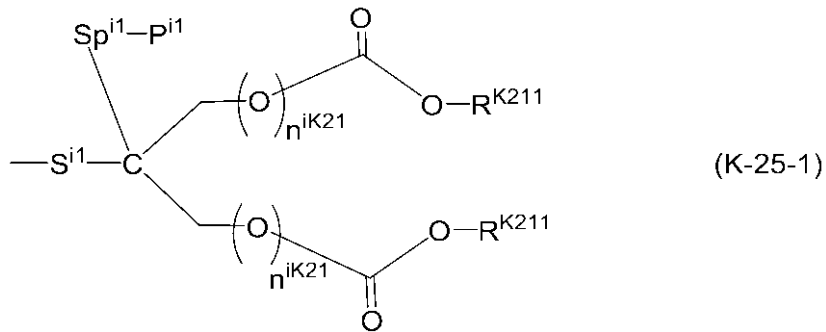
## 【0177】

50

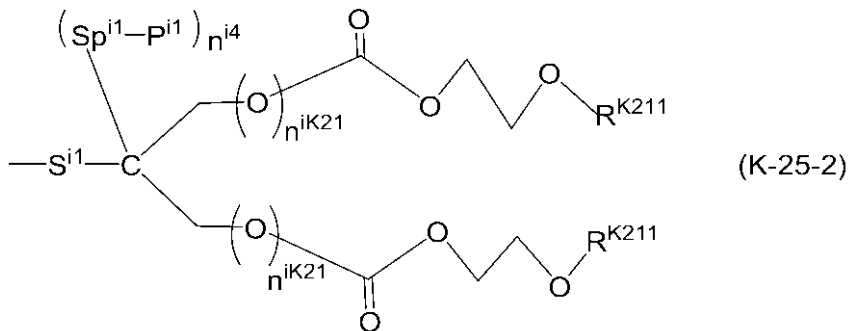
一般式 ( K - 2 5 ) は、以下の一般式 ( K - 2 5 - 1 ) ~ ( K - 2 5 - 3 ) を表すことが好ましい。

【 0 1 7 8 】

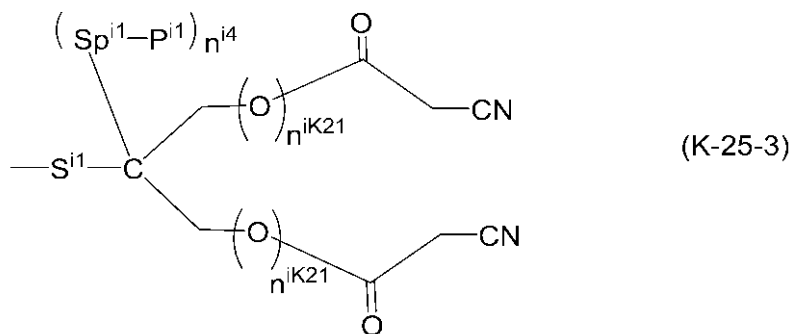
【 化 5 2 】



10



20



30

【 0 1 7 9 】

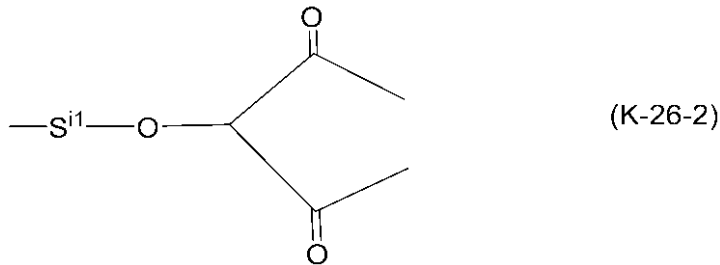
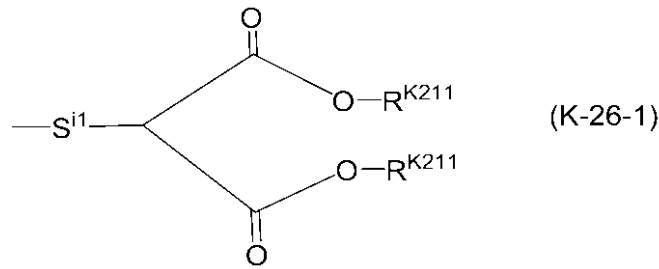
( 式中、 $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $Sp^{i1}$ 、 $n^{i4}$  及び  $n^{iK21}$  は一般式 ( K - 2 5 ) 中の  $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $Sp^{i1}$ 、 $n^{i4}$  及び  $n^{iK21}$  とそれぞれ同じ意味を表し、 $R^{K211}$  は炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。 )

一般式 ( K - 2 6 ) は、以下の一般式 ( K - 2 6 - 1 ) 及び ( K - 2 6 - 2 ) を表すことが好ましい。

【 0 1 8 0 】

40

## 【化 5 3】



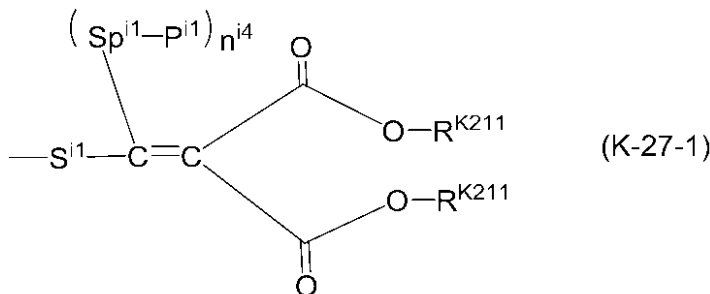
## 【 0 1 8 1】

(式中、 $S^{i1}$  は一般式 (K - 26) 中の  $S^{i1}$  と同じ意味を表し、 $R^{K211}$  は炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。)

一般式 (K - 27) は、以下の一般式 (K - 27 - 1) を表すことが好ましい。

## 【 0 1 8 2】

## 【化 5 4】



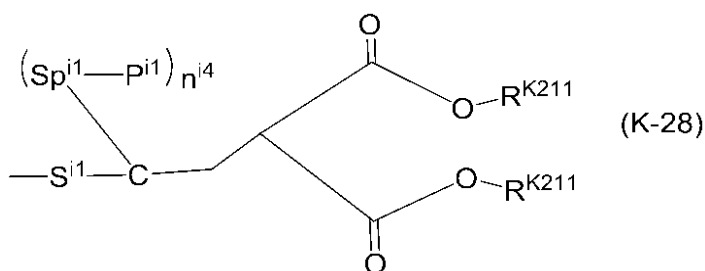
## 【 0 1 8 3】

(式中、 $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $Sp^{i1}$  及び  $n^{i4}$  は一般式 (K - 27) 中の  $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $Sp^{i1}$  及び  $n^{i4}$  とそれぞれ同じ意味を表し、 $R^{K211}$  は炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。)

一般式 (K - 28) は、以下の一般式 (K - 28 - 1) を表すことが好ましい。

## 【 0 1 8 4】

## 【化 5 5】



## 【 0 1 8 5】

(式中、 $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $Sp^{i1}$  及び  $n^{i4}$  は一般式 (K - 28) 中の  $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $Sp^{i1}$  及び  $n^{i4}$  とそれぞれ同じ意味を表し、 $R^{K211}$  は炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。)

なお、 $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  の好ましい基は、一般式 (K-24) 中の  $S^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  と同様である。

【0186】

式 (i) 中、 $Z^{i1}$  及び  $Z^{i1}$  は、好ましくは、単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OOCOCH=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、炭素原子数 1 ~ 40 の直鎖状又は分岐状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の  $-CH_2-$  が  $-O-$  で置換された基を表し、より好ましくは、単結合、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCCH=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖状又は分岐状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の  $-CH_2-$  が  $-O-$  で置換された基を表し、より好ましくは、単結合、炭素原子数 2 ~ 15 の直鎖状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の  $-CH_2-$  が  $-O-$  で置換された基を表し、更に好ましくは、単結合、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、又は炭素原子数 2 のアルキレン基 (エチレン基 ( $-CH_2CH_2-$ )) 若しくはエチレン基中の  $-CH_2-$  の 1 個が  $-O-$  で置換された基 ( $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ )、若しくはエチレン基中の  $-CH_2-$  の 1 個が  $-COO-$ 、 $-OCO-$  で置換された基 ( $-CH-CHCOO-$ 、 $-OCOCCH-CH-$ ) である。

【0187】

$R^{i1}$  は、好ましくは炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基、又はハロゲン化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は、酸素原子が直接隣接しないように  $-O-$ 、置換されることが良く、より好ましくは、炭素原子数 3 ~ 18 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は、酸素原子が直接隣接しないように  $-O-$  で置換されても良い。液晶化合物の配向性を向上させる観点から、 $R^{i1}$  の炭素原子数は 3 以上が好ましく、4 以上が好ましく、5 以上が好ましい。

【0188】

$A^{i1}$  は、2 価の 6 員環芳香族基、2 価の 6 員環複素芳香族基、2 価の 6 員環脂肪族基、又は 2 価の 6 員環複素脂肪族基、2 価の 5 員環芳香族基、2 価の 5 員環複素芳香族基、2 価の 5 員環脂肪族基、又は 2 価の 5 員環複素脂肪族基が好ましく、具体的には、1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキシレン基、アントラセン - 2, 6 - ジイル基、フェナントレン - 2, 7 - ジイル基、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、シクロペンタン - 1, 3 - 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 - ジイル基及び 1, 3 - ジオキサセン - 2, 5 - ジイル基から選択される環構造を表すことが好ましく、該環構造は無置換であるか又は  $L^{i1}$  で置換されていることが好ましい。 $L^{i1}$  は炭素原子数 1 ~ 12 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 12 のハロゲン化アルキル基、炭素原子数 1 ~ 12 のアルコキシ基、炭素原子数 1 ~ 12 のハロゲン化アルコキシ基、ハロゲン原子、シアノ基又はニトロ基を表すことが好ましい。 $A^{i1}$  は好ましくは、2 価の 6 員環芳香族基又は 2 価の 6 員環脂肪族基を表すが、2 価の無置換の 6 員環芳香族基、2 価の無置換の 6 員環脂肪族基、又はこれらの環構造中の水素原子が炭素原子数 1 ~ 6 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 6 のアルコキシ基又はハロゲン原子で置換された基であることが好ましく、2 価の無置換の 6 員環芳香族基若しくはこの環構造中の水素原子がフッ素原子で置換された基、又は 2 価の無置換の 6 員環脂肪族基が好ましく、置換基上の水素原子がハロゲン原子、アルキル基又はアルコキシ基によって置換されていても良い 1, 4 - フェニレン基、2, 6 - ナフタレン基又は 1, 4 - シクロヘキシル基がより好ましい。

【0189】

$A^{i2}$  及び  $A^{i3}$  はそれぞれ独立して、2 価の 6 員環芳香族基、2 価の 6 員環複素芳香

族基、2価の6員環脂肪族基、又は2価の6員環複素脂肪族基、2価の5員環芳香族基、2価の5員環複素芳香族基、2価の5員環脂肪族基、又は2価の5員環複素脂肪族基が好ましく、具体的には、1,4-フェニレン基、1,4-シクロヘキシレン基、アントラセン-2,6-ジイル基、フェナントレン-2,7-ジイル基、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、シクロペンタン-1,3-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-ジイル基及び1,3-ジオキサン-2,5-ジイル基から選択される環構造を表すことが好ましく、該環構造は無置換であるか、又は $L^{i1}$ 、 $P^{i1}-Sp^{i1}$ 、若しくは $K^{i1}$ で置換されていることが好ましい。また、 $A^{i3}$ は1,3-フェニレン基、1,3-シクロヘキシレン基、ナフタレン2,5-ジイル基から選択される環構造を表すことも好ましい。

10

#### 【0190】

$L^{i1}$ の好ましい基は、 $A^{i1}$ 中の $L^{i1}$ と同様である。 $A^{i2}$ 及び $A^{i3}$ は好ましくは、2価の6員環芳香族基又は2価の6員環脂肪族基を表すが、2価の無置換の6員環芳香族基、2価の無置換の6員環脂肪族基、又はこれらの環構造中の水素原子が炭素原子数1~6のアルキル基、炭素原子数1~6のアルコキシ基、ハロゲン原子又は $P-Sp$ -で置換された基であることが好ましく、2価の無置換の6員環芳香族基若しくはこの環構造中の水素原子がフッ素原子で置換された基、又は2価の無置換の6員環脂肪族基が好ましく、置換基上の水素原子がハロゲン原子、アルキル基又はアルコキシ基、 $P-Sp$ -によって置換されていても良い1,4-フェニレン基、2,6-ナフタレン基又は1,4-シクロヘキシル基がより好ましい。また、 $A^{i3}$ は $K^{i1}$ で置換されていることも好ましい。

20

#### 【0191】

ここで、一般式(i)は、 $A^{i2}$ 又は $A^{i3}$ の置換基として、或いは、 $K^{i1}$ の置換基として、少なくとも1つ以上の $P^{i1}-Sp^{i1}$ -を有するが、信頼性をより向上させる観点から、一般式(i)中の重合性基の数は2以上が好ましく、3以上が好ましい。信頼性を重視する場合は、 $A^{i2}$ 又は $A^{i3}$ 部に重合基を導入することで容易に多官能化が図れ、強固なポリマーを構築することができる。 $A^{i2}$ 又は $A^{i3}$ 中の $P^{i1}-Sp^{i1}$ -の置換される位置は、 $K^{i1}$ の近傍が好ましく、 $A^{i3}$ が $P^{i1}-Sp^{i1}$ -で置換されていることがより好ましい。

30

#### 【0192】

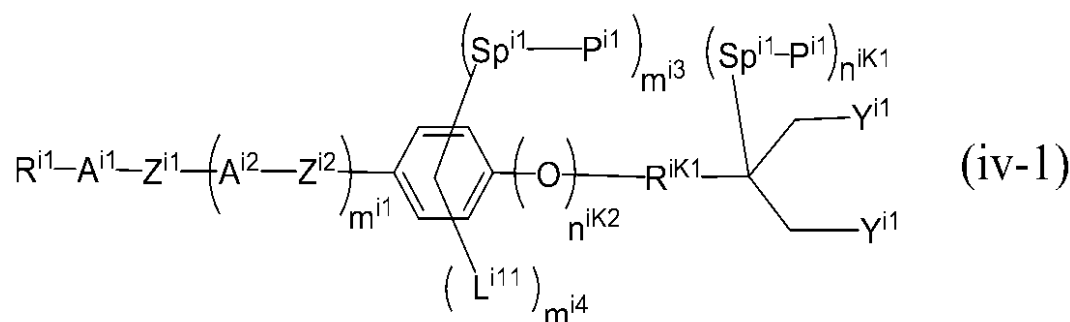
$m^{i1}$ は、好ましくは0~3の整数を表し、更に好ましくは0~1の整数を表す。

#### 【0193】

一般式(iv)で表される化合物は、以下の一般式(iv-1)で表される化合物であることが好ましい。

#### 【0194】

#### 【化56】



40

#### 【0195】

(式中、 $R^{i1}$ 、 $A^{i1}$ 、 $A^{i2}$ 、 $Z^{i1}$ 、 $Z^{i2}$ 、 $m^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 及び $Sp^{i1}$ はそれぞれ独立して一般式(iv)中の $R^{i1}$ 、 $A^{i1}$ 、 $A^{i2}$ 、 $Z^{i1}$ 、 $Z^{i2}$ 、 $m^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 及び $Sp^{i1}$ と同じ意味を表し、 $Y^{i1}$ はそれぞれ独立して一般式(K-24)中の

50

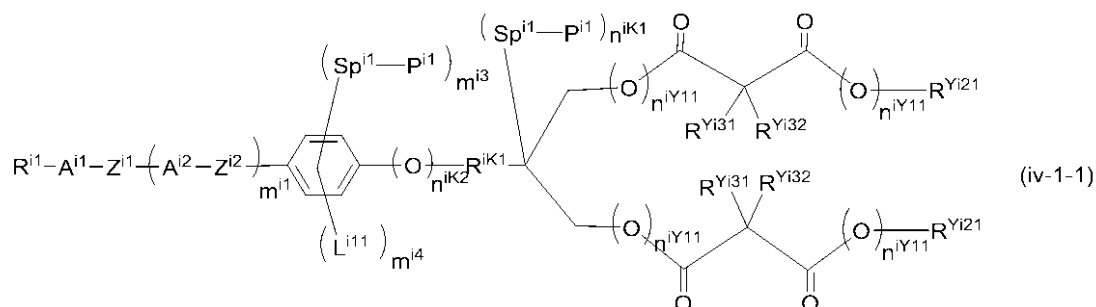


$Y^{i1}$ と同じ意味を表し、 $R^{iK1}$ 、 $n^{iK1}$ 、 $n^{iK2}$ はそれぞれ独立して一般式(K-24-1)中の $R^{iK1}$ 、 $n^{iK1}$ 、 $n^{iK2}$ と同じ意味を表し、 $L^{i11}$ は炭素原子数1~3のアルキル基を表し、 $m^{i3}$ は0~3の整数を表し、 $m^{i4}$ は0~3の整数を表すが、 $m^{i3} + m^{i4}$ は0~4を表す。)

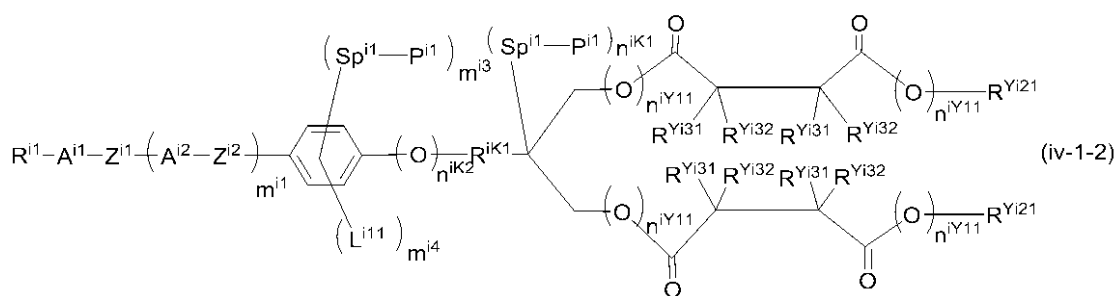
一般式(iv-1)で表される化合物は、以下の一般式(iv-1-1)、(iv-1-2)、(iv-1-3a)、(iv-1-3b)、(iv-1-4)、(iv-1-Y2)、(iv-1-Y3)及び(iv-1-Y4)であることが好ましい。

【0196】

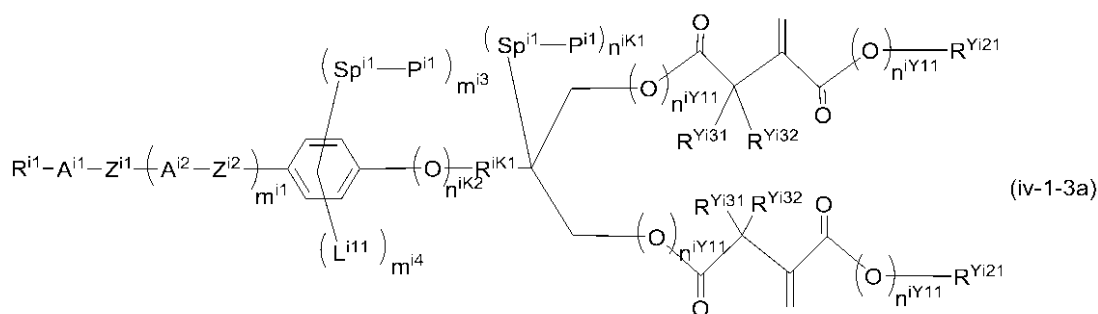
【化57】



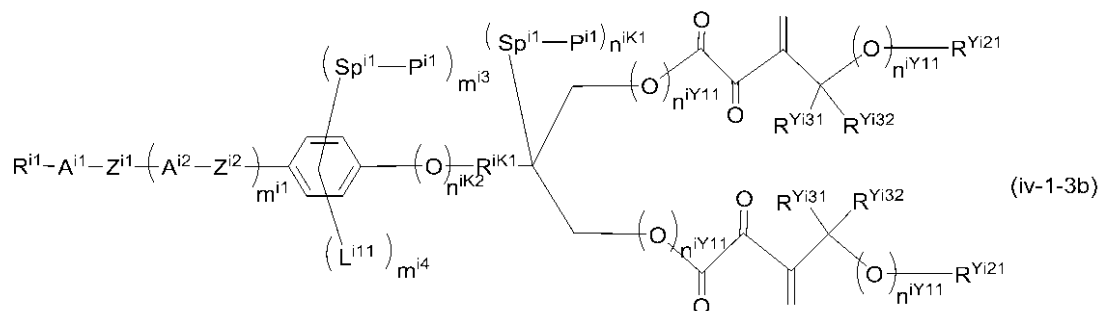
10



20



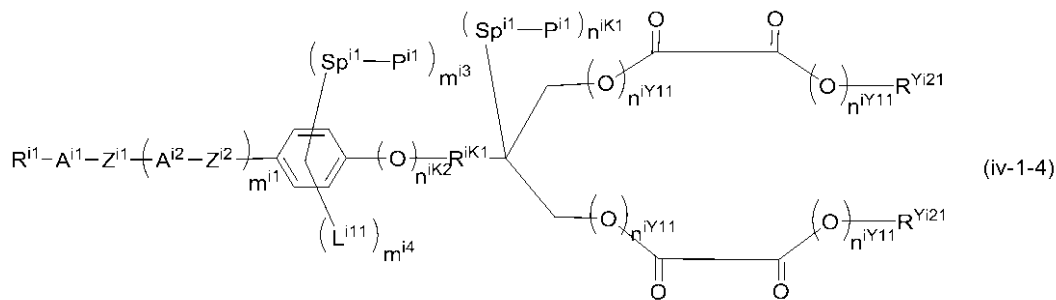
30



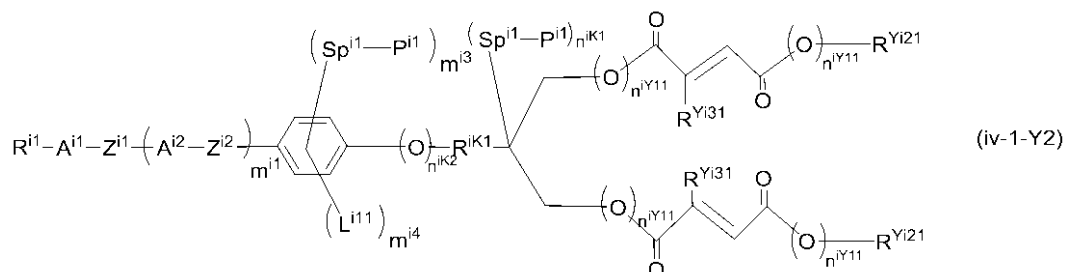
40

【0197】

## 【化 5 8】



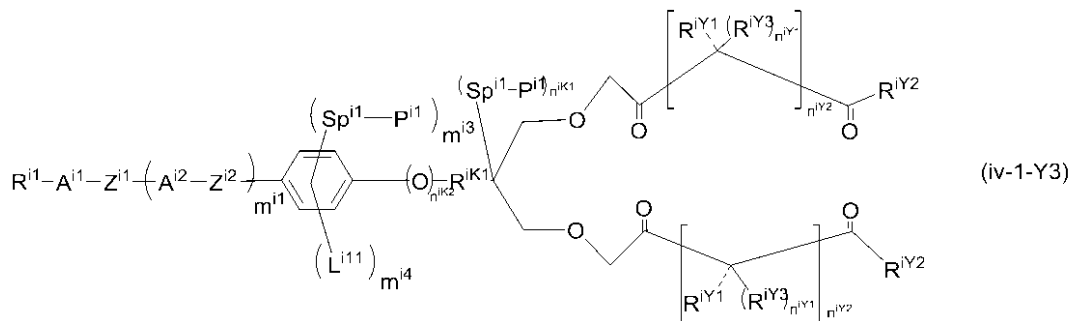
10



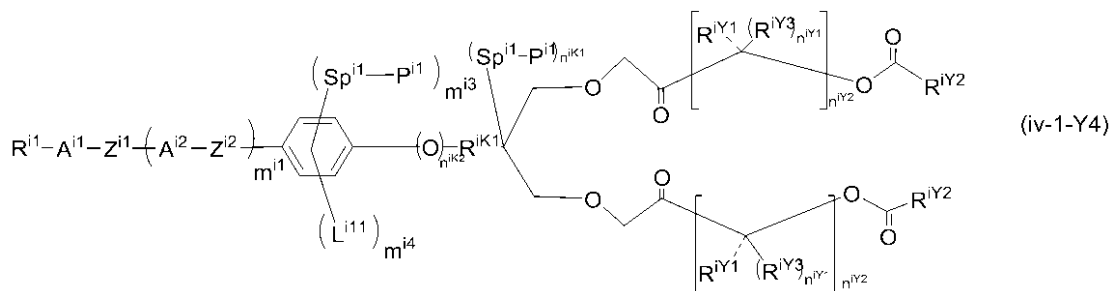
## 【 0 1 9 8】

## 【化 5 9】

20



30



## 【 0 1 9 9】

(式中、 $R^{i1}$ 、 $A^{i1}$ 、 $A^{i2}$ 、 $Z^{i1}$ 、 $Z^{i2}$ 、 $m^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  はそれぞれ独立して一般式 (iv) 中の  $R^{i1}$ 、 $A^{i1}$ 、 $A^{i2}$ 、 $Z^{i1}$ 、 $Z^{i2}$ 、 $m^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  と同じ意味を表し、 $R^{iK1}$ 、 $R^{iY21}$ 、 $R^{i3Y1}$ 、 $R^{i3Y2}$ 、 $n^{iK1}$ 、 $n^{iK2}$ 、 $n^{iY11}$  はそれぞれ独立して一般式 (K-24-1) ~ (K-24-3) 中の  $R^{iK1}$ 、 $R^{iY21}$ 、 $R^{i31}$ 、 $R^{i32}$ 、 $n^{iK1}$ 、 $n^{iK2}$ 、 $n^{iY11}$  と同じ意味を表し、 $L^{i11}$  は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基を表し、 $m^{i3}$  は 0 ~ 3 の整数を表し、 $m^{i4}$  は 0 ~ 3 の整数を表すが、 $m^{i3} + m^{i4}$  は 0 ~ 4 を表す。)

40

なお、一般式 (iv-1) 及び一般式 (iv-1-1)、(iv-1-2)、(iv-1-3) 中の各符号の好ましい基は、上記一般式 (i)、一般式 (K-1) 及び一般式 (K-1-1) ~ (K-1-3) 中の好ましい基と同様である。

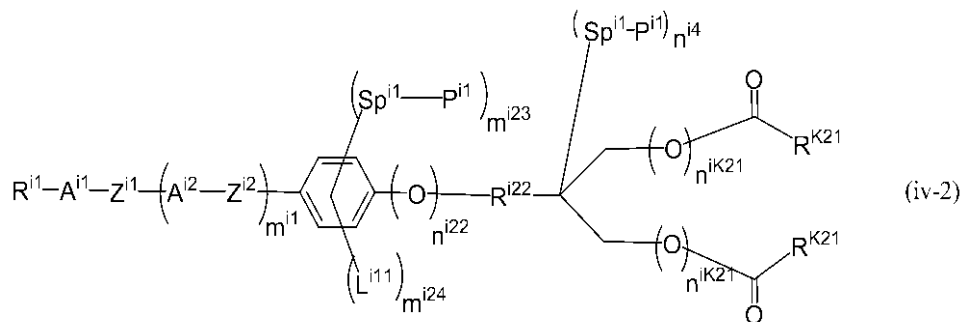
## 【 0 2 0 0】

50

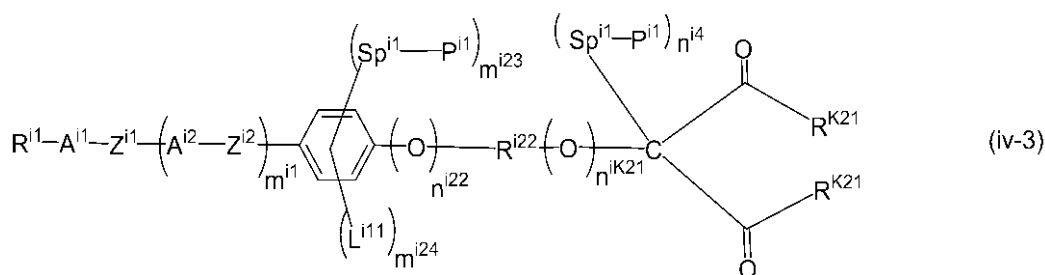
また、一般式 (iv) で表される化合物は、以下の一般式 (iv-2) ~ (iv-5) で表される化合物であることが好ましい。

【0201】

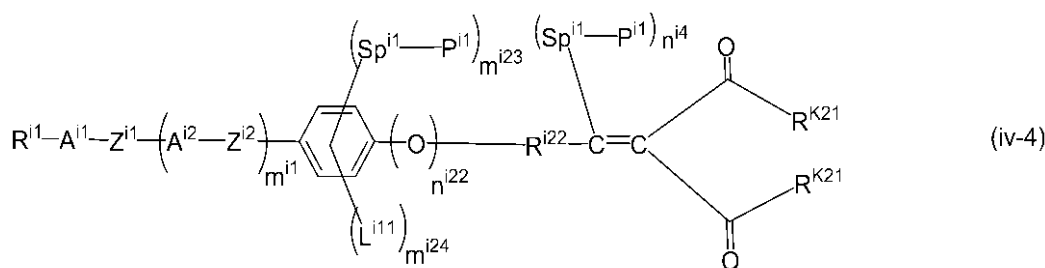
【化60】



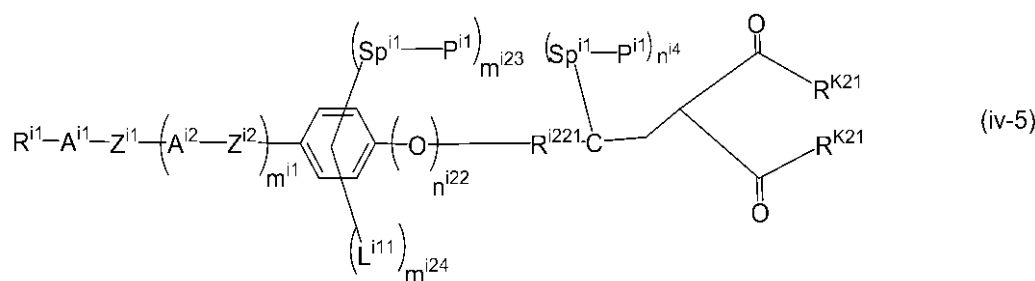
10



20



30



【0202】

(式中、 $R^{i1}$ 、 $A^{i1}$ 、 $A^{i2}$ 、 $Z^{i1}$ 、 $Z^{i2}$ 、 $m^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  はそれぞれ独立して一般式 (iv) 中の  $R^{i1}$ 、 $A^{i1}$ 、 $A^{i2}$ 、 $Z^{i1}$ 、 $Z^{i2}$ 、 $m^{i1}$ 、 $P^{i1}$  及び  $Sp^{i1}$  と同じ意味を表し、 $n^{i4}$ 、 $n^{iK21}$ 、 $R^{K21}$  はそれぞれ独立して一般式 (K-24) 中の  $n^{i4}$ 、 $n^{iK21}$ 、 $R^{K21}$  と同じ意味を表し、 $R^{i22}$  は炭素原子数 1 ~ 6 のアルキレン基又は単結合を表し、該アルキレン基中の  $-CH_2-$  は酸素原子が直接隣接しないように  $-CH=CH-$ 、 $-C=C-$  又は  $-O-$  で置換されてもよく、 $L^{i11}$  は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基を表し、 $n^{i22}$  は 0 又は 1 を表し、 $m^{i23}$  は 0 ~ 3 の整数を表し、 $m^{i24}$  は 0 ~ 3 の整数を表すが、 $m^{i23} + m^{i24}$  は 0 ~ 4 を表す。)

40

$R^{i22}$  は炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖のアルキレン基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 の直

50

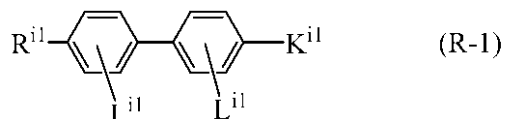
鎖のアルキレン基が好ましい。なお、 $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$ 、 $Sp^{i1}$  及び  $P^{i1}$  の好ましい基は一般式 (Y - 1 - 1) ~ (Y - 1 - 3)、一般式 (i) 中の  $R^{iY21}$ 、 $R^{iY31}$ 、 $R^{iY32}$ 、 $Sp^{i1}$ 、 $P^{i1}$  と同様である。なお、一般式 (iv 2) 中の各符号の好ましい基は、上記一般式 (iv)、一般式 (K - 24) 中の好ましい基と同様である。

【0203】

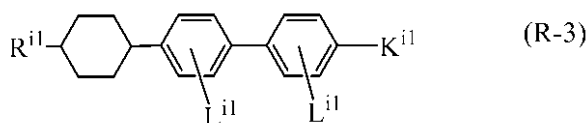
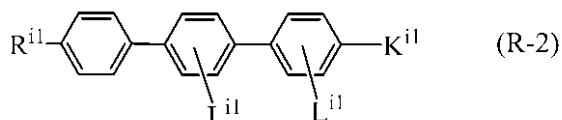
一般式 (iv) は、以下の一般式 (R - 1) ~ (R - 6) を表すことが好ましい。

【0204】

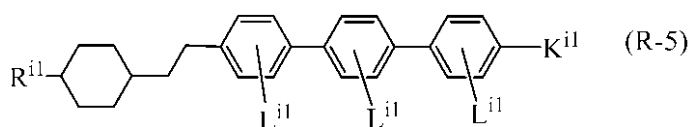
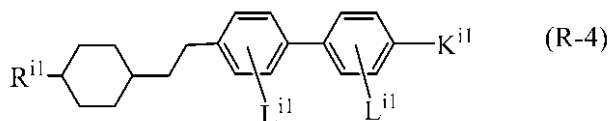
【化61】



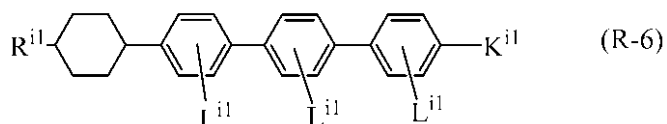
10



20



30



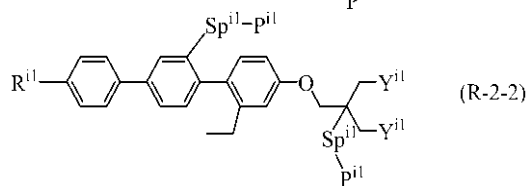
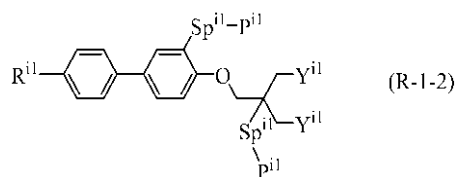
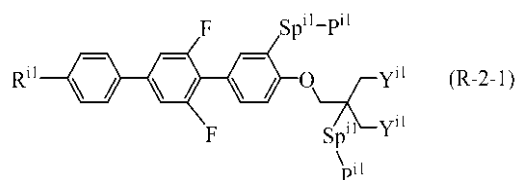
【0205】

(式中、 $R^{i1}$ 、 $K^{i1}$  及び  $L^{i1}$  は一般式 (iv) 中の  $R^{i1}$ 、 $K^{i1}$  及び  $L^{i1}$  とそれぞれ同じ意味を表す。)

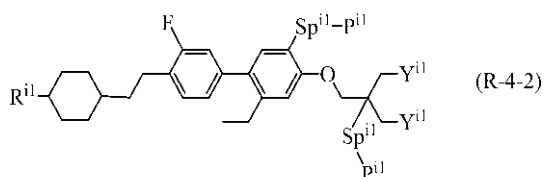
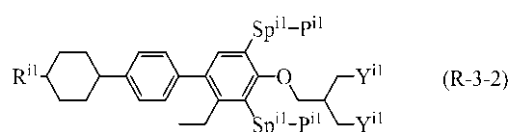
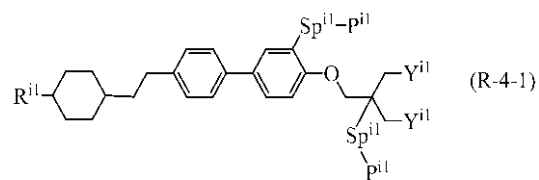
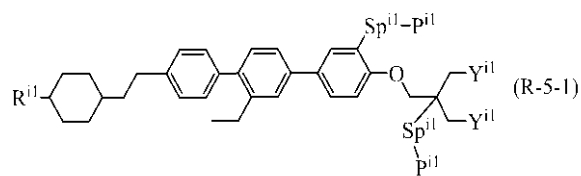
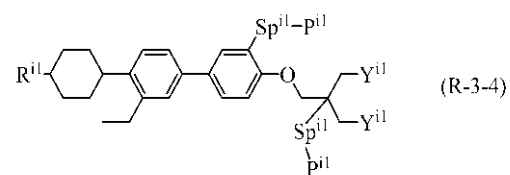
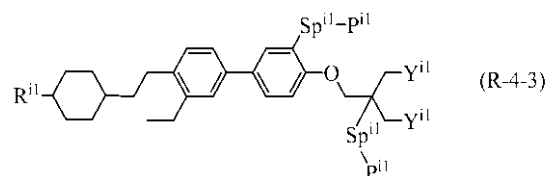
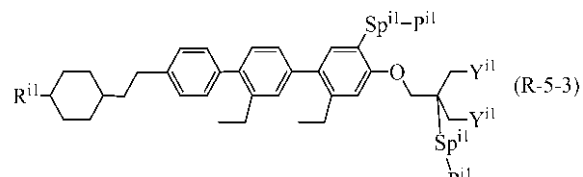
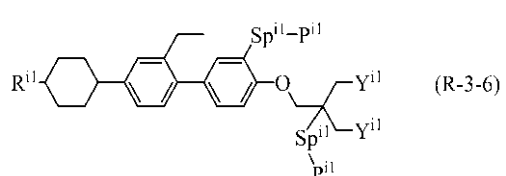
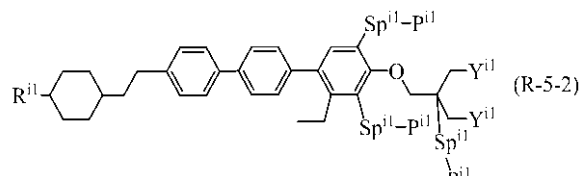
40

一般式 (iv) のより具体的な例としては、下記式 (R - 1 - 1) ~ (R - 6 - 7) に表すがこれに限られたものではない。

【0206】

$$\text{R}^{\text{I}1}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_6\text{H}_3(\text{Sp}^{\text{I}1}-\text{pi}^{\text{I}1})-\text{O}-\text{CH}_2-\text{C}(\text{Sp}^{\text{I}1}-\text{pi}^{\text{I}1})_2\text{Y}^{\text{I}1} \quad (\text{R-1-1})$$


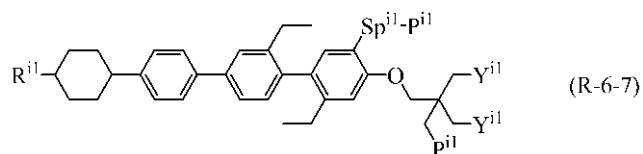
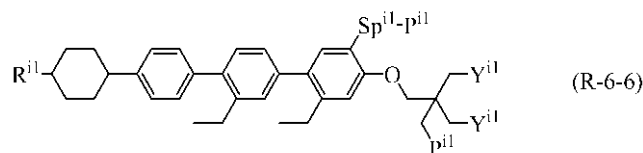
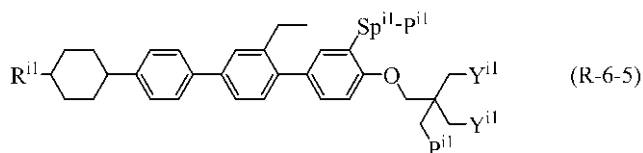
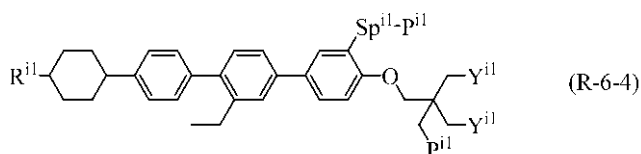
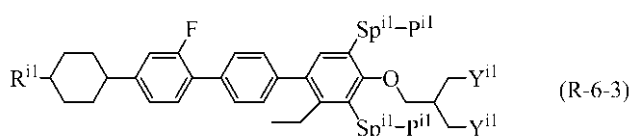
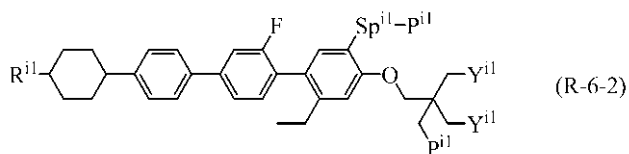
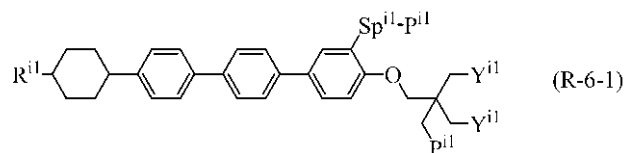
【 0 2 0 7 】

$$\text{R}^{\text{I1}}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_6\text{H}_3(\text{Sp}^{\text{I1}}-\text{P}^{\text{I1}})-\text{O}-\text{C}(\text{Sp}^{\text{I1}}-\text{P}^{\text{I1}})(\text{Y}^{\text{I1}})_2 \quad (\text{R-3-1})$$

$$\text{R}^{\text{il}}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_6\text{H}_2(\text{F})(\text{Et})_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{Y}^{\text{il}})_2 \quad (\text{R}-3)$$

$$\text{R}^{\text{j}1}\text{-C}_6\text{H}_4\text{-C}_6\text{H}_3(\text{Et})_2\text{-O-C(CH}_3)_2\text{-Y}^{\text{i}1} \quad (\text{R-3-5})$$

$$\text{R}^{\text{il}}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_6\text{H}_4-\text{O}-\text{C}(\text{Sp}^{\text{il}}-\text{p}^{\text{il}})(\text{Y}^{\text{il}})_2 \quad (\text{R-3-7})$$

【 0 2 0 8 】

【 0 2 0 8 】

## 【化 6 4】



## 【 0 2 0 9 】

(式中、 $R^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $S^{i1}$ 及び $Y^{i1}$ はそれぞれ独立して一般式(i v)及び一般式(K-1)中の $R^{i1}$ 、 $P^{i1}$ 、 $S^{i1}$ 及び $Y^{i1}$ と同じ意味を表す。)

本発明の液晶組成物における自発配向性モノマーの含有量の下限は、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、0.12質量%が好ましく、0.15質量%が好ましく、0.17質量%が好ましく、0.2質量%が好ましく、0.22質量%が好ましく、0.25質量%が好ましく、0.27質量%が好ましく、0.3質量%が好ましく、0.32質量%が好ましく、0.35質量%が好ましく、0.37質量%が好ましく、0.4質量%が好ましく、0.42質量%が好ましく、0.45質量%が好ましく、0.5質量%が好ましく、0.55質量%が好ましい。本発明の液晶組成物における一般式(I)で表される重合性化合物の含有量の上限は、2.5質量%が好ましく、2.3質量%が好ましく、2.1質量%が好ましく、2質量%が好ましく、1.8質量%が好ましく、1.6質量%が好ましく、1.5質量%が好ましく、1質量%が好ま

10

20

30

40

50

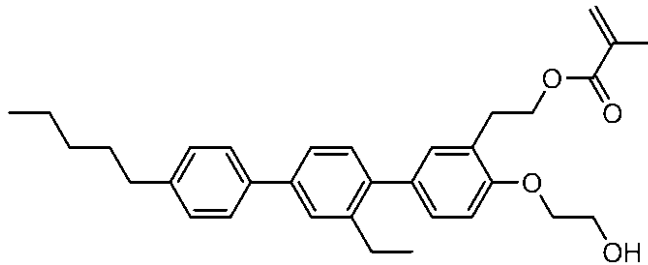
しく、0.95質量%が好ましく、0.9質量%が好ましく、0.85質量%が好ましく、0.8質量%が好ましく、0.75質量%が好ましく、0.7質量%が好ましく、0.65質量%が好ましく、0.6質量%が好ましく、0.55質量%が好ましく、0.5質量%が好ましく、0.45質量%が好ましく、0.4質量%が好ましい。

【0210】

具体的には、好ましい自発配向性モノマーとして、以下の化合物が挙げられる。

【0211】

【化65】

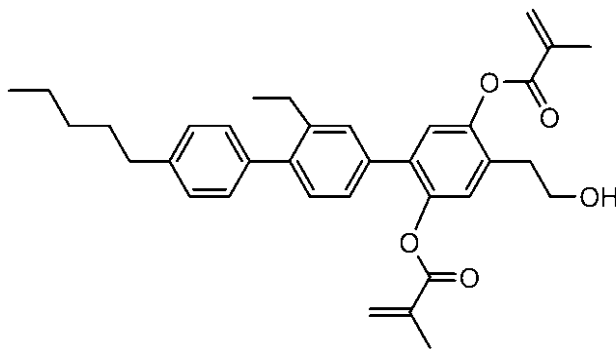


(P-K-1)

10

【0212】

【化66】

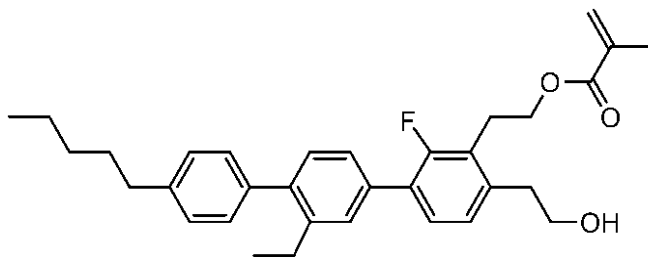


(P-K-2)

20

【0213】

【化67】

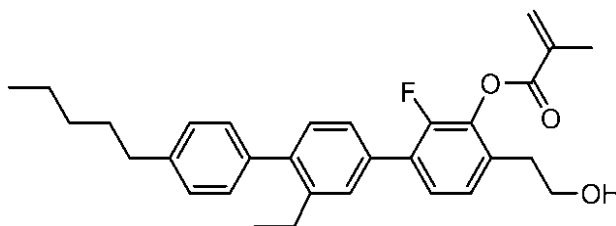


(P-K-3)

30

【0214】

【化68】

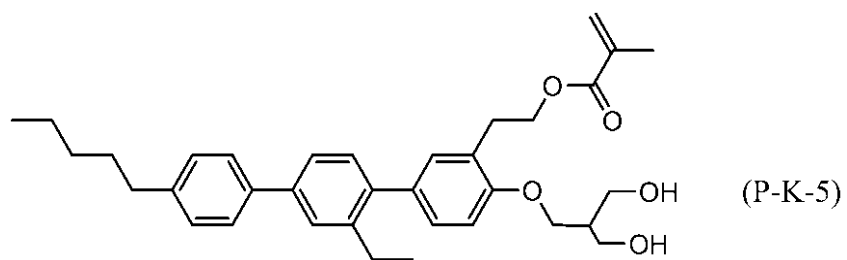


(P-K-4)

40

【0215】

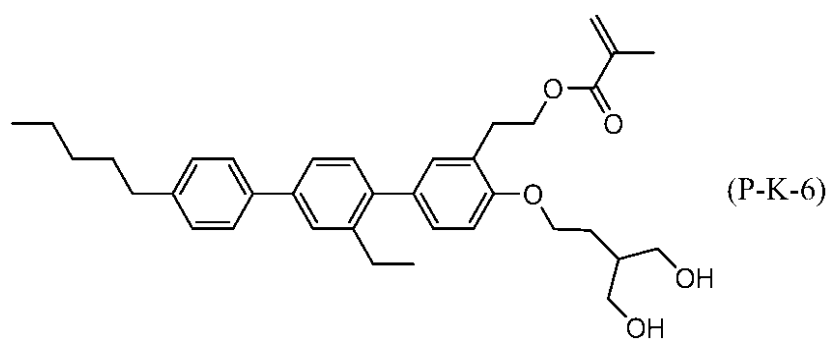
【化 6 9】



【 0 2 1 6】

【化 7 0】

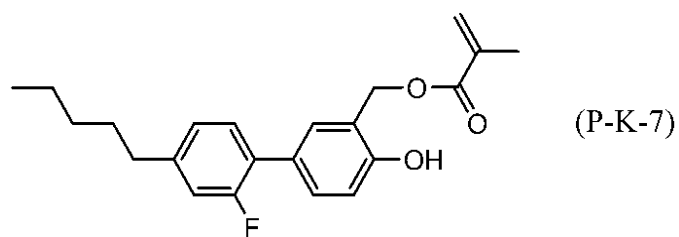
10



【 0 2 1 7】

【化 7 1】

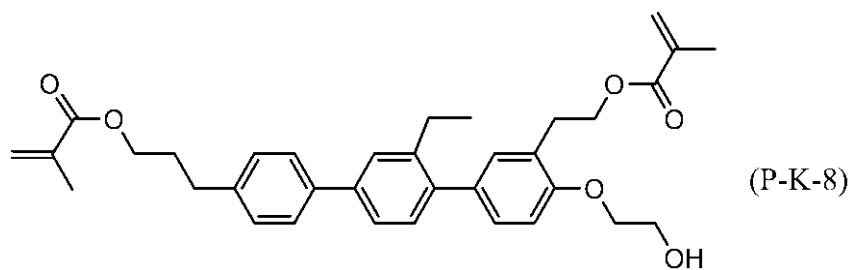
20



【 0 2 1 8】

【化 7 2】

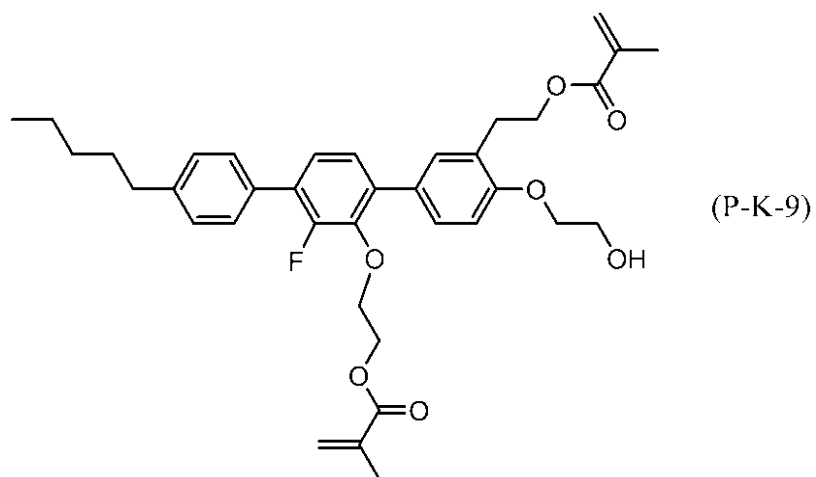
30



【 0 2 1 9】



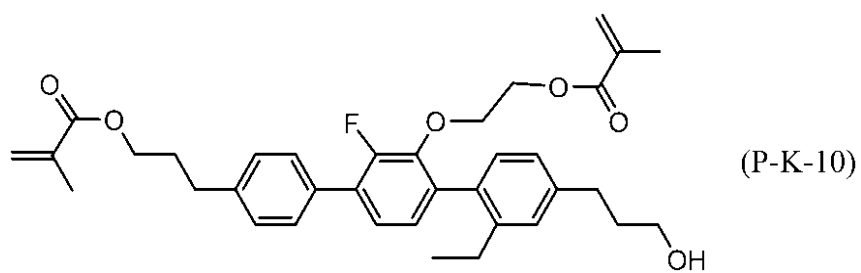
【化 7 3】



10

【 0 2 2 0】

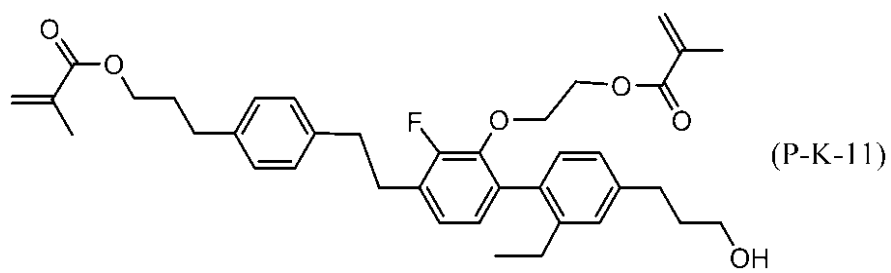
【化 7 4】



20

【 0 2 2 1】

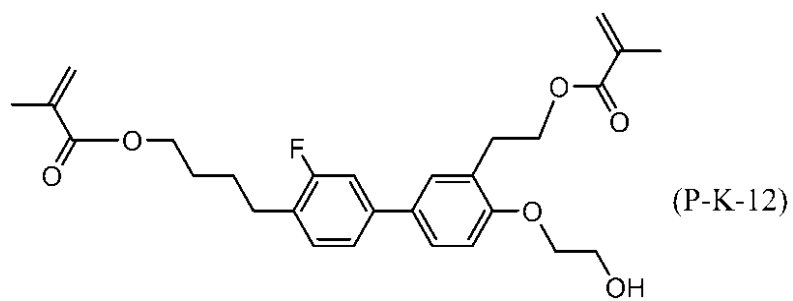
【化 7 5】



30

【 0 2 2 2】

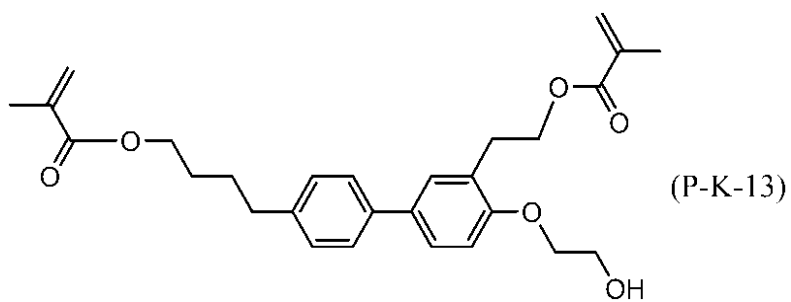
【化 7 6】



40

【 0 2 2 3】

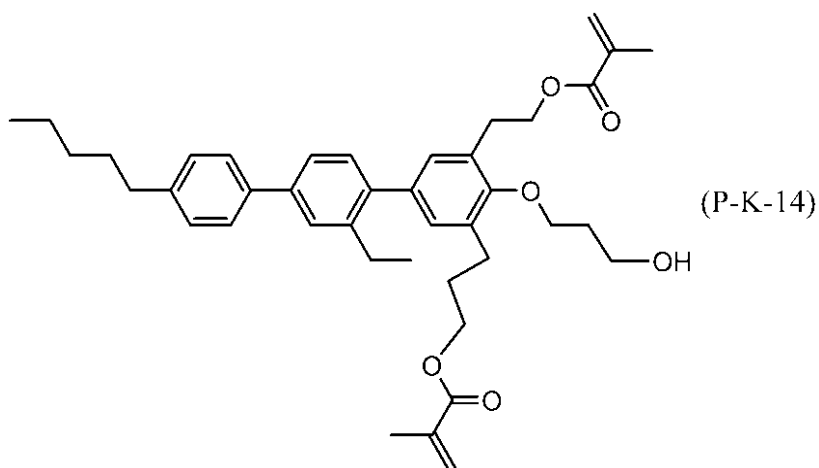
【化 7 7】



【 0 2 2 4】

10

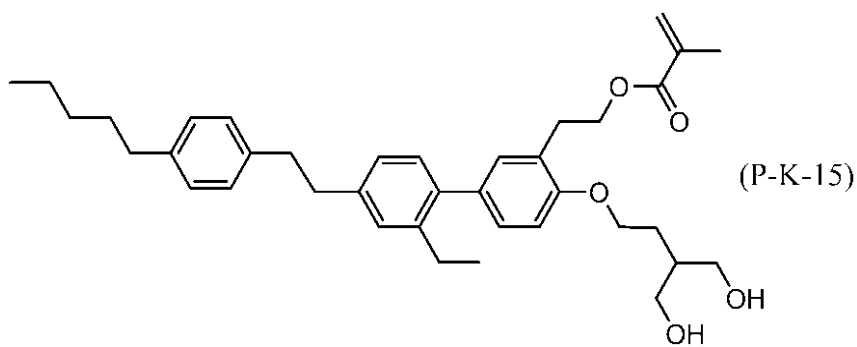
【化 7 8】



20

【 0 2 2 5】

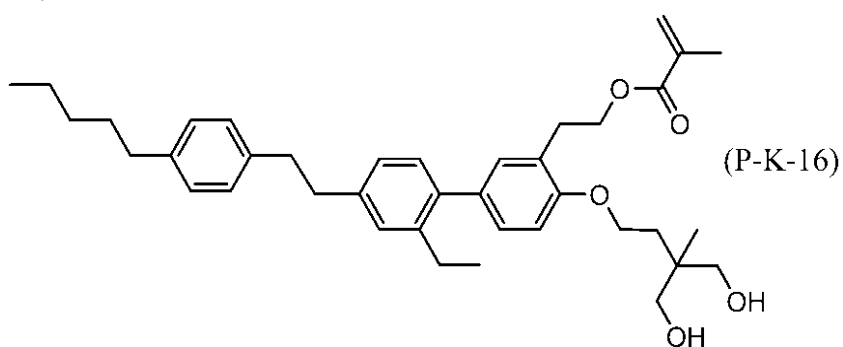
【化 7 9】



30

【 0 2 2 6】

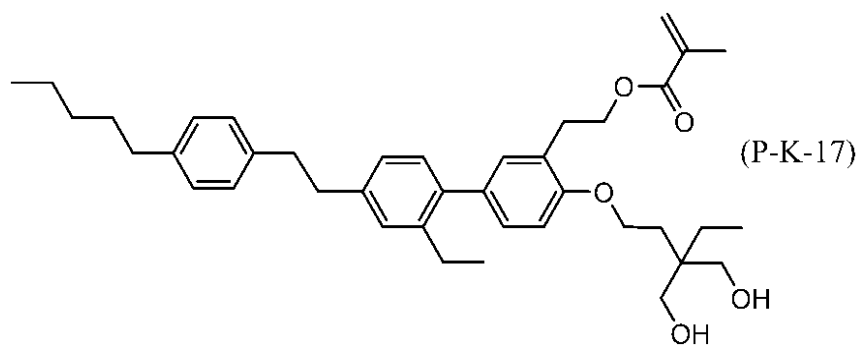
【化 8 0】



40

【 0 2 2 7】

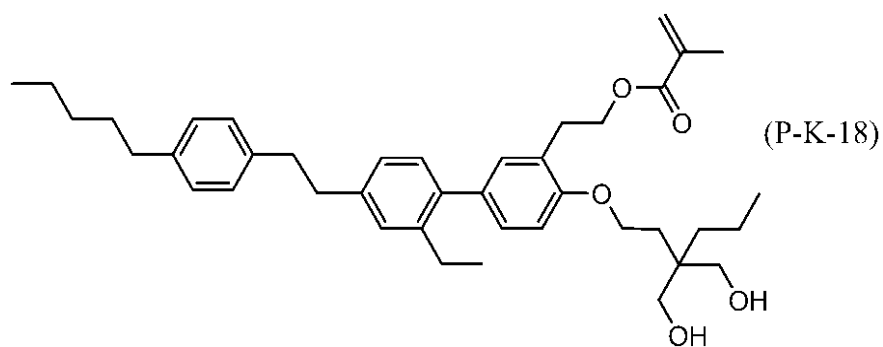
【化 8 1】



10

【 0 2 2 8 】

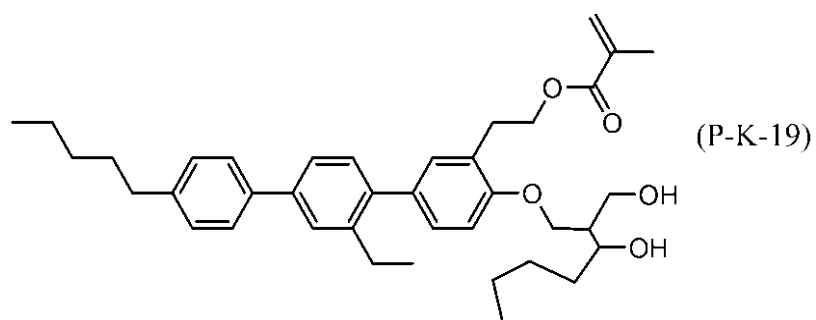
【化 8 2】



20

【 0 2 2 9 】

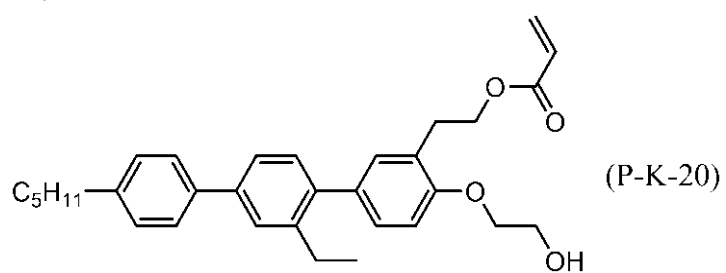
【化 8 3】



30

【 0 2 3 0 】

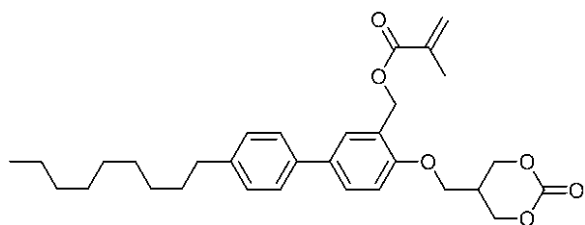
【化 8 4】



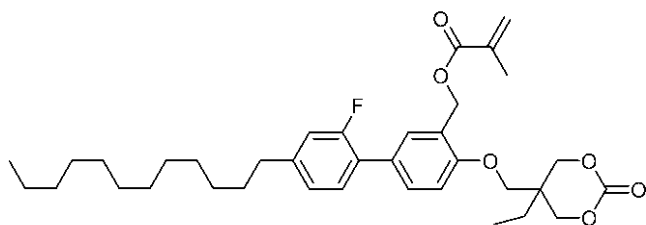
40

【 0 2 3 1 】

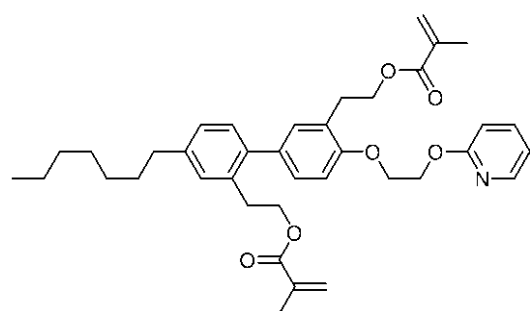
【化 8 5】



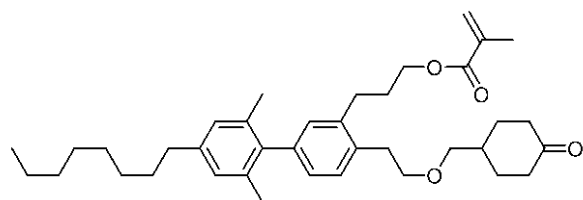
(P-1-1)



(P-1-2)



(P-1-3)



(P-1-4)

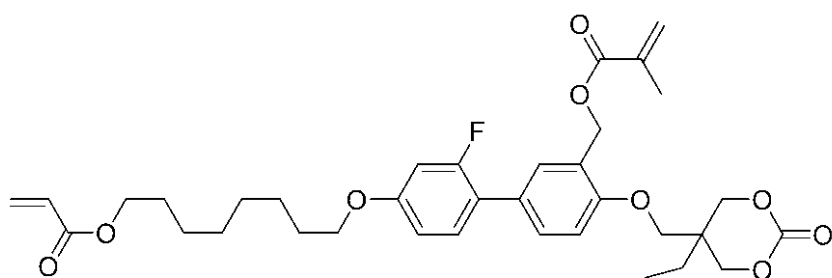
【 0 2 3 2 】

10

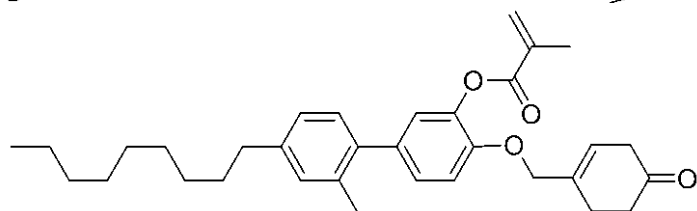
20

30

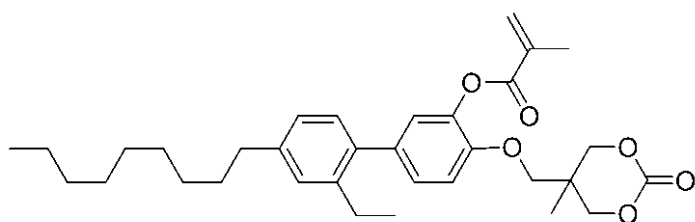
【化 8 6】



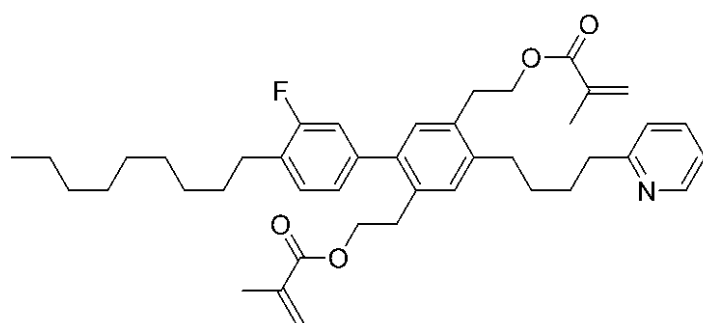
(P-1-5)



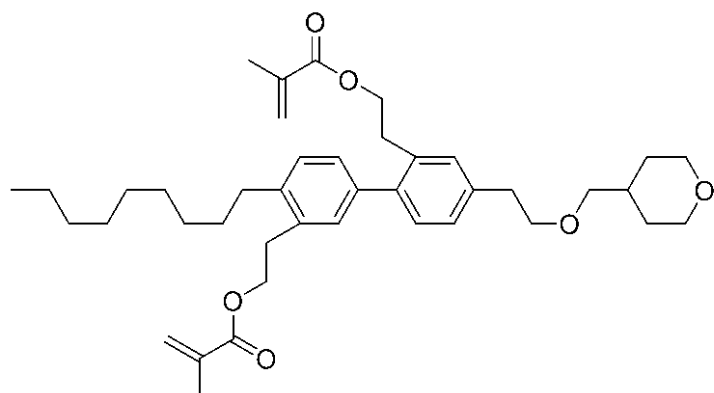
(P-1-6)



(P-1-7)



(P-1-8)



(P-1-9)

【 0 2 3 3 】

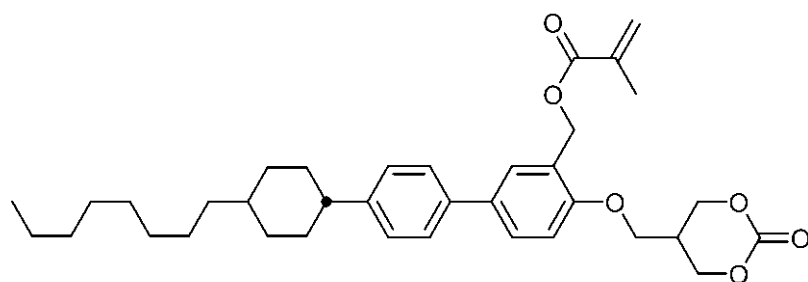
10

20

30

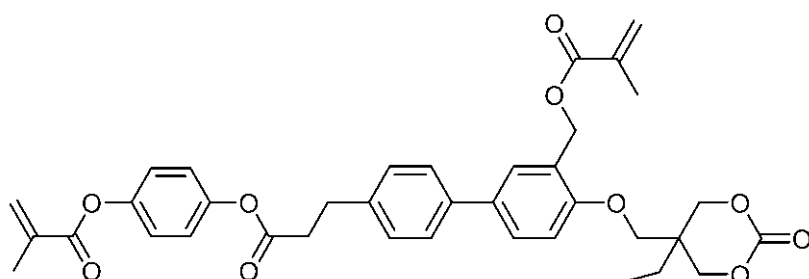
40

【化 8 7】



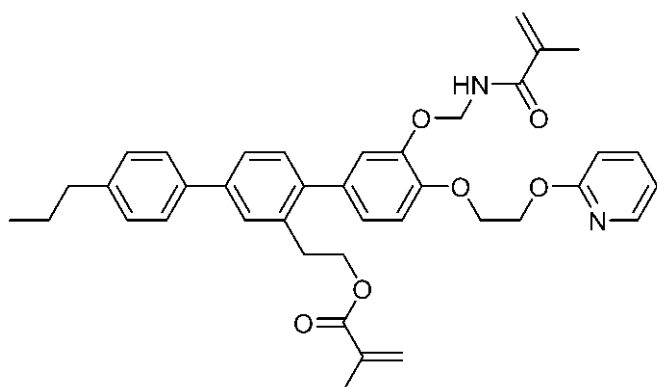
(P-1-10)

10



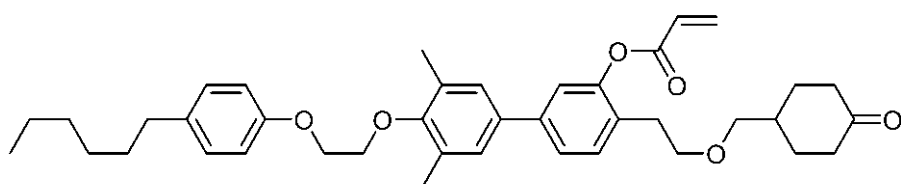
(P-1-11)

20



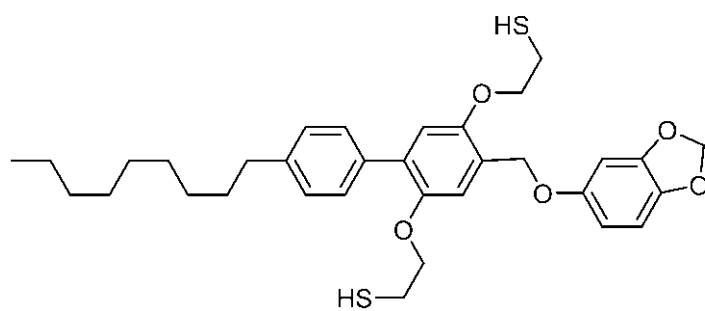
(P-1-12)

30



(P-1-13)

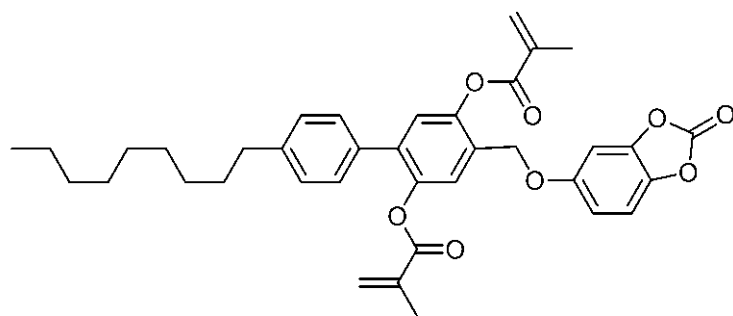
40



(P-1-14)

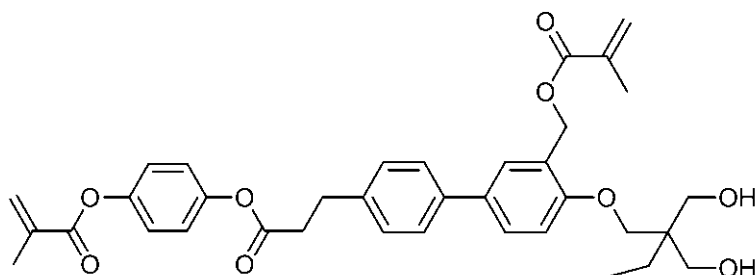
【 0 2 3 4】

【化 8 8】



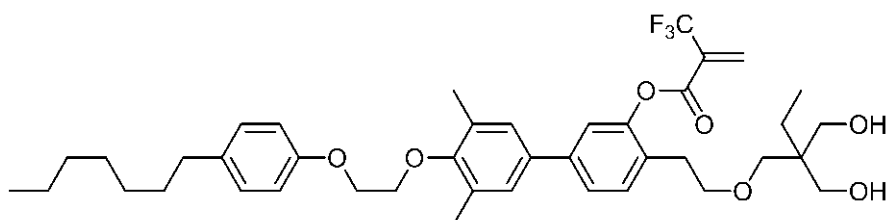
(P-1-15)

10



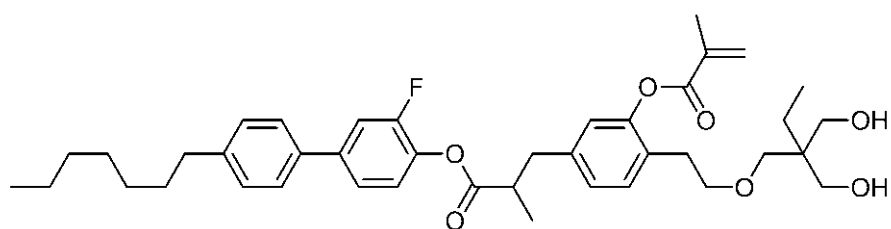
(P-1-16)

20



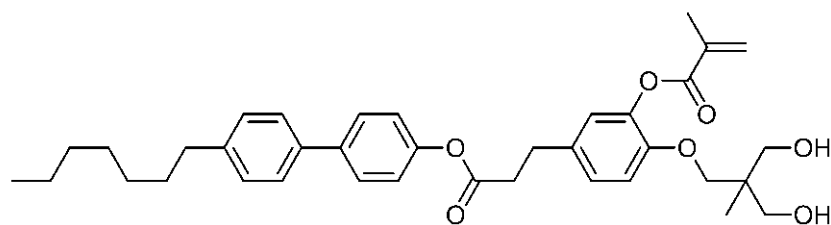
(P-1-17)

30



(P-1-18)

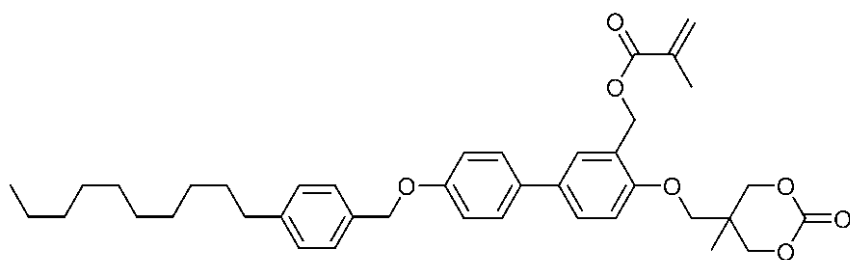
40



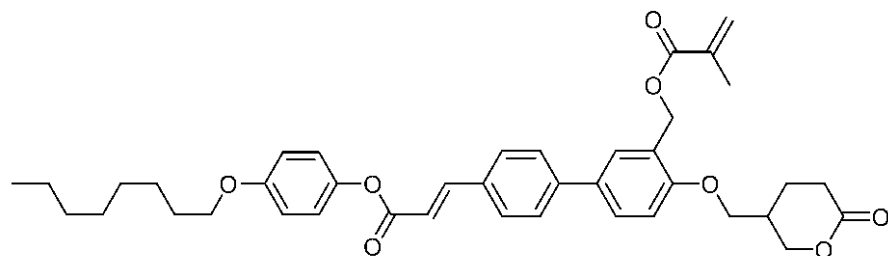
(P-1-19)

【 0 2 3 5】

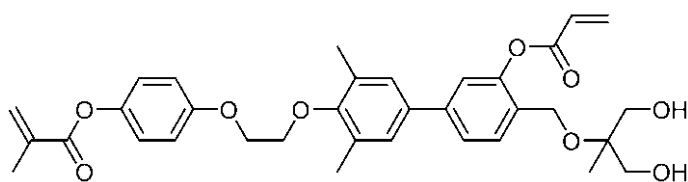
【化 8 9】



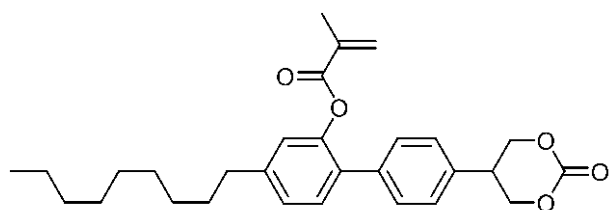
(P-1-20)



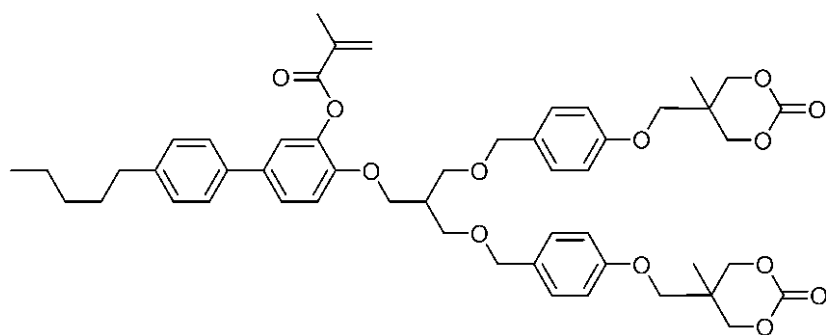
(P-1-21)



(P-1-22)



(P-1-23)

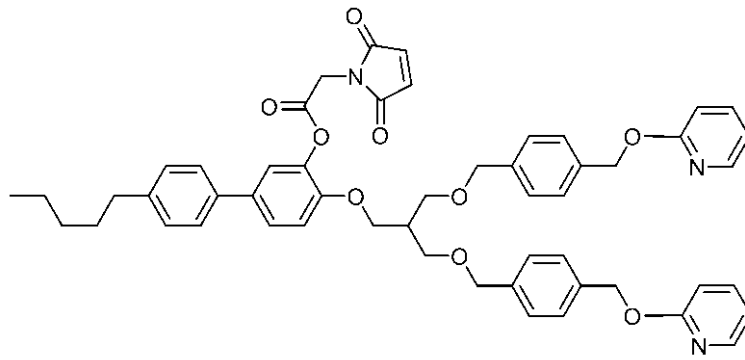


(P-1-24)

【 0 2 3 6 】

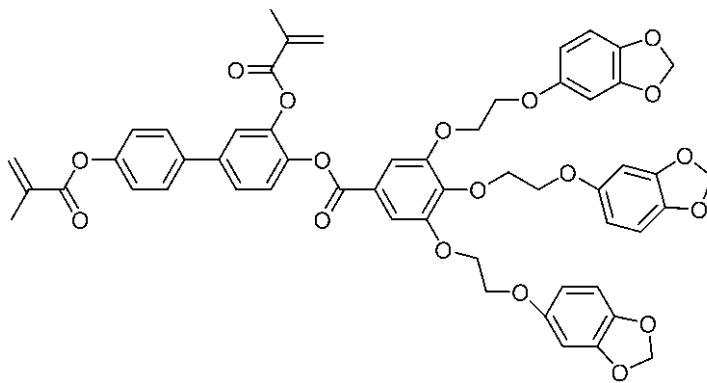


【化 9 0】



(P-1-25)

10

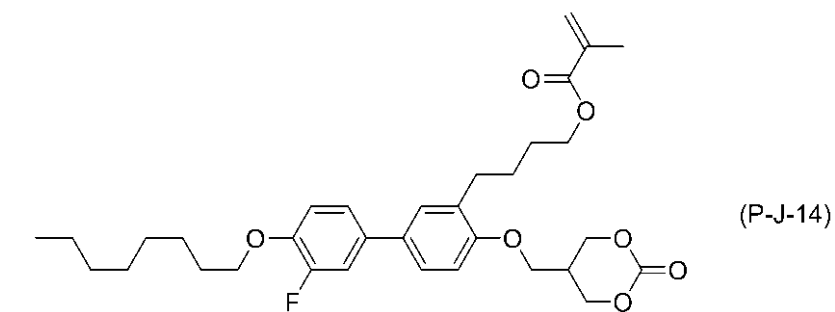
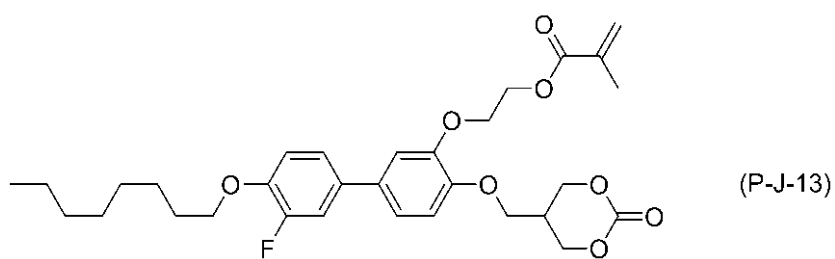
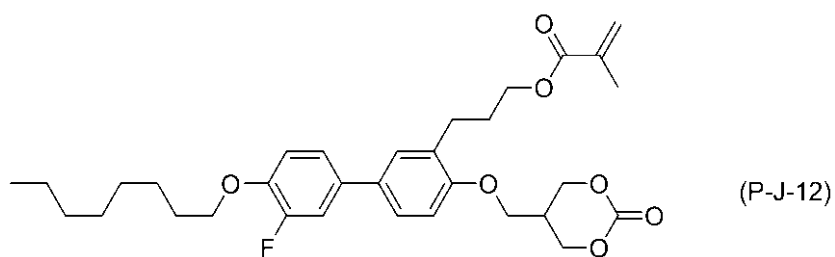
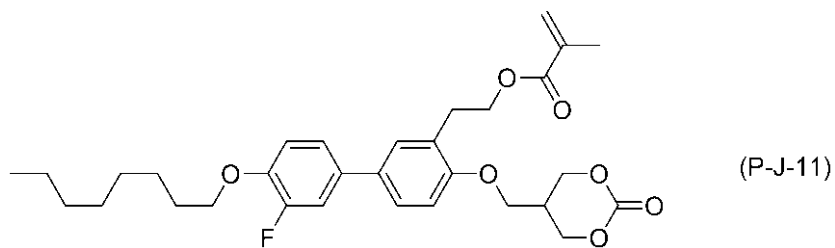
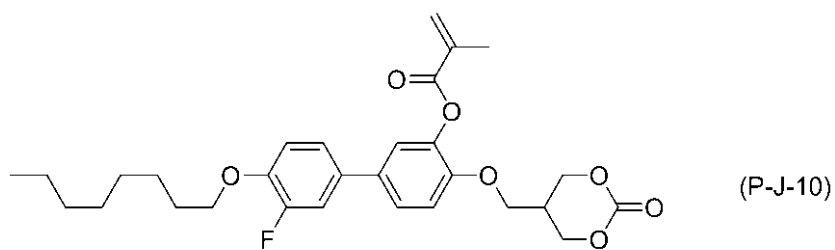


(P-1-26)

20

【 0 2 3 7】

【化 9 1】



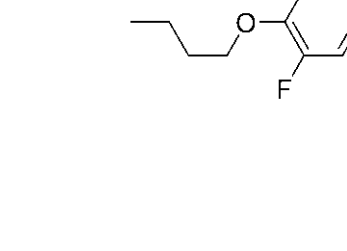
【 0 2 3 8 】

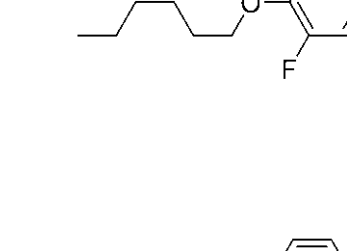
10

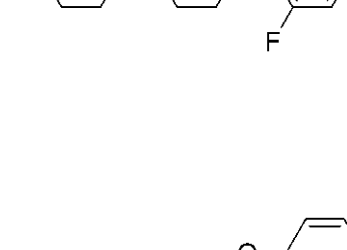
20

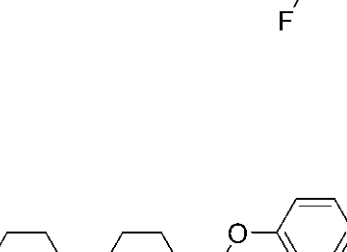
30

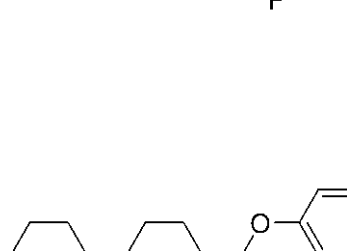
40



(P-J-15)


(P-J-16)


(P-J-17)

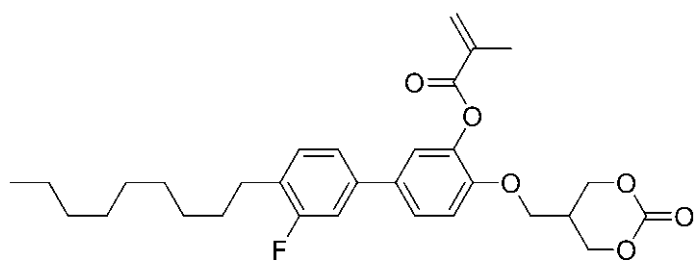

(P-J-18)


(P-J-19)

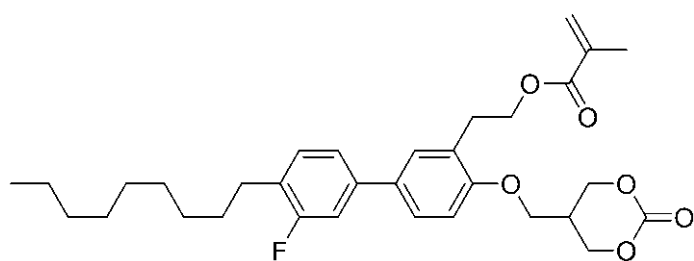

(P-J-20)

【 0 2 3 9 】

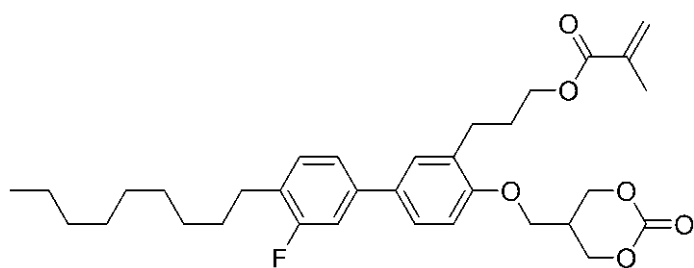
【化 9 3】



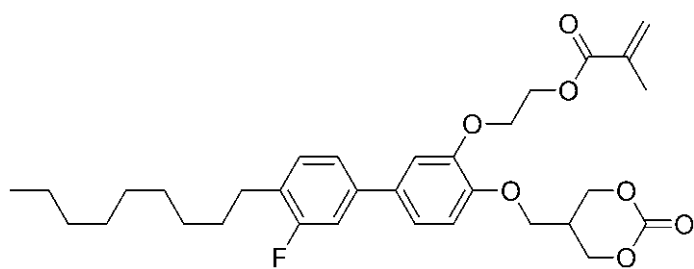
(P-J-21)



(P-J-22)



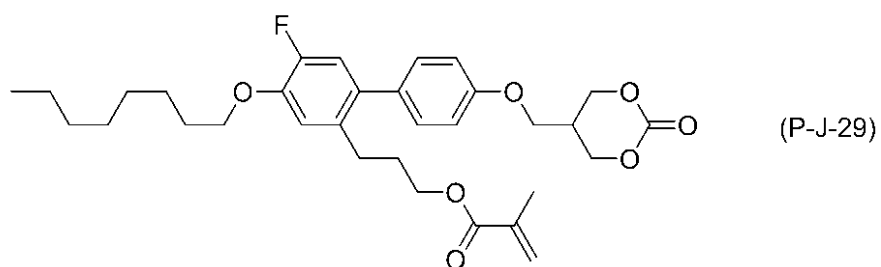
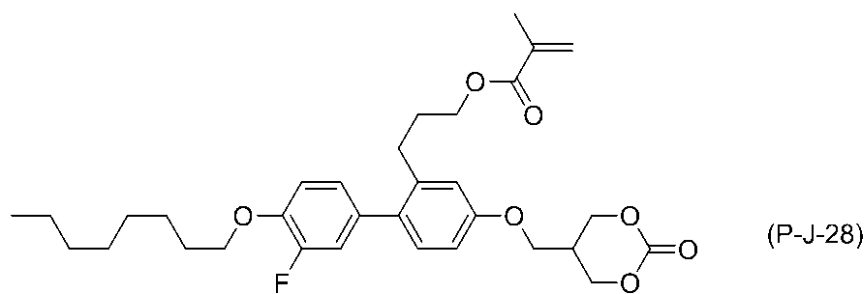
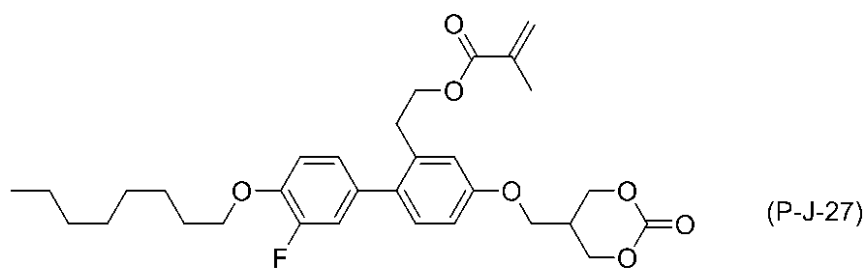
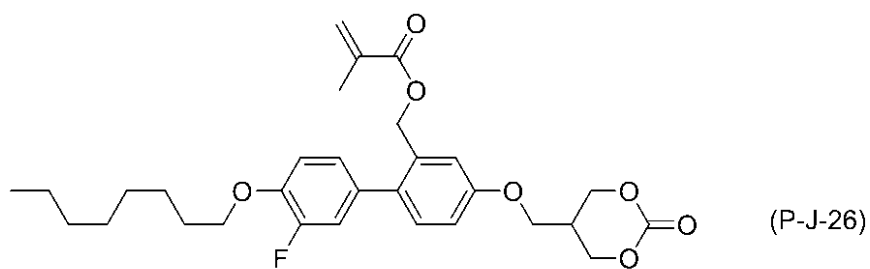
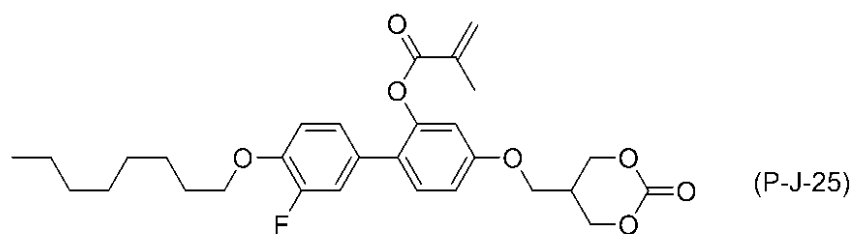
(P-J-23)



(P-J-24)

【 0 2 4 0 】

【化 9 4】



【 0 2 4 1】

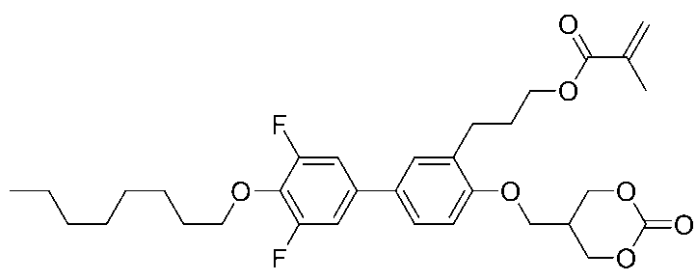
10

20

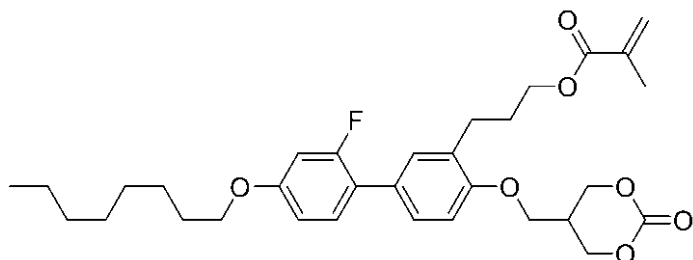
30

40

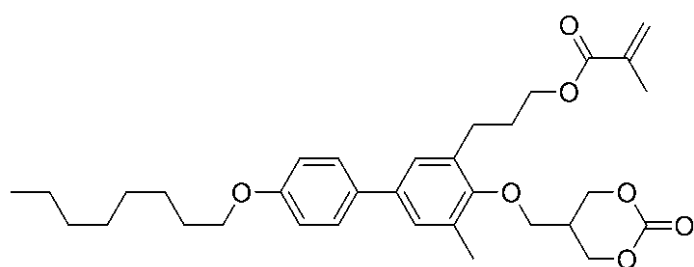
【化 9 5】



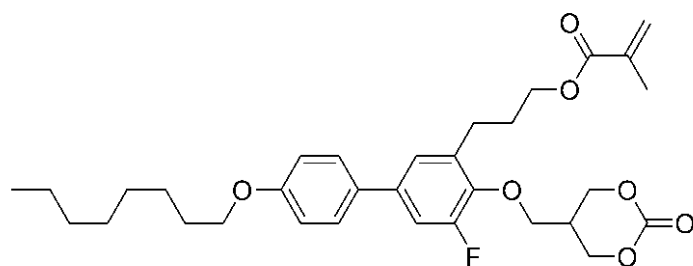
(P-J-30)



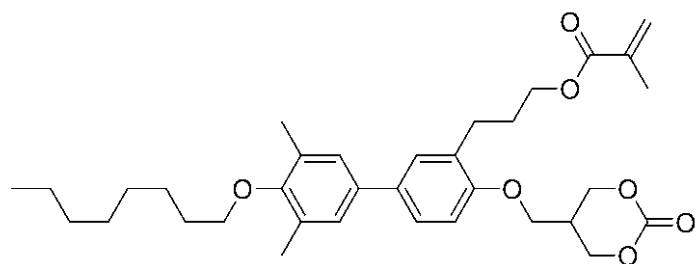
(P-J-31)



(P-J-32)



(P-J-33)



(P-J-34)

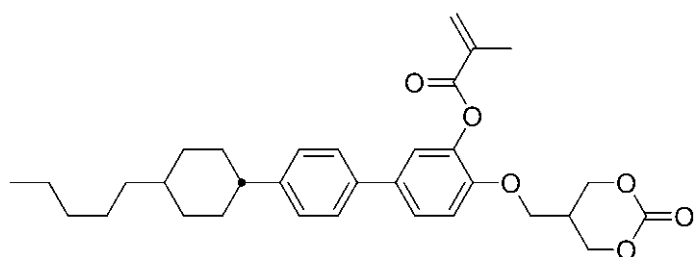
【 0 2 4 2 】

10

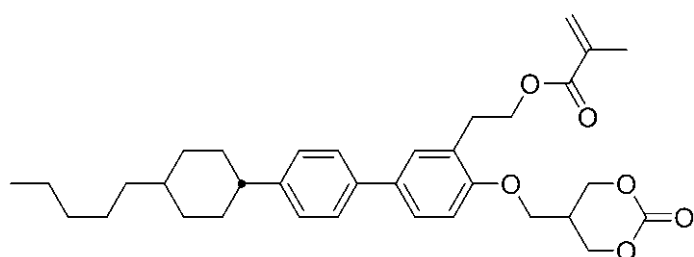
20

30

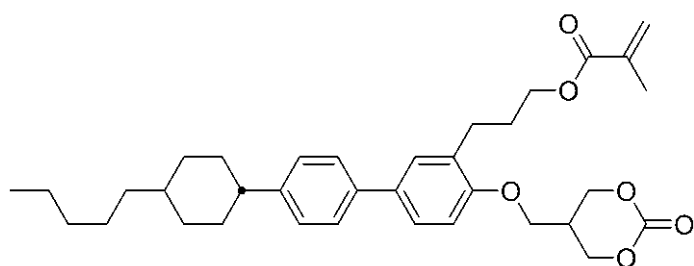
【化 9 6】



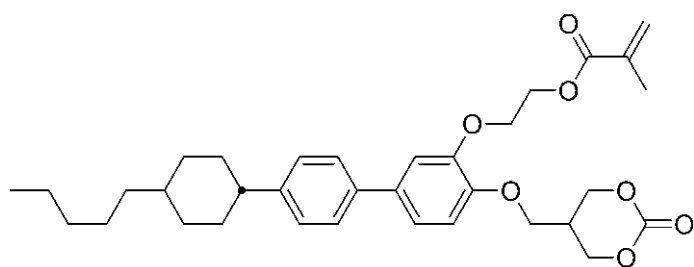
(P-J-35)



(P-J-36)



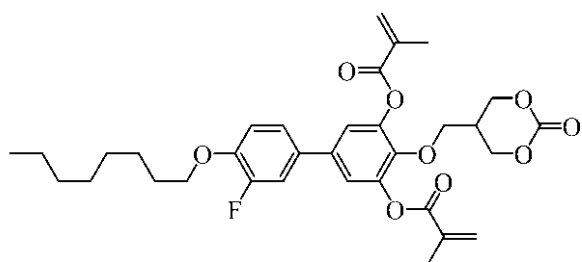
(P-J-37)



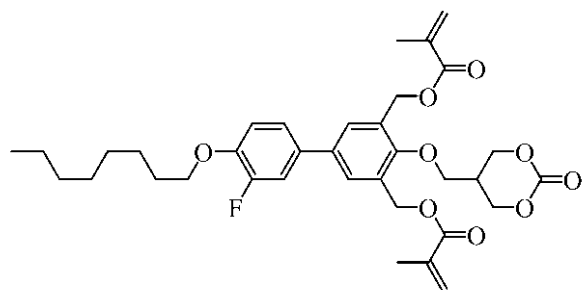
(P-J-38)

【 0 2 4 3】

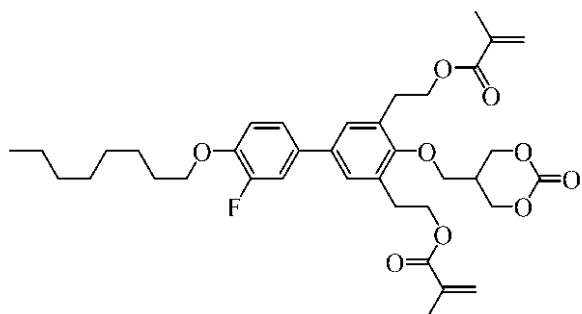
【化 9 7】



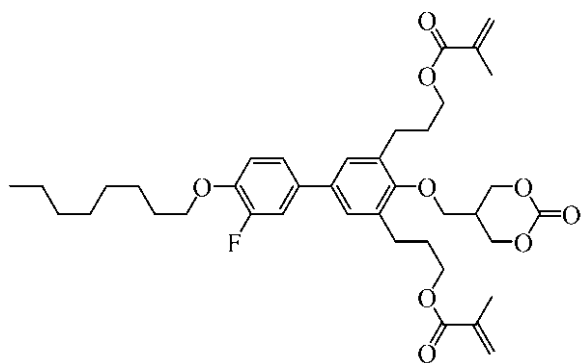
(P-J-39)



(P-J-40)



(P-J-41)



(P-J-42)

【 0 2 4 4 】

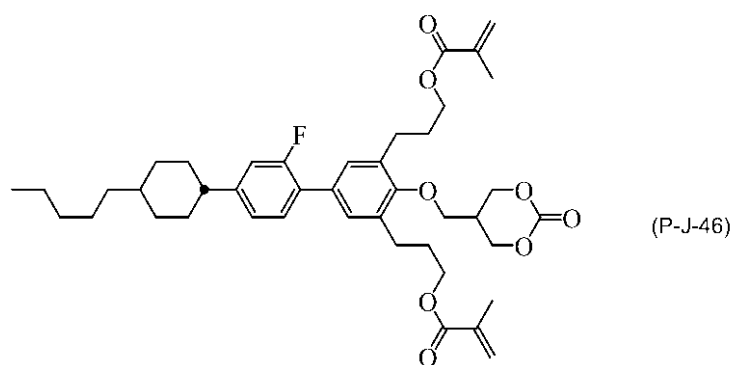
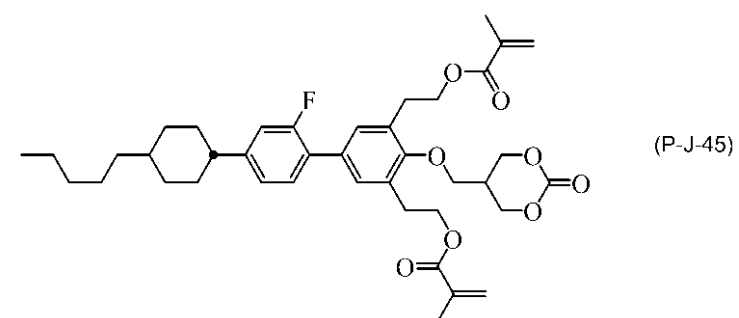
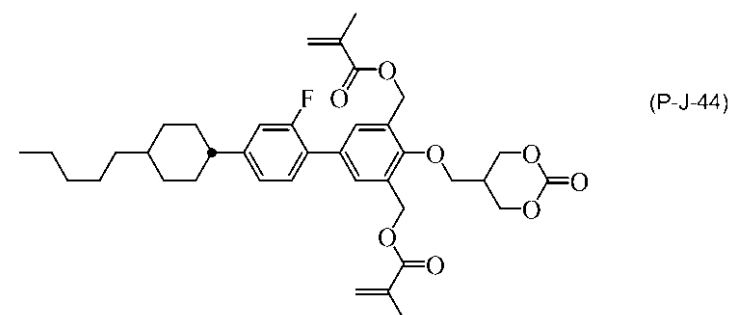
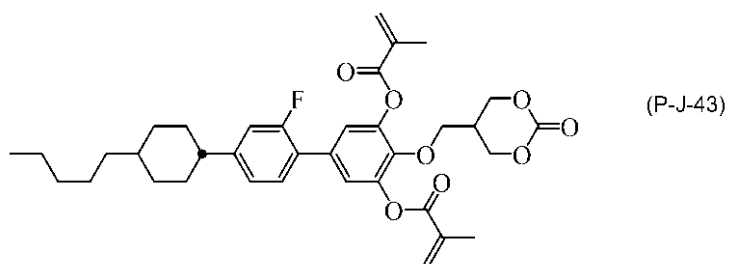
10

20

30

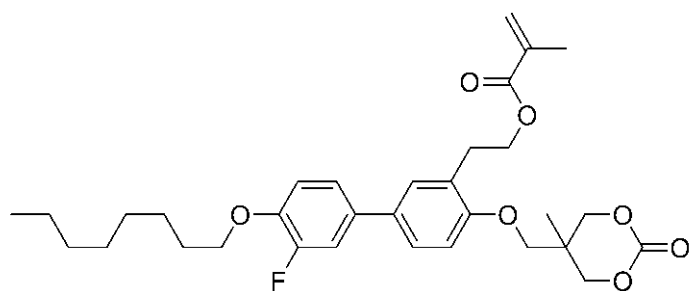


【化 9 8】

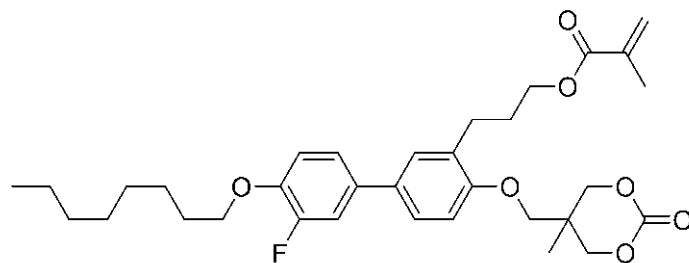


【 0 2 4 5】

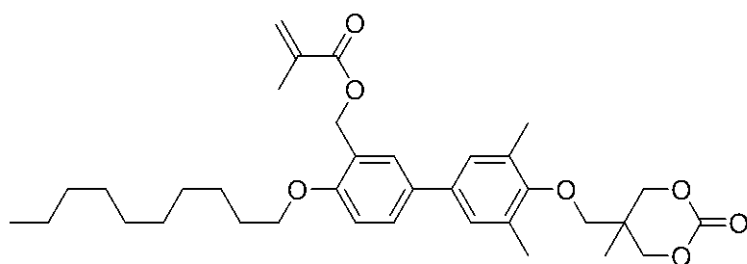
【化 9 9】



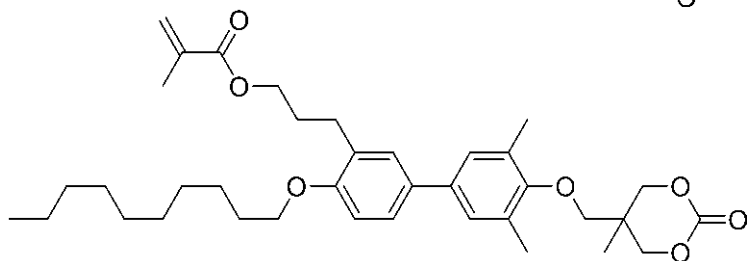
(P-J-47)



(P-J-48)



(P-J-49)



(P-J-50)

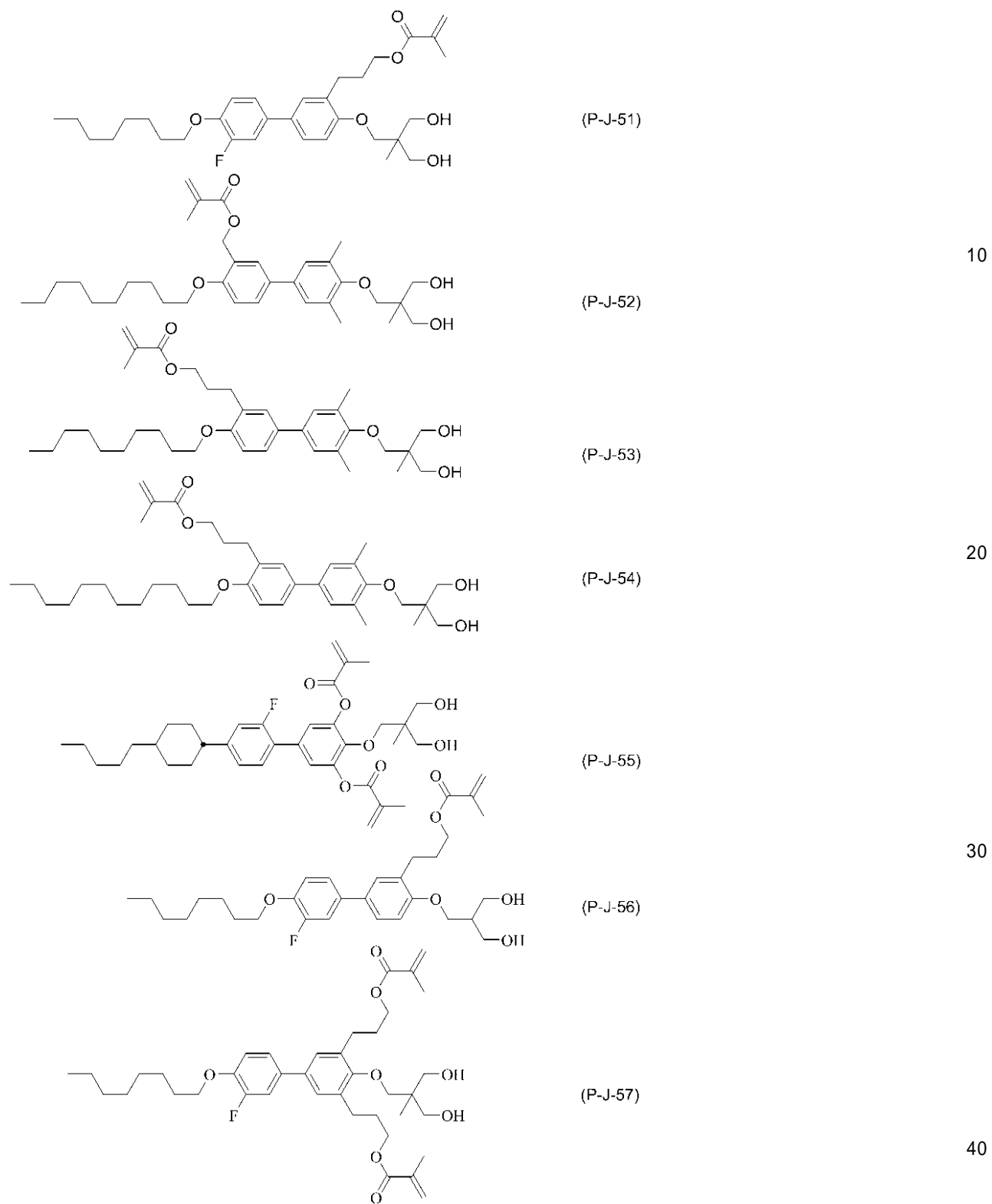
【 0 2 4 6 】

10

20

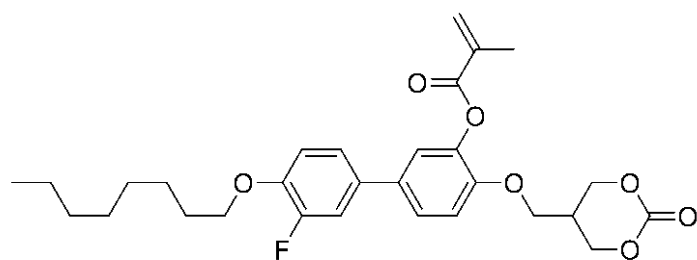
30

【化 1 0 0】

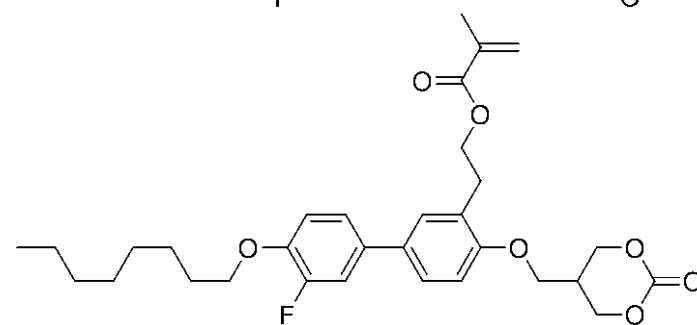


【 0 2 4 7 】

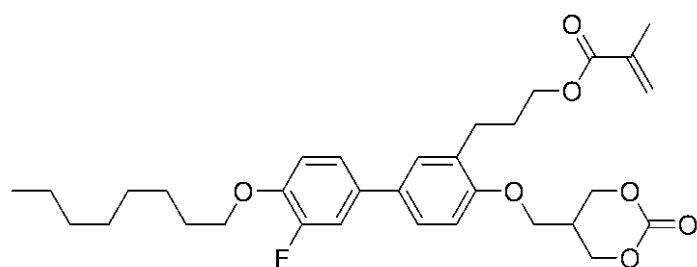
【化 1 0 1】



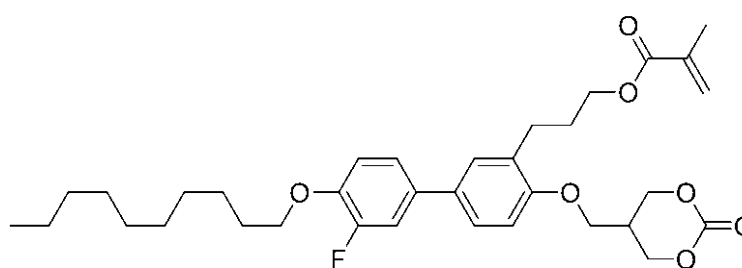
(P-2)



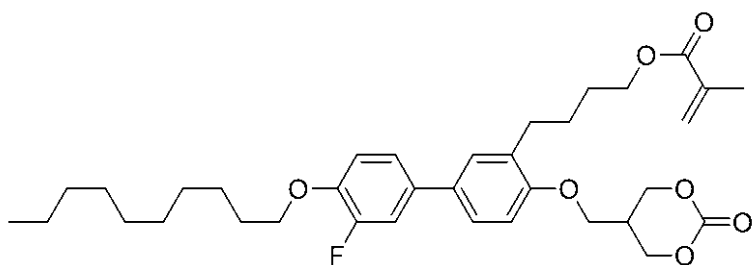
(P-3)



(P-4)



(P-5)



(P-6)

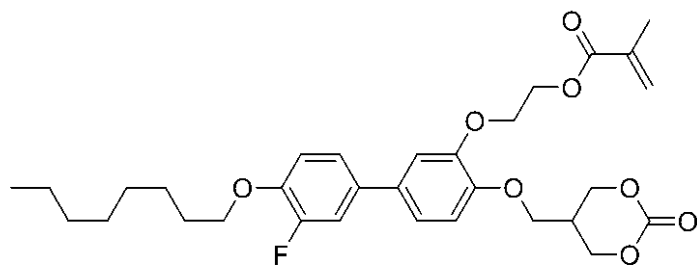
【 0 2 4 8 】

10

20

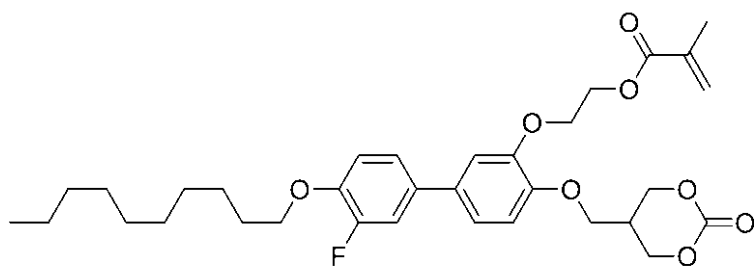
30

【化 1 0 2】

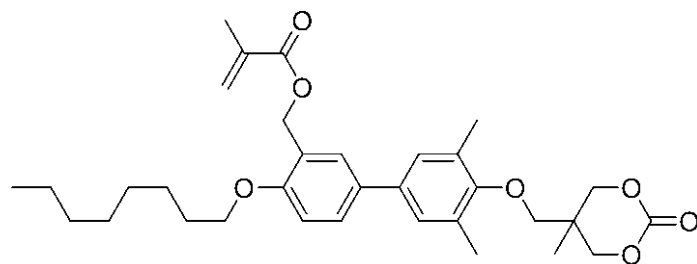


(P-7)

10

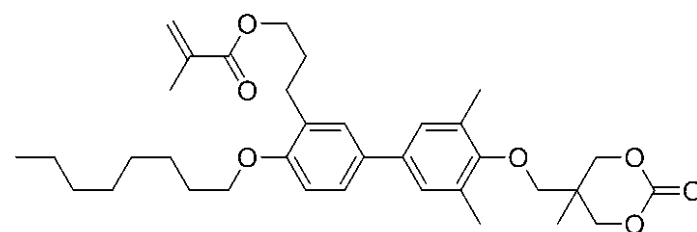


(P-8)



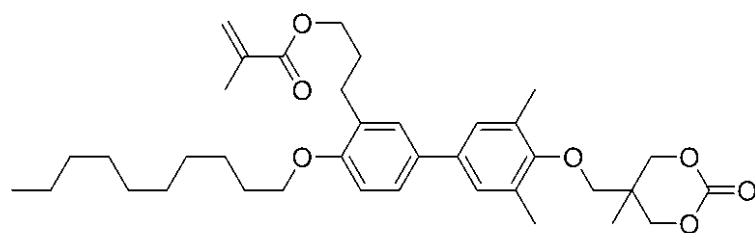
(P-9)

20

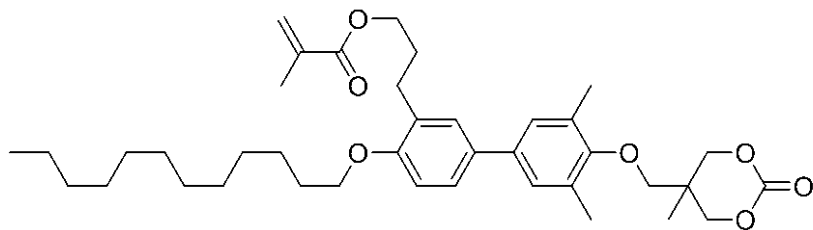


(P-10)

30



(P-11)

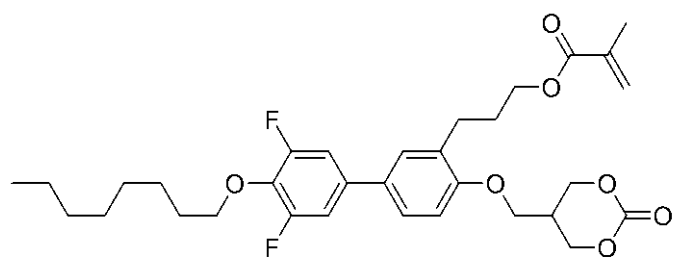


(P-12)

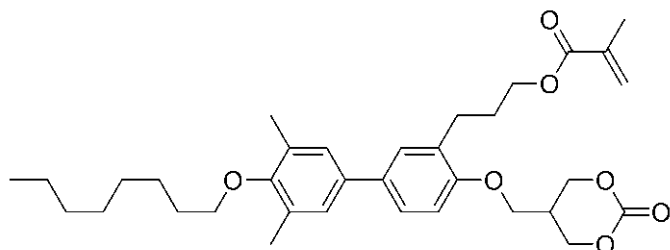
40

【 0 2 4 9】

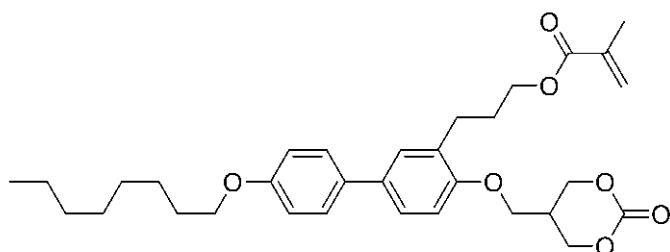
【化 1 0 3】



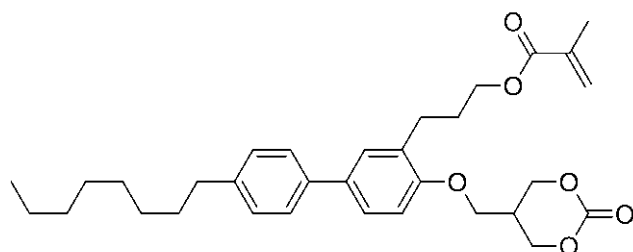
(P-13)



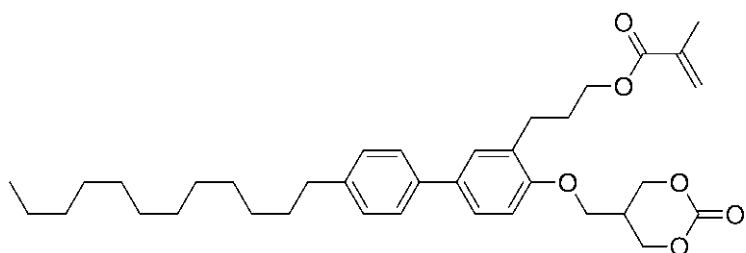
(P-14)



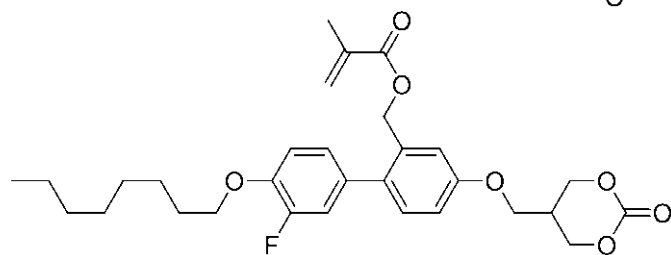
(P-15)



(P-16)



(P-17)



(P-18)

【 0 2 5 0】

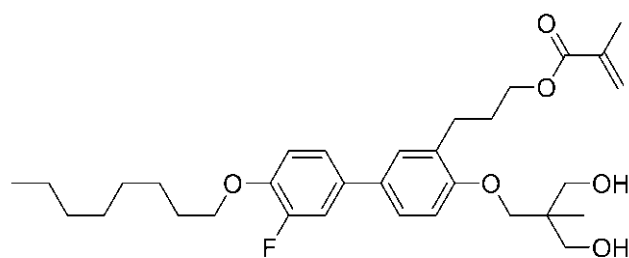
10

20

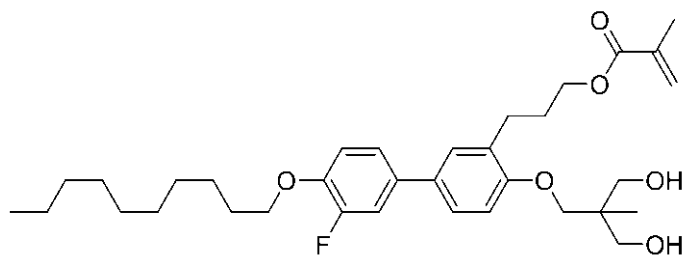
30

40

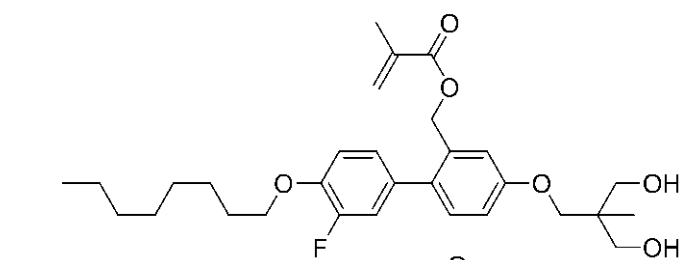
【化 1 0 4】



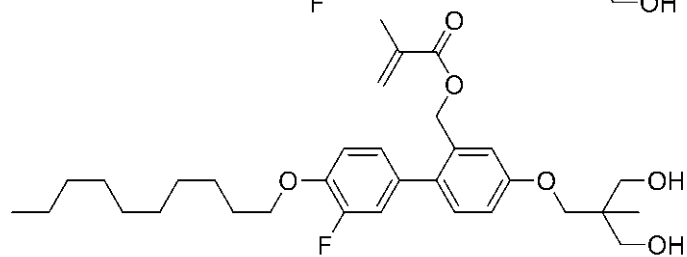
(P-19)



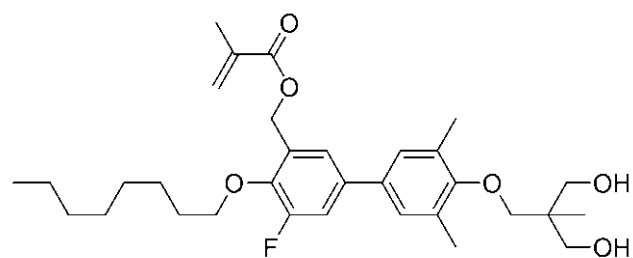
(P-20)



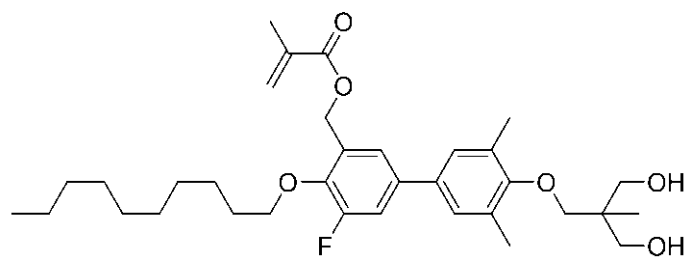
(P-21)



(P-22)



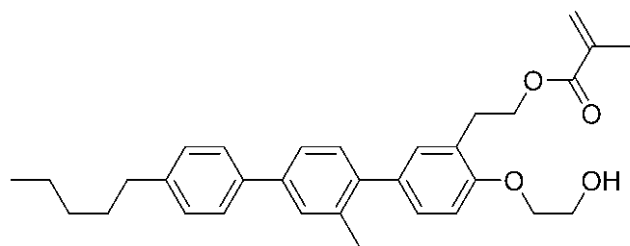
(P-23)



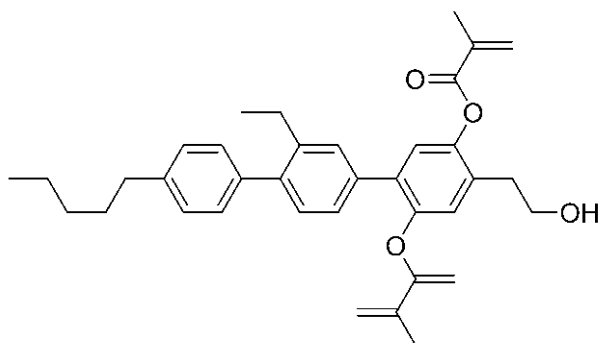
(P-24)

【 0 2 5 1】

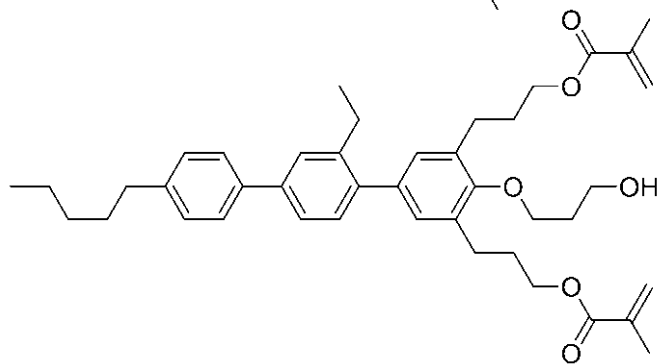
【化 1 0 5】



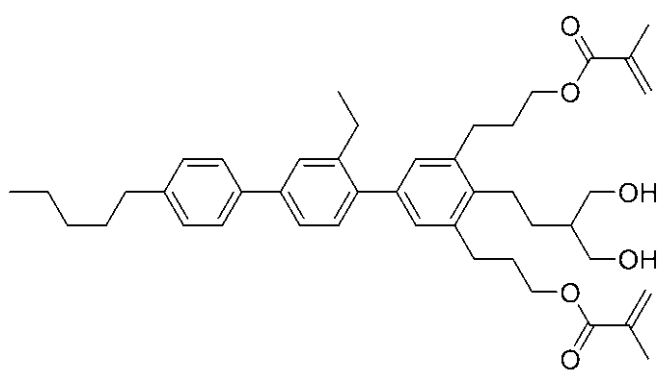
(P-25)



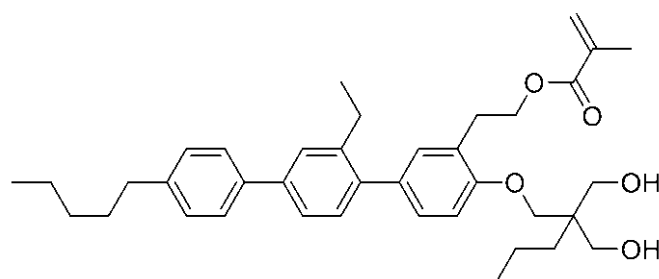
(P-26)



(P-27)



(P-28)



(P-29)

【 0 2 5 2】

10

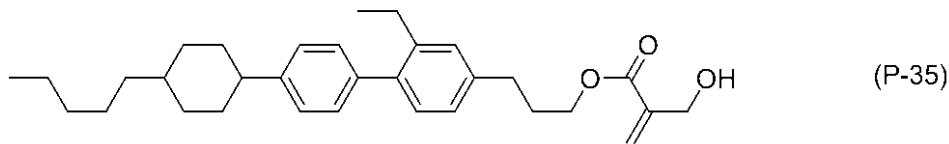
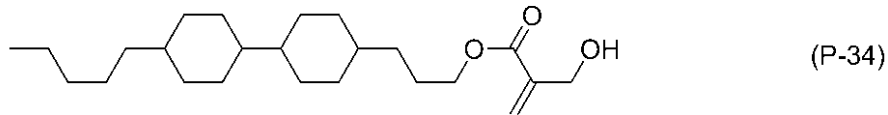
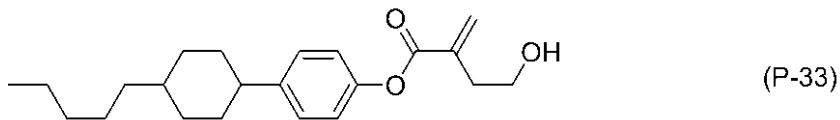
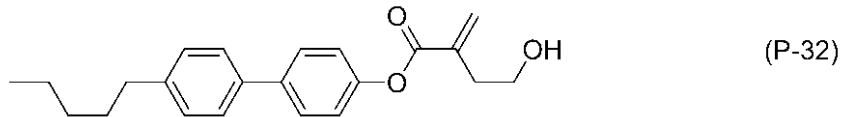
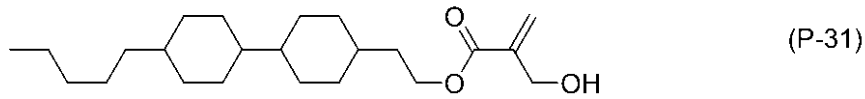
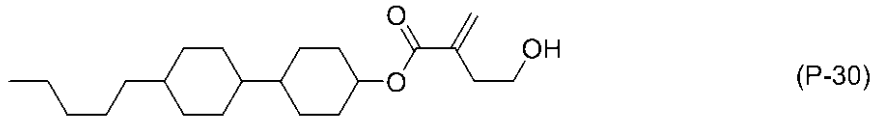
20

30

40



## 【化 1 0 6】



## 【 0 2 5 3】

本発明に係る液晶組成物は、一般式（I）で表される化合物および自発配向性モノマー以外に、一般式（N - 1）、（N - 2）及び（N - 3）で表される化合物から選ばれる化合物を1種類又は2種類以上含有することが好ましい。これら化合物は誘電的に負の化合物（ $\epsilon$ の符号が負で、その絶対値が2より大きい。）に該当する。

## 【 0 2 5 4】

また、尚、化合物の  $\epsilon$  は、25 において誘電的にほぼ中性の組成物に添加して調製した組成物の誘電率異方性の測定値から外挿した値である。なお、以下含有量を%で記載するが、これは質量%を意味する。

## 【 0 2 5 5】

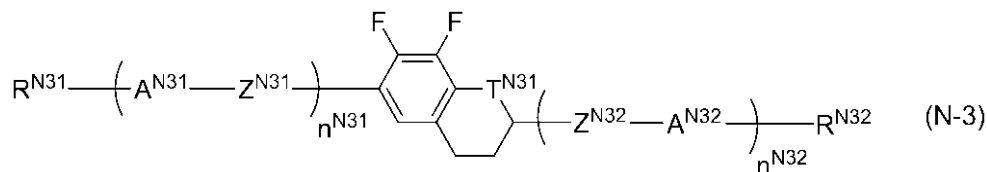
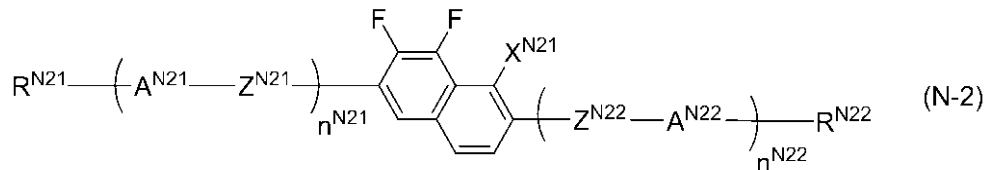
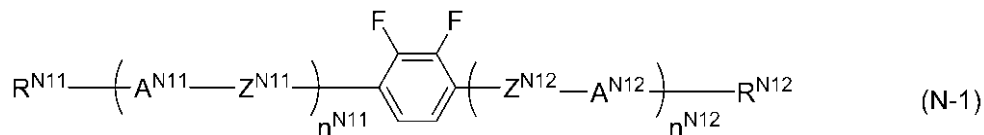
10

20

30

40

## 【化 1 0 7】



## 【 0 2 5 6】

(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 ~ 8 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  $-O-$  に置き換えられてもよい。)

(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  $-N=$  に置き換えられてもよい。)

(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  $-N=$  に置き換えられてもよい。)

及び

(d) 1, 4 - シクロヘキセニレン基

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a)、基 (b)、基 (c) 及び基 (d) 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  $-C \equiv C-$  を表し、

$X^{N21}$  は水素原子又はフッ素原子を表し、

$T^{N31}$  は  $-CH_2-$  - 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 ~ 3 の整数を表すが、 $n^{N11} + n^{N12}$ 、 $n^{N21} + n^{N22}$  及び  $n^{N31} + n^{N32}$  はそれぞれ独立して 1、2 又は 3 であり、 $A^{N11} \sim A^{N32}$ 、 $Z^{N11} \sim Z^{N32}$  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。)

一般式 (N - 1)、(N - 2) 及び (N - 3) で表される化合物は、 $n^{N11}$ 、 $n^{N12}$ 、 $n^{N21}$ 、 $n^{N22}$ 、 $n^{N31}$  及び  $n^{N32}$  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。

## 【 0 2 5 7】

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

10

20

30

40

50

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い。R<sup>1 1</sup>、R<sup>2 1</sup> および R<sup>3 1</sup> はそれぞれ独立して、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、R<sup>1 2</sup>、R<sup>2 2</sup> および R<sup>3 2</sup> はそれぞれ独立して、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 5 のアルコキシ基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニルオキシ基がより好ましい。

【0258】

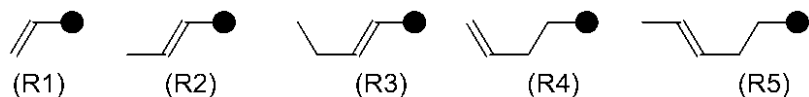
また、末端基 (R<sup>N 1 1</sup>、R<sup>N 1 2</sup>、R<sup>N 2 1</sup>、R<sup>N 2 2</sup>、R<sup>N 3 1</sup> 及び R<sup>N 3 2</sup>) の結合する環構造がフェニル基 (芳香族) である場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、前記末端基の結合する環構造がシクロヘキサン、ピラン及びジオキサンなどの飽和した環構造の場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 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。

【0259】

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。)

【0260】

【化108】

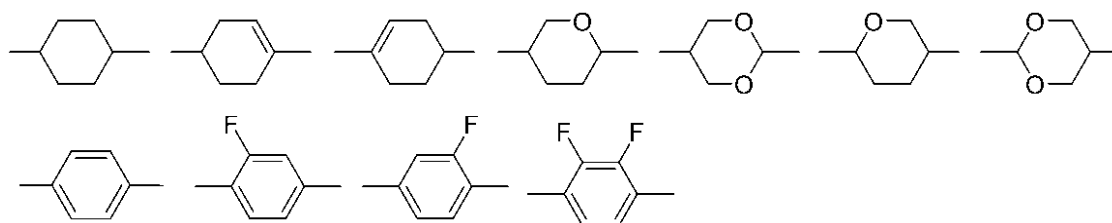


【0261】

A<sup>N 1 1</sup>、A<sup>N 1 2</sup>、A<sup>N 2 1</sup>、A<sup>N 2 2</sup>、A<sup>N 3 1</sup> 及び A<sup>N 3 2</sup> 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、

【0262】

【化109】



【0263】

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

【0264】

Z<sup>N 1 1</sup>、Z<sup>N 1 2</sup>、Z<sup>N 2 1</sup>、Z<sup>N 2 2</sup>、Z<sup>N 3 1</sup> 及び Z<sup>N 3 2</sup> はそれぞれ独立して -CH<sub>2</sub>O-、-CF<sub>2</sub>O-、-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-、-CF<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>- 又は単結合を表すことが好ましく、-CH<sub>2</sub>O-、-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- 又は単結合が更に好ましく、-CH<sub>2</sub>O- 又は単結合が特に好ましい。

## 【0265】

$X^{N21}$  はフッ素原子が好ましい。

## 【0266】

$T^{N31}$  は酸素原子が好ましい。

## 【0267】

$n^{N11} + n^{N12}$ 、 $n^{N21} + n^{N22}$  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。

10

## 【0268】

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。

## 【0269】

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。

20

## 【0270】

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。

30

## 【0271】

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  $Tn_i$  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。

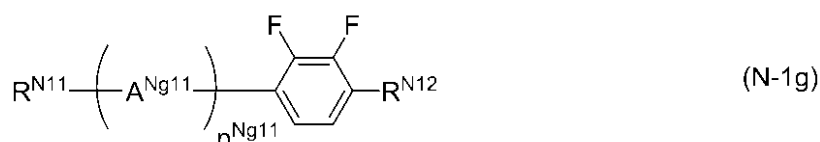
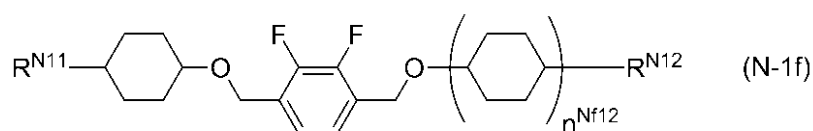
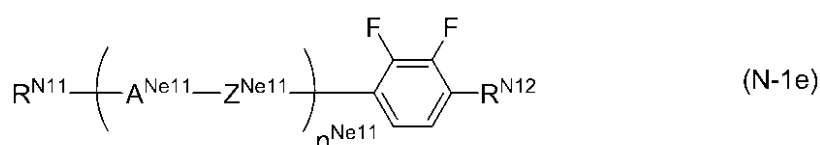
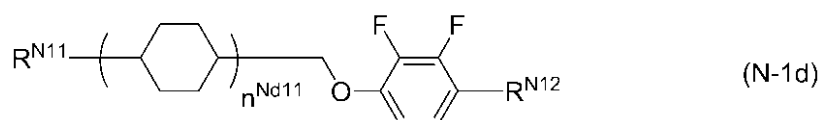
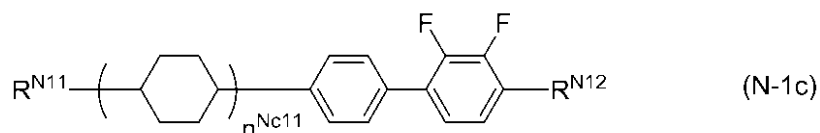
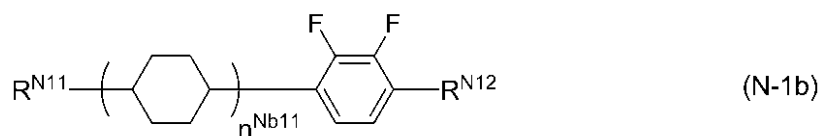
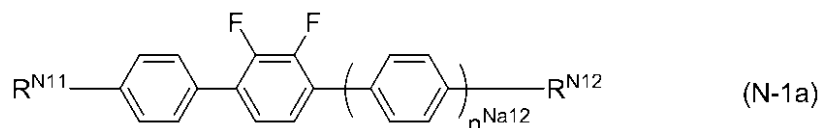
## 【0272】

一般式 (N - 1) で表される化合物として、下記の一般式 (N - 1 a) ~ (N - 1 g) で表される化合物群を挙げることができる。

40

## 【0273】

## 【化 1 1 0】



## 【 0 2 7 4 】

(式中、 $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  は一般式 (N-1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表し、 $n^{Na12}$  は 0 又は 1 を表し、 $n^{Nb11}$  は 0 又は 1 を表し、 $n^{Nc11}$  は 0 又は 1 を表し、 $n^{Nd11}$  は 0 又は 1 を表し、 $n^{Ne11}$  は 1 又は 2 を表し、 $n^{Nf12}$  は 1 又は 2 を表し、 $n^{Ng11}$  は 1 又は 2 を表し、 $A^{Ne11}$  はトランス-1,4-シクロヘキシレン基又は 1,4-フェニレン基を表し、 $A^{Ng11}$  はトランス-1,4-シクロヘキシレン基、1,4-シクロヘキセニレン基又は 1,4-フェニレン基を表すが、 $n^{Ng11}$  が 1 の場合、 $A^{Ng11}$  は 1,4-シクロヘキセニレン基を表し、 $n^{Ng11}$  が 2 の場合、少なくとも 1 つの  $A^{Ng11}$  は 1,4-シクロヘキセニレン基を表し、 $Z^{Ne11}$  は単結合又はエチレン基を表すが、 $n^{Ne11}$  が 1 の場合、 $Z^{Ne11}$  はエチレン基を表す。 $n^{Ne11}$  が 2 の場合、少なくとも 1 つの  $Z^{Ne11}$  はエチレン基を表す。)

より具体的には、一般式 (N-1) で表される化合物は一般式 (N-1-1) ~ (N-1-22) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

## 【 0 2 7 5 】

一般式 (N-1-1) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 2 7 6 】

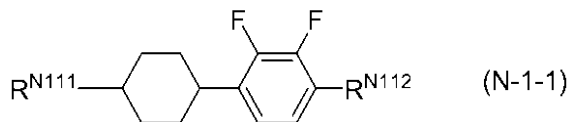
10

20

30

40

## 【化 1 1 1】



## 【0 2 7 7】

(式中、 $R^{N111}$  及び  $R^{N112}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N111}$  及び  $R^{N112}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N111}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、プロピル基、ペンチル基又はビニル基が好ましい。 $R^{N112}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基又はブトキシ基が好ましい。

10

## 【0 2 7 8】

一般式 (N - 1 - 1) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

## 【0 2 7 9】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

20

## 【0 2 8 0】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 1) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % であり、23 % であり、25 % であり、27 % であり、30 % であり、33 % であり、35 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、50 % であり、40 % であり、38 % であり、35 % であり、33 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、8 % であり、7 % であり、6 % であり、5 % であり、3 % である。

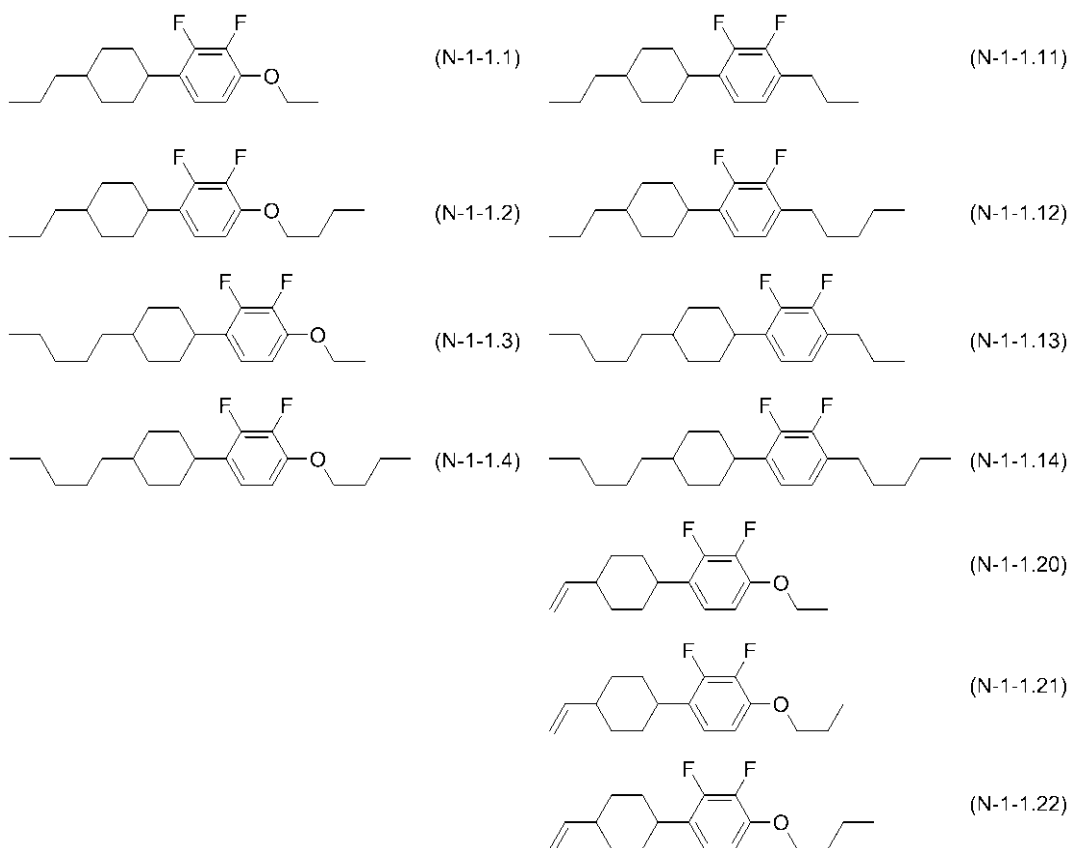
30

## 【0 2 8 1】

さらに、一般式 (N - 1 - 1) で表される化合物は、式 (N - 1 - 1.1) から式 (N - 1 - 1.22) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N - 1 - 1.1) ~ (N - 1 - 1.4) で表される化合物であることが好ましく、式 (N - 1 - 1.1) 及び式 (N - 1 - 1.3) で表される化合物が好ましい。

## 【0 2 8 2】

## 【化 1 1 2】



## 【 0 2 8 3】

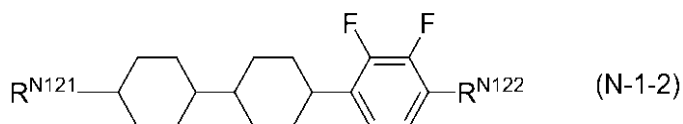
式 (N - 1 - 1 . 1) ~ (N - 1 - 1 . 22) で表される化合物は単独で使用するこ  
も、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対しての単独又  
はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり  
、15 % であり、17 % であり、20 % であり、23 % であり、25 % であり、27 % で  
あり、30 % であり、33 % であり、35 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明  
の組成物の総量に対して、50 % であり、40 % であり、38 % であり、35 % であり、  
33 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であ  
り、18 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、8 % であり、7 % であ  
り、6 % であり、5 % であり、3 % である。

## 【 0 2 8 4】

一般式 (N - 1 - 2) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 2 8 5】

## 【化 1 1 3】



## 【 0 2 8 6】

(式中、 $R^{N121}$  及び  $R^{N122}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N121}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好  
ましく、エチル基、プロピル基、ブチル基又はペンチル基が好ましい。 $R^{N122}$  は炭素  
原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のア  
ルコキシ基が好ましく、メチル基、プロピル基、メトキシ基、エトキシ基又はプロポキシ  
基が好ましい。

## 【 0 2 8 7】

10

20

30

40

50

一般式 (N - 1 - 2) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

【0288】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、

10

【0289】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 2) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、7 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % であり、23 % であり、25 % であり、27 % であり、30 % であり、33 % であり、35 % であり、37 % であり、40 % であり、42 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、50 % であり、48 % であり、45 % であり、43 % であり、40 % であり、38 % であり、35 % であり、33 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、8 % であり、7 % であり、6 % であり、5 % である。

20

【0290】

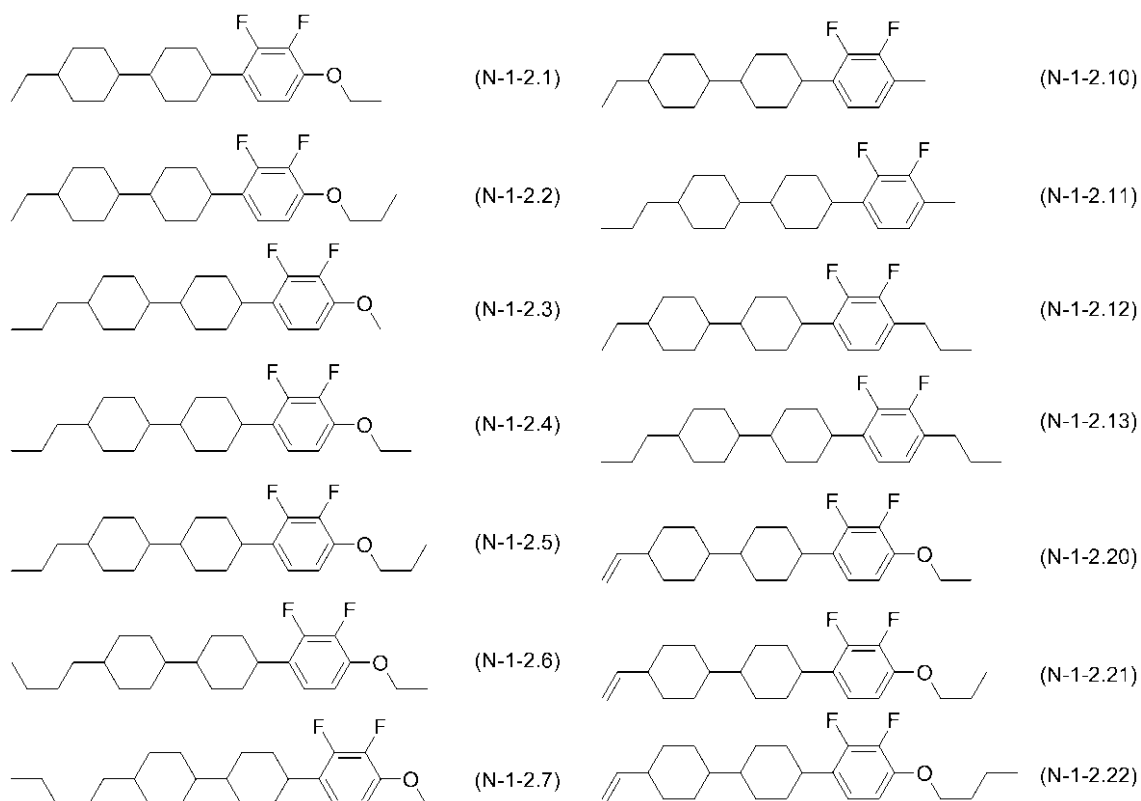
さらに、一般式 (N - 1 - 2) で表される化合物は、式 (N - 1 - 2.1) から式 (N - 1 - 2.22) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N - 1 - 2.3) から式 (N - 1 - 2.7)、式 (N - 1 - 2.10)、式 (N - 1 - 2.11)、式 (N - 1 - 2.13) 及び式 (N - 1 - 2.20) で表される化合物であることが好ましく、の改良を重視する場合には式 (N - 1 - 2.3) から式 (N - 1 - 2.7) で表される化合物が好ましく、 $T_{NI}$  の改良を重視する場合には式 (N - 1 - 2.10)、式 (N - 1 - 2.11) 及び式 (N - 1 - 2.13) で表される化合物であることが好ましく、応答速度の改良を重視する場合には式 (N - 1 - 2.20) で表される化合物であることが好ましい。

30

【0291】



## 【化 1 1 4】



## 【 0 2 9 2 】

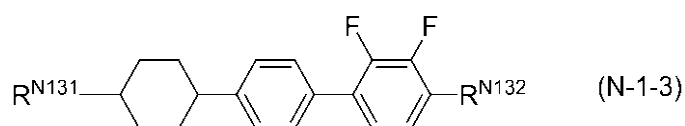
式 (N - 1 - 2 . 1) から式 (N - 1 - 2 . 2 2) で表される化合物は単独で使用する  
ことも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対するの  
単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 %  
であり、15 % であり、17 % であり、20 % であり、23 % であり、25 % であり、27  
% であり、30 % であり、33 % であり、35 % である。好ましい含有量の上限値は、本  
発明の組成物の総量に対して、50 % であり、40 % であり、38 % であり、35 % であ  
り、33 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 %  
であり、18 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、8 % であり、7 %  
であり、6 % であり、5 % であり、3 % である。

## 【 0 2 9 3 】

一般式 (N - 1 - 3) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 2 9 4 】

## 【化 1 1 5】



## 【 0 2 9 5 】

(式中、 $R^{N131}$  及び  $R^{N132}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N131}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好  
ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 $R^{N132}$  は炭素原子数 1 ~ 5  
のアルキル基、炭素原子数 3 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が  
好ましく、1 - プロペニル基、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

## 【 0 2 9 6 】

一般式 (N - 1 - 3) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化  
合物を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

10

20

30

40

50

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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。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種類であり、２種類であり、３種類であり、４種類であり、５種類以上である。

#### 【 0 2 9 7 】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$ を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

#### 【 0 2 9 8 】

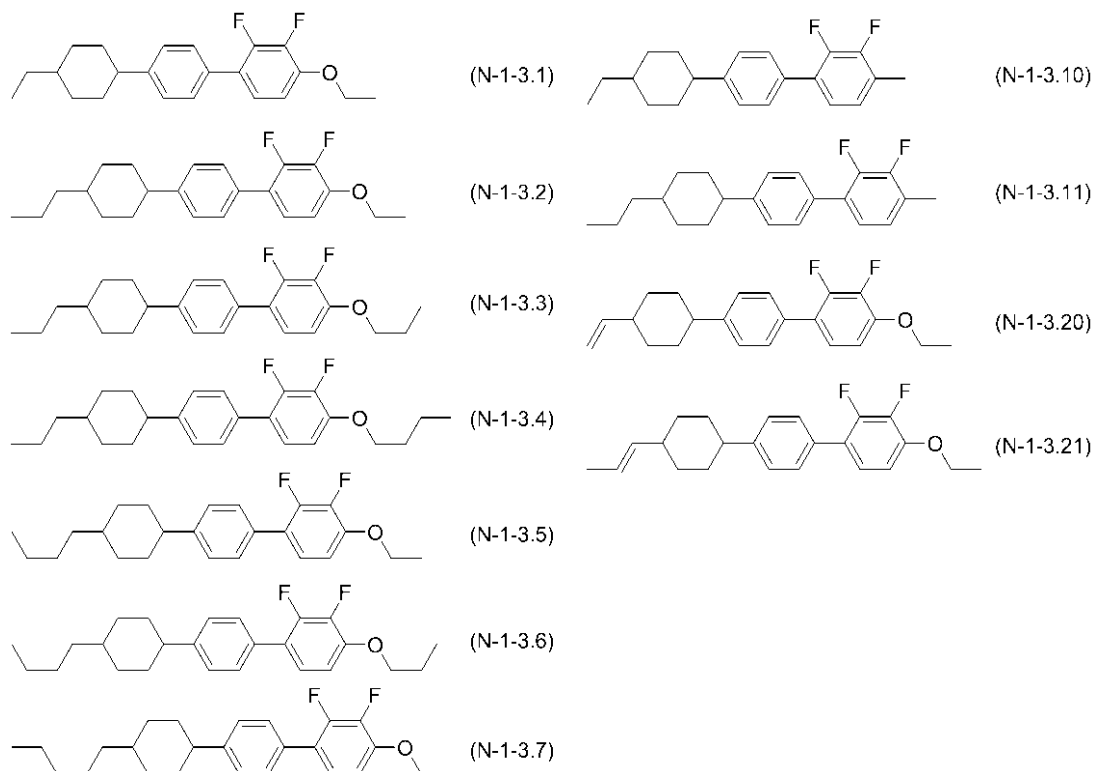
本発明の組成物の総量に対しての式（N - 1 - 3）で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、５％であり、１０％であり、１３％であり、１５％であり、１７％であり、２０％である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、３５％であり、３０％であり、２８％であり、２５％であり、２３％であり、２０％であり、１８％であり、１５％であり、１３％である。

#### 【 0 2 9 9 】

さらに、一般式（N - 1 - 3）で表される化合物は、式（N - 1 - 3 . 1）から式（N - 1 - 3 . 2 1）で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式（N - 1 - 3 . 1）～（N - 1 - 3 . 7）及び式（N - 1 - 3 . 2 1）で表される化合物であることが好ましく、式（N - 1 - 3 . 1）、式（N - 1 - 3 . 2）、式（N - 1 - 3 . 3）

#### 【 0 3 0 0 】

#### 【 化 1 1 6 】



#### 【 0 3 0 1 】

式（N - 1 - 3 . 1）～式（N - 1 - 3 . 4）、式（N - 1 - 3 . 6）及び式（N - 1 - 3 . 2 1）で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせることも可能であるが、式（N - 1 - 3 . 1）及び式（N - 1 - 3 . 2）の組み合わせ、式（N - 1 - 3 . 3）、式（N - 1 - 3 . 4）及び式（N - 1 - 3 . 6）から選ばれる２種又は３種の組み合わせが好ましい。本発明の組成物の総量に対しての単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、５％であり、１０％であり、１３％であり、１５％であり、１７

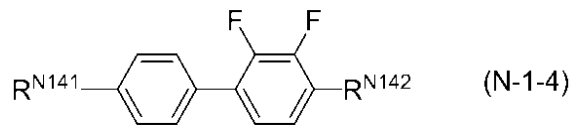
%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

【0302】

一般式(N-1-4)で表される化合物は下記の化合物である。

【0303】

【化117】



10

【0304】

(式中、 $R^{N141}$  及び  $R^{N142}$  はそれぞれ独立して、一般式(N-1)における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N141}$  及び  $R^{N142}$  はそれぞれ独立して、炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、メチル基、プロピル基、エトキシ基又はブトキシ基が好ましい。

【0305】

一般式(N-1-4)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

20

【0306】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$ を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

【0307】

本発明の組成物の総量に対しての式(N-1-4)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、11%であり、10%であり、8%である。

【0308】

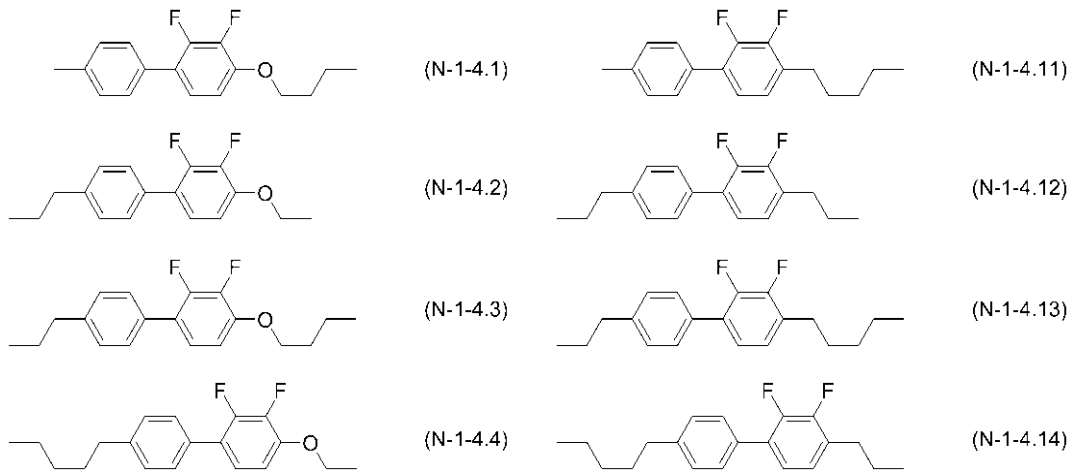
さらに、一般式(N-1-4)で表される化合物は、式(N-1-4.1)から式(N-1-4.14)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(N-1-4.1)~(N-1-4.4)で表される化合物であることが好ましく、式(N-1-4.1)、式(N-1-4.2)及び式(N-1-4.4)で表される化合物が好ましい。

30

40

【0309】

## 【化 1 1 8】



10

## 【 0 3 1 0】

式 (N - 1 - 4 . 1) ~ (N - 1 - 4 . 14) で表される化合物は単独で使用するこ  
も、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対しての単独又  
はこれら化合物の好ましい含有量の下限值は、3 % であり、5 % であり、7 % であり、1  
0 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有  
量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、  
25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % であり、  
11 % であり、10 % であり、8 % である。

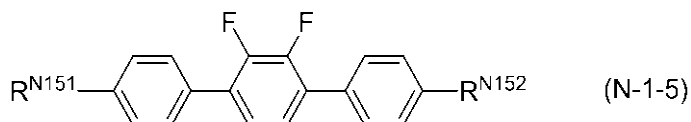
20

## 【 0 3 1 1】

一般式 (N - 1 - 5) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 3 1 2】

## 【化 1 1 9】



30

## 【 0 3 1 3】

(式中、 $R^{N151}$  及び  $R^{N152}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N151}$  及び  $R^{N152}$  はそれぞれ独立して、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素  
原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましくエチル基、  
プロピル基又はブチル基が好ましい。

## 【 0 3 1 4】

一般式 (N - 1 - 5) で表される化合物は単独で使用するこ  
も、2 以上の化  
合物を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、複屈折率などの求められ  
る性能に応じて適宜組み合わせる。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種  
類以上である。

40

## 【 0 3 1 5】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解  
性を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含  
有量を多めに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、  
含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

## 【 0 3 1 6】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 5) で表される化合物の好ましい含有量

50

の下限値は、５％であり、８％であり、１０％であり、１３％であり、１５％であり、１７％であり、２０％である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、３５％であり、３３％であり、３０％であり、２８％であり、２５％であり、２３％であり、２０％であり、１８％であり、１５％であり、１３％である。

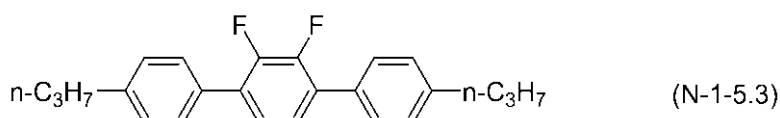
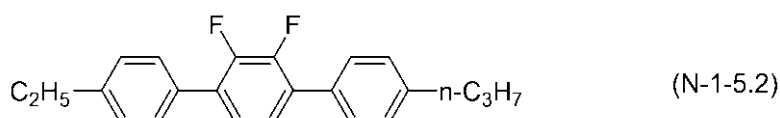
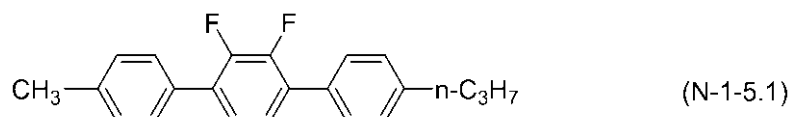
【０３１７】

さらに、一般式（Ｎ－１－５）で表される化合物は、式（Ｎ－１－５．１）から式（Ｎ－１－５．６）で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式（Ｎ－１－５．１）、式（Ｎ－１－５．２）及び式（Ｎ－１－５．４）で表される化合物が好ましい。

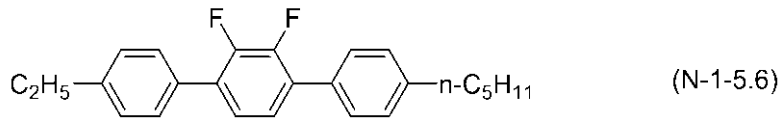
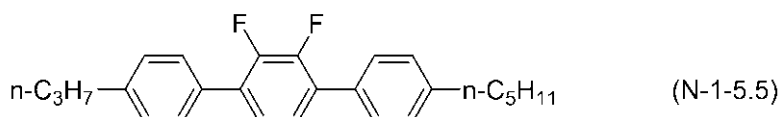
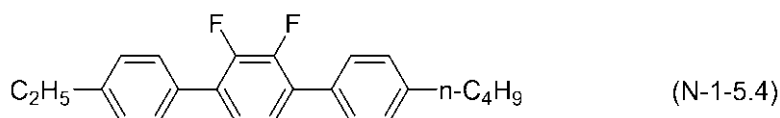
【０３１８】

10

【化１２０】



20



30

【０３１９】

式（Ｎ－１－５．１）、式（Ｎ－１－５．２）及び式（Ｎ－１－５．４）で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対しての単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、５％であり、８％であり、１０％であり、１３％であり、１５％であり、１７％であり、２０％である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、３５％であり、３３％であり、３０％であり、２８％であり、２５％であり、２３％であり、２０％であり、１８％であり、１５％であり、１３％である。

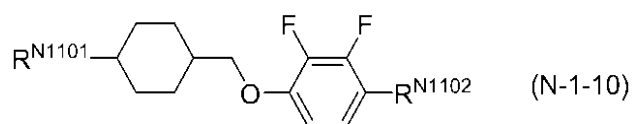
40

【０３２０】

一般式（Ｎ－１－１０）で表される化合物は下記の化合物である。

【０３２１】

【化１２１】



【０３２２】

（式中、 $R^{N1101}$  及び  $R^{N1102}$  はそれぞれ独立して、一般式（Ｎ－１）における

50

$R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。) )

$R^{N1101}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基、ブチル基、ビニル基又は 1 - プロペニル基が好ましい。  
 $R^{N1102}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

### 【0323】

一般式 (N - 1 - 10) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求めら

10

### 【0324】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を高めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量を高めに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

### 【0325】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 10) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

20

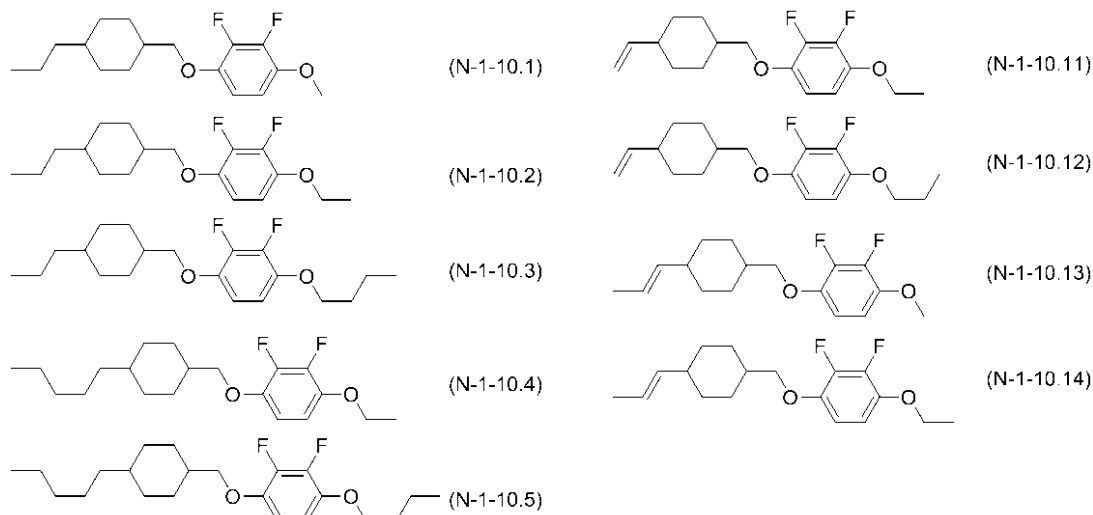
### 【0326】

さらに、一般式 (N - 1 - 10) で表される化合物は、式 (N - 1 - 10.1) から式 (N - 1 - 10.14) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N - 1 - 10.1) ~ (N - 1 - 10.5) 式 (N - 1 - 10.13) 及び式 (N - 1 - 10.14) で表される化合物であることが好ましく、式 (N - 1 - 10.1)、式 (N - 1 - 10.2)、式 (N - 1 - 10.13) 及び式 (N - 1 - 10.14) で表さ

30

### 【0327】

### 【化122】



40

### 【0328】

式 (N - 1 - 10.1)、式 (N - 1 - 10.2)、式 (N - 1 - 10.13) 及び式 (N - 1 - 10.14) で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせ使用す

50

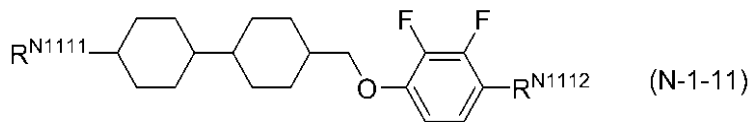
ることも可能であるが、本発明の組成物の総量に対しての単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、５％であり、１０％であり、１３％であり、１５％であり、１７％であり、２０％である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、３５％であり、３０％であり、２８％であり、２５％であり、２３％であり、２０％であり、１８％であり、１５％であり、１３％である。

【０３２９】

一般式（ $N-1-11$ ）で表される化合物は下記の化合物である。

【０３３０】

【化１２３】



10

【０３３１】

（式中、 $R^{N111}$  及び  $R^{N112}$  はそれぞれ独立して、一般式（ $N-1$ ）における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。）

$R^{N111}$  は炭素原子数１～５のアルキル基又は炭素原子数２～５のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基、ブチル基、ビニル基又は１-プロペニル基が好ましい。  
 $R^{N112}$  は炭素原子数１～５のアルキル基、炭素原子数４～５のアルケニル基又は炭素原子数１～４のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

20

【０３３２】

一般式（ $N-1-11$ ）で表される化合物は単独で使用することもできるが、２以上の化合物を組み合わせることもできる。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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。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種類であり、２種類であり、３種類であり、４種類であり、５種類以上である。

【０３３３】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を低めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量を高めに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

30

【０３３４】

本発明の組成物の総量に対しての式（ $N-1-11$ ）で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、５％であり、１０％であり、１３％であり、１５％であり、１７％であり、２０％である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、３５％であり、３０％であり、２８％であり、２５％であり、２３％であり、２０％であり、１８％であり、１５％であり、１３％である。

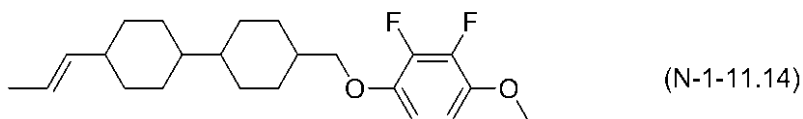
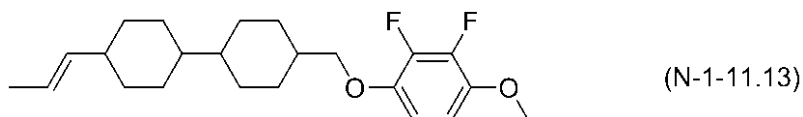
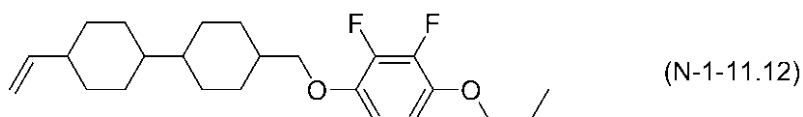
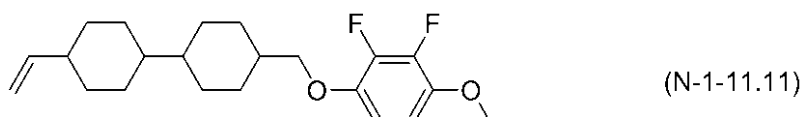
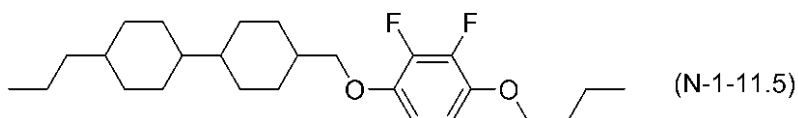
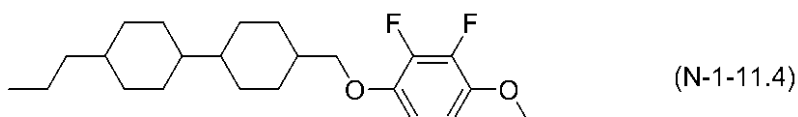
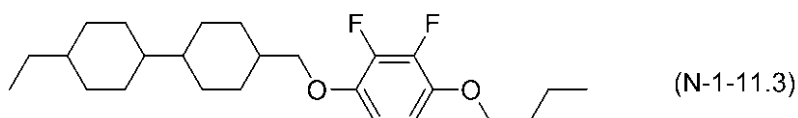
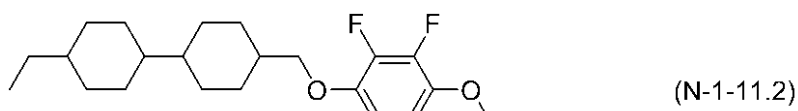
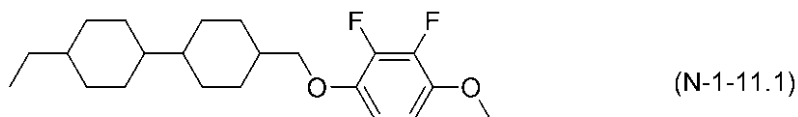
【０３３５】

さらに、一般式（ $N-1-11$ ）で表される化合物は、式（ $N-1-11.1$ ）から式（ $N-1-11.14$ ）で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式（ $N-1-11.1$ ）～（ $N-1-11.14$ ）で表される化合物であることが好ましく、式（ $N-1-11.2$ ）及び式（ $N-1-11.4$ ）で表される化合物が好ましい。

40

【０３３６】

## 【化 1 2 4】



## 【 0 3 3 7 】

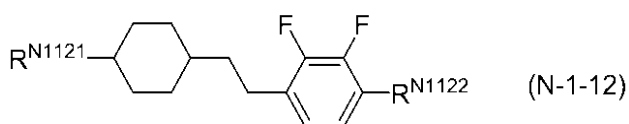
式 (N - 1 - 1 1 . 2) 及び式 (N - 1 - 1 1 . 4) で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対する単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、1 0 % であり、1 3 % であり、1 5 % であり、1 7 % であり、2 0 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、3 5 % であり、3 0 % であり、2 8 % であり、2 5 % であり、2 3 % であり、2 0 % であり、1 8 % であり、1 5 % であり、1 3 % である。

## 【 0 3 3 8 】

一般式 (N - 1 - 1 2) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 3 3 9 】

## 【化 1 2 5】



## 【 0 3 4 0 】

(式中、 $R^{N1121}$  及び  $R^{N1122}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における

10

20

30

40

50



$R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N1121}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 $R^{N1122}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

【0341】

一般式 (N - 1 - 12) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。使用する化合物の種類は、例えば本発明の

10

【0342】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

【0343】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 12) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

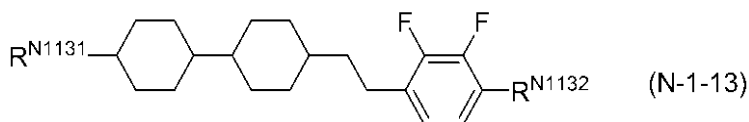
20

【0344】

一般式 (N - 1 - 13) で表される化合物は下記の化合物である。

【0345】

【化126】



30

【0346】

(式中、 $R^{N1131}$  及び  $R^{N1132}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N1131}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 $R^{N1132}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

【0347】

一般式 (N - 1 - 13) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。使用する化合物の種類は、例えば本発明の

40

【0348】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

50

## 【 0 3 4 9 】

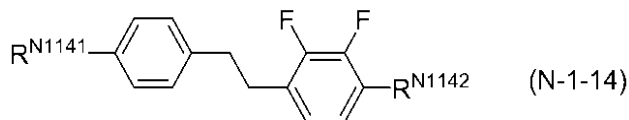
本発明の組成物の総量に対しての式 ( N - 1 - 1 3 ) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

## 【 0 3 5 0 】

一般式 ( N - 1 - 1 4 ) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 3 5 1 】

## 【 化 1 2 7 】



10

## 【 0 3 5 2 】

( 式中、 $R^{N1141}$  及び  $R^{N1142}$  はそれぞれ独立して、一般式 ( N - 1 ) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。 )

$R^{N1141}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 $R^{N1142}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

20

## 【 0 3 5 3 】

一般式 ( N - 1 - 1 4 ) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

## 【 0 3 5 4 】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

30

## 【 0 3 5 5 】

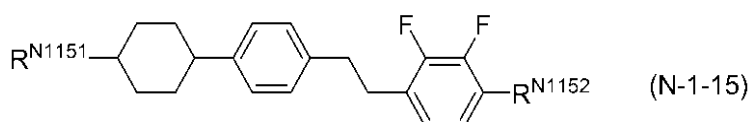
本発明の組成物の総量に対しての式 ( N - 1 - 1 4 ) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

## 【 0 3 5 6 】

一般式 ( N - 1 - 1 5 ) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 3 5 7 】

## 【 化 1 2 8 】



40

## 【 0 3 5 8 】

( 式中、 $R^{N1151}$  及び  $R^{N1152}$  はそれぞれ独立して、一般式 ( N - 1 ) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。 )

50

$R^{N1151}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 $R^{N1152}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

【0359】

一般式 (N - 1 - 15) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

【0360】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

【0361】

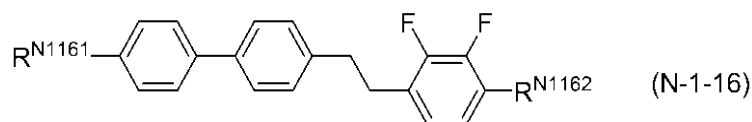
本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 15) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

【0362】

一般式 (N - 1 - 16) で表される化合物は下記の化合物である。

【0363】

【化129】



【0364】

(式中、 $R^{N1161}$  及び  $R^{N1162}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N1161}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 $R^{N1162}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

【0365】

一般式 (N - 1 - 16) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

【0366】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

【0367】

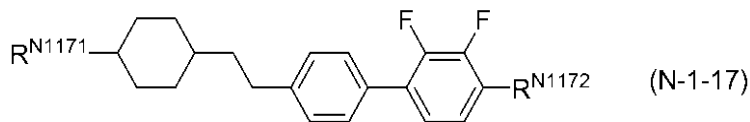
本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 16) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

【0368】

一般式 (N - 1 - 17) で表される化合物は下記の化合物である。

【0369】

【化130】



10

【0370】

(式中、 $R^{N1171}$  及び  $R^{N1172}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N1171}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 $R^{N1172}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

20

【0371】

一般式 (N - 1 - 17) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を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、複屈折率などの求められる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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

【0372】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

30

【0373】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 17) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

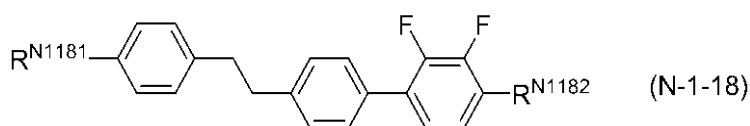
【0374】

一般式 (N - 1 - 18) で表される化合物は下記の化合物である。

40

【0375】

【化131】



【0376】

(式中、 $R^{N1181}$  及び  $R^{N1182}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N1181}$  は炭素原子数 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

50

好ましく、メチル基、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。R<sup>N 1 1 8 2</sup>は炭素原子数1～5のアルキル基、炭素原子数4～5のアルケニル基又は炭素原子数1～4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

【0377】

一般式(N-1-18)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を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、複屈折率などの求められる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種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

10

【0378】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、T<sub>N I</sub>を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

【0379】

本発明の組成物の総量に対しての式(N-1-18)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

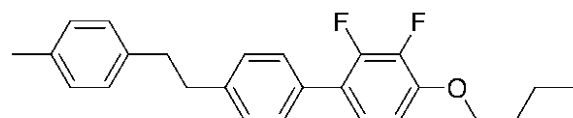
20

【0380】

さらに、一般式(N-1-18)で表される化合物は、式(N-1-18.1)から式(N-1-18.5)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(N-1-18.1)～(N-1-18.3)で表される化合物であることが好ましく、式(N-1-18.2)及び式(N-1-18.3)で表される化合物が好ましい。

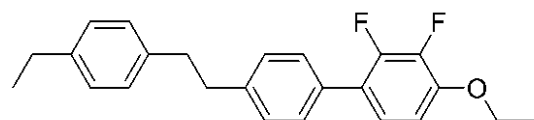
【0381】

【化132】

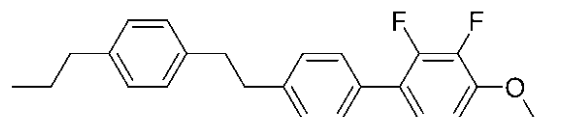


(N-1-18.1)

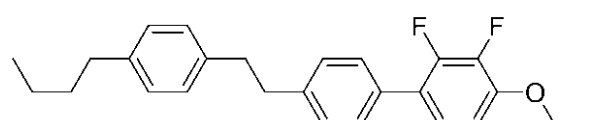
30



(N-1-18.2)

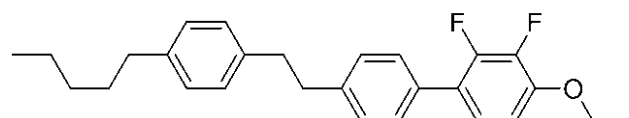


(N-1-18.3)



(N-1-18.4)

40



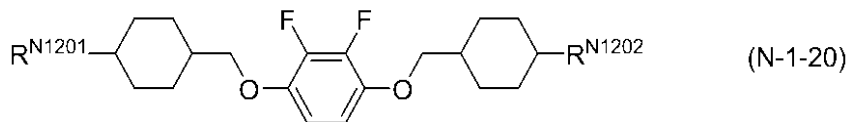
(N-1-18.5)

【0382】

一般式(N-1-20)で表される化合物は下記の化合物である。

【0383】

## 【化 1 3 3】



## 【 0 3 8 4】

(式中、 $R^{N1201}$  及び  $R^{N1202}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

$R^{N1201}$  及び  $R^{N1202}$  はそれぞれ独立して、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。

10

## 【 0 3 8 5】

一般式 (N - 1 - 20) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

## 【 0 3 8 6】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

20

## 【 0 3 8 7】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N - 1 - 20) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

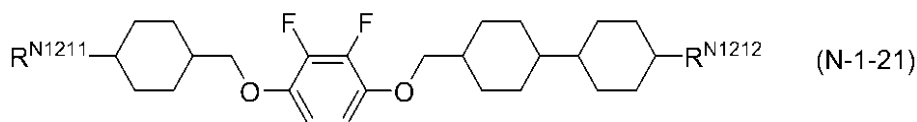
## 【 0 3 8 8】

一般式 (N - 1 - 21) で表される化合物は下記の化合物である。

30

## 【 0 3 8 9】

## 【化 1 3 4】



## 【 0 3 9 0】

(式中、 $R^{N1211}$  及び  $R^{N1212}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 1) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。)

40

$R^{N1211}$  及び  $R^{N1212}$  はそれぞれ独立して、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。

## 【 0 3 9 1】

一般式 (N - 1 - 21) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

50

## 【 0 3 9 2 】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$ を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

## 【 0 3 9 3 】

本発明の組成物の総量に対しての式 ( N - 1 - 2 1 ) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % である。

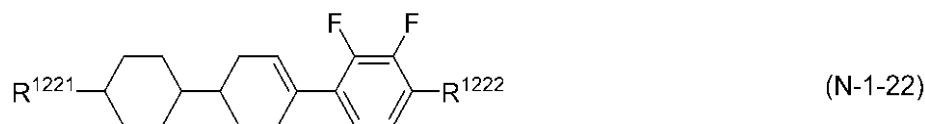
10

## 【 0 3 9 4 】

一般式 ( N - 1 - 2 2 ) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 3 9 5 】

## 【 化 1 3 5 】



## 【 0 3 9 6 】

( 式中、 $R^{N1221}$  及び  $R^{N1222}$  はそれぞれ独立して、一般式 ( N - 1 ) における  $R^{N11}$  及び  $R^{N12}$  と同じ意味を表す。 )

20

$R^{N1221}$  及び  $R^{N1222}$  はそれぞれ独立して、炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。

## 【 0 3 9 7 】

一般式 ( N - 1 - 2 2 ) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

30

## 【 0 3 9 8 】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$ を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

## 【 0 3 9 9 】

本発明の組成物の総量に対しての式 ( N - 1 - 2 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、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり 20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、5 % である。

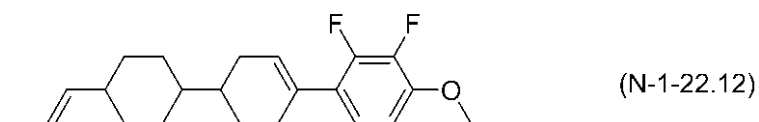
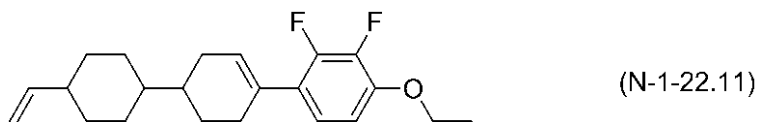
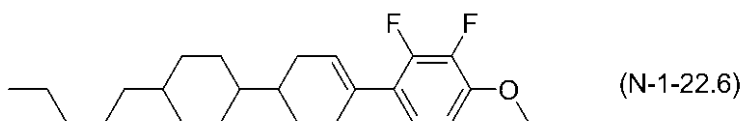
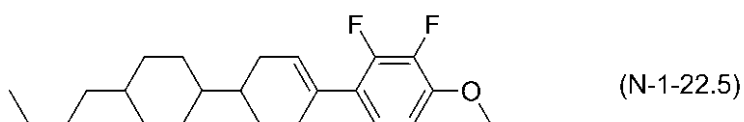
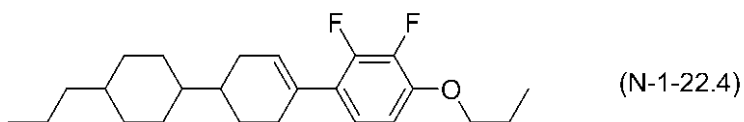
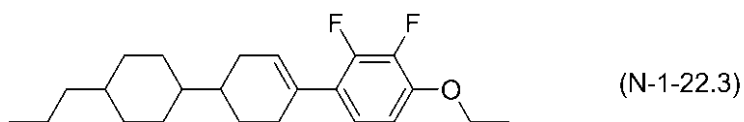
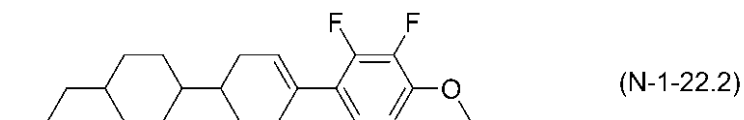
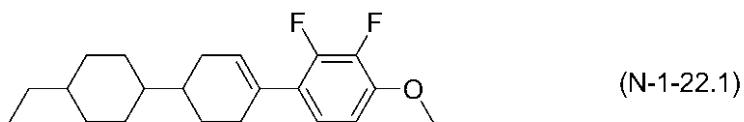
40

## 【 0 4 0 0 】

さらに、一般式 ( N - 1 - 2 2 ) で表される化合物は、式 ( N - 1 - 2 2 . 1 ) から式 ( N - 1 - 2 2 . 1 2 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 ( N - 1 - 2 2 . 1 ) ~ ( N - 1 - 2 2 . 5 ) で表される化合物であることが好ましく、式 ( N - 1 - 2 2 . 1 ) ~ ( N - 1 - 2 2 . 4 ) で表される化合物が好ましい。

## 【 0 4 0 1 】

## 【化 1 3 6】



## 【 0 4 0 2】

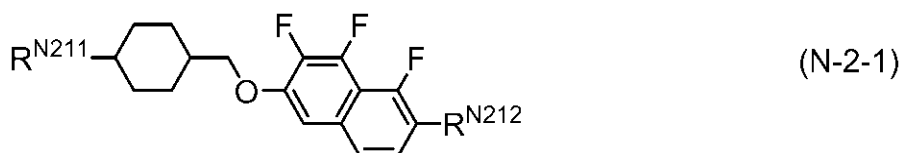
一般式 (N - 2) で表される化合物は、以下の一般式 (N - 2 - 1) ~ (N - 2 - 3) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

## 【 0 4 0 3】

一般式 (N - 2 - 1) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 4 0 4】

## 【化 1 3 7】



## 【 0 4 0 5】

(式中、 $R^{N211}$  及び  $R^{N212}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N - 2) における  $R^{N21}$  及び  $R^{N22}$  と同じ意味を表す。)

一般式 (N - 2 - 2) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 4 0 6】

10

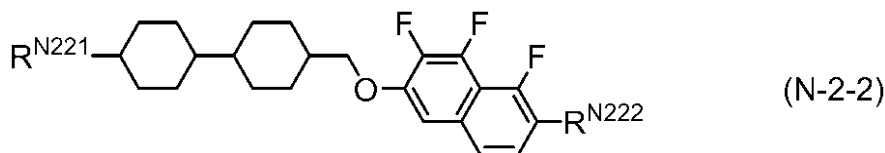
20

30

40



## 【化 1 3 8】



## 【 0 4 0 7】

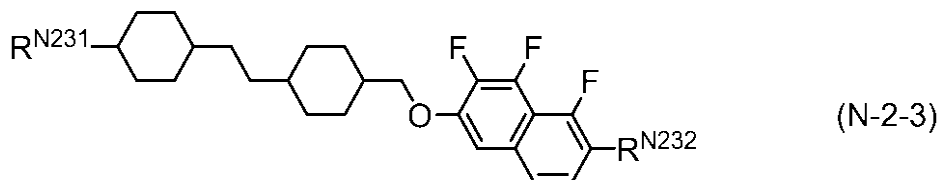
(式中、 $R^{N221}$  及び  $R^{N222}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N-2) における  $R^{N21}$  及び  $R^{N22}$  と同じ意味を表す。)

一般式 (N-2-3) で表される化合物は下記の化合物である。

10

## 【 0 4 0 8】

## 【化 1 3 9】



## 【 0 4 0 9】

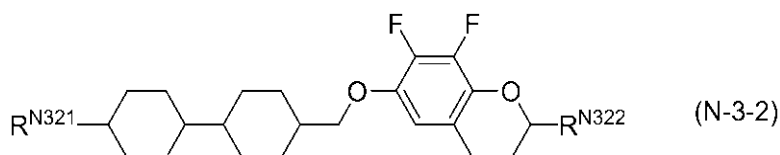
(式中、 $R^{N231}$  及び  $R^{N232}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N-2) における  $R^{N21}$  及び  $R^{N22}$  と同じ意味を表す。)

20

一般式 (N-3) で表される化合物は一般式 (N-3-2) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

## 【 0 4 1 0】

## 【化 1 4 0】



## 【 0 4 1 1】

(式中、 $R^{N321}$  及び  $R^{N322}$  はそれぞれ独立して、一般式 (N-3) における  $R^{N31}$  及び  $R^{N32}$  と同じ意味を表す。)

30

$R^{N321}$  及び  $R^{N322}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、プロピル基又はペンチル基が好ましい。

## 【 0 4 1 2】

一般式 (N-3-2) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

40

## 【 0 4 1 3】

の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 $T_{NI}$  を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

## 【 0 4 1 4】

本発明の組成物の総量に対しての式 (N-3-2) で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、3 % であり、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % であり、23 % であり、25 % であり、27 % であり、30 % であり

50

、 33%であり、35%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、50%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%である。

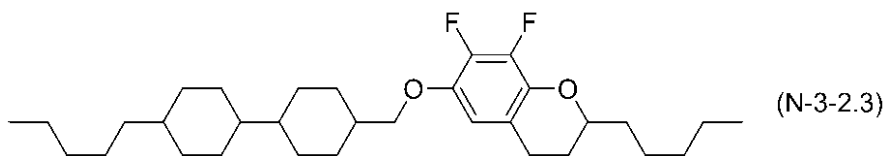
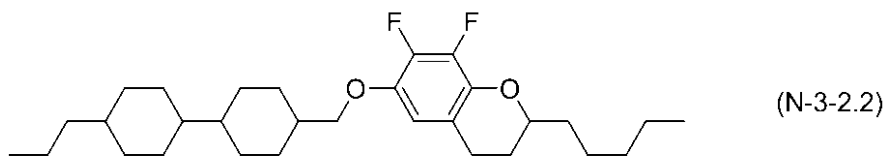
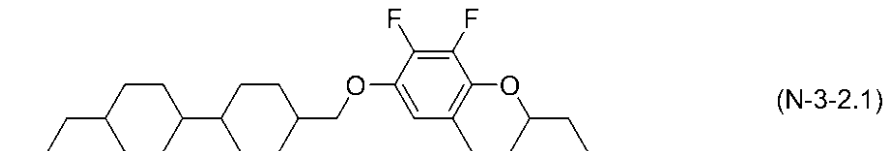
【0415】

さらに、一般式(N-3-2)で表される化合物は、式(N-3-2.1)から式(N-3-2.3)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

【0416】

【化141】

10



20

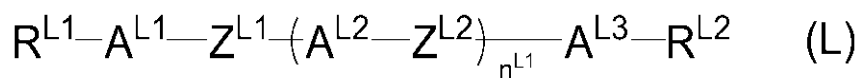
【0417】

本発明に係る液晶組成物は、一般式(I)で表される化合物以外に、一般式(L)で表される化合物を1種類又は2種類以上含有することが好ましい。一般式(L)で表される化合物は誘電的にほぼ中性の化合物( の値が-2~2)に該当する。

【0418】

30

【化142】



【0419】

(式中、 $R^{L1}$ 及び $R^{L2}$ はそれぞれ独立して炭素原子数1~8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 $-CH=CH-$ 、 $-C(C)-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ によって置換されていてもよく、

$n^{L1}$ は0、1、2又は3を表し、

40

$A^{L1}$ 、 $A^{L2}$ 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 $-O-$ に置き換えられてもよい。)

(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 $-N=$ に置き換えられてもよい。)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 $-N=$ に置き換えられてもよい。)

50

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 (N-1)、(N-2) 及び (N-3) で表される化合物を除く。)

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。

10

#### 【0420】

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。

20

#### 【0421】

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%である。

#### 【0422】

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。

30

#### 【0423】

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。

#### 【0424】

分子内に存在するハロゲン原子は 0、1、2 又は 3 個が好ましく、0 又は 1 が好ましく、他の液晶分子との相溶性を重視する場合には 1 が好ましい。

40

#### 【0425】

$R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  の結合する環構造がフェニル基 (芳香族) である場合には、 $R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  はそれぞれ独立して、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、 $R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  の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、 $R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  はそれぞれ独立して、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。

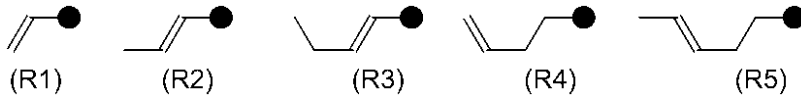
#### 【0426】

50

アルケニル基としては、式 ( R 1 ) から式 ( R 5 ) 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 4 2 7 】

【 化 1 4 3 】



【 0 4 2 8 】

$n^{L1}$  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。

10

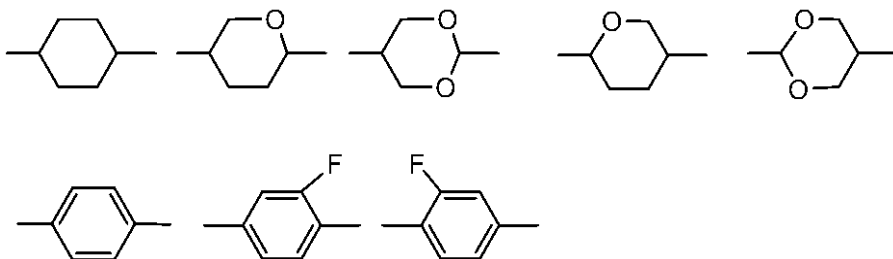
【 0 4 2 9 】

$A^{L1}$ 、 $A^{L2}$  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、

20

【 0 4 3 0 】

【 化 1 4 4 】



30

【 0 4 3 1 】

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 4 3 2 】

$Z^{L1}$  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 4 3 3 】

一般式 ( L ) で表される化合物は分子内のハロゲン原子数が 0 個又は 1 個であることが好ましい。当該ハロゲン原子としてはフッ素原子または塩素原子が好ましく、フッ素原子がより好ましい。

【 0 4 3 4 】

40

一般式 ( L ) で表される化合物は一般式 ( L - 1 ) ~ ( L - 7 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

【 0 4 3 5 】

一般式 ( L - 1 ) で表される化合物は下記の化合物である。

【 0 4 3 6 】

【 化 1 4 5 】



【 0 4 3 7 】

50

(式中、 $R^{L11}$  及び  $R^{L12}$  はそれぞれ独立して、一般式 (L) における  $R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  と同じ意味を表す。)

$R^{L11}$  及び  $R^{L12}$  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。

【0438】

一般式 (L-1) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせることもできる。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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

【0439】

好ましい含有量の下限値は、本発明の組成物の総量に対して、1 % であり、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % であり、10 % であり、15 % であり、20 % であり、25 % であり、30 % であり、35 % であり、40 % であり、45 % であり、50 % であり、55 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、95 % であり、90 % であり、85 % であり、80 % であり、75 % であり、70 % であり、65 % であり、60 % であり、55 % であり、50 % であり、45 % であり、40 % であり、35 % であり、30 % であり、25 % である。

【0440】

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中庸で上限値が中庸であることが好ましい。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、上記の下限値が低く上限値が低いことが好ましい。

【0441】

一般式 (L-1) で表される化合物は一般式 (L-1-1) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

【0442】

【化146】



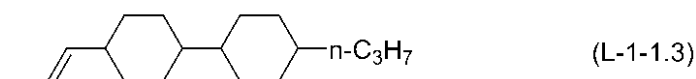
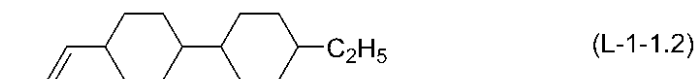
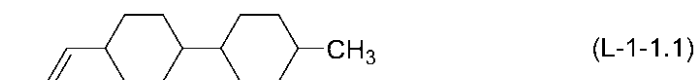
【0443】

(式中  $R^{L12}$  は一般式 (L-1) における意味と同じ意味を表す。)

一般式 (L-1-1) で表される化合物は、式 (L-1-1.1) から式 (L-1-1.3) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (L-1-1.2) 又は式 (L-1-1.3) で表される化合物であることが好ましく、特に、式 (L-1-1.3) で表される化合物であることが好ましい。

【0444】

【化147】



【0445】

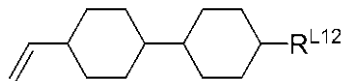
本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-1.3) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%であり、3%である。

【0446】

一般式 (L-1) で表される化合物は一般式 (L-1-2) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

【0447】

【化148】



(L-1-2)

【0448】

(式中  $R^{L12}$  は一般式 (L-1) における意味と同じ意味を表す。)

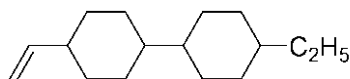
本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-2) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、5%であり、10%であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、35%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、42%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%である。

【0449】

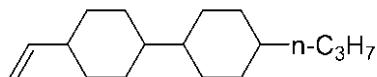
さらに、一般式 (L-1-2) で表される化合物は、式 (L-1-2.1) から式 (L-1-2.4) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (L-1-2.2) から式 (L-1-2.4) で表される化合物であることが好ましい。特に、式 (L-1-2.2) で表される化合物は本発明の組成物の応答速度を特に改善するため好ましい。また、応答速度よりも高い  $T_{ni}$  を求めるときは、式 (L-1-2.3) 又は式 (L-1-2.4) で表される化合物を用いることが好ましい。式 (L-1-2.3) 及び式 (L-1-2.4) で表される化合物の含有量は、低温での溶解度を良くするために30%以上にすることは好ましくない。

【0450】

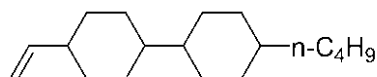
【化149】



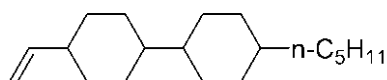
(L-1-2.1)



(L-1-2.2)



(L-1-2.3)



(L-1-2.4)

【0451】

本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-2.2) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、10%であり、15%であり、18%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、33%であり、35%であり、38%であり、40%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、43%であり、40%であり、38%であり、35%であり、32%であり、30%であり、27%であり、25%であり、22%である。

## 【 0 4 5 2 】

本発明の組成物の総量に対しての式 ( L - 1 - 1 . 3 ) で表される化合物及び式 ( L - 1 - 2 . 2 ) で表される化合物の合計の好ましい含有量の下限値は、 1 0 % であり、 1 5 % であり、 2 0 % であり、 2 5 % であり、 2 7 % であり、 3 0 % であり、 3 5 % であり、 4 0 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、 6 0 % であり、 5 5 % であり、 5 0 % であり、 4 5 % であり、 4 3 % であり、 4 0 % であり、 3 8 % であり、 3 5 % であり、 3 2 % であり、 3 0 % であり、 2 7 % であり、 2 5 % であり、 2 2 % である。

## 【 0 4 5 3 】

一般式 ( L - 1 ) で表される化合物は一般式 ( L - 1 - 3 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

## 【 0 4 5 4 】

## 【 化 1 5 0 】



## 【 0 4 5 5 】

( 式中  $R^{L13}$  及び  $R^{L14}$  はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基又は炭素原子数 1 ~ 8 のアルコキシ基を表す。 )

$R^{L13}$  及び  $R^{L14}$  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。

## 【 0 4 5 6 】

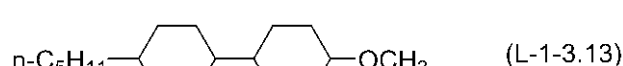
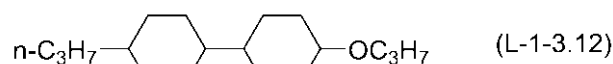
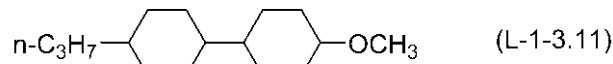
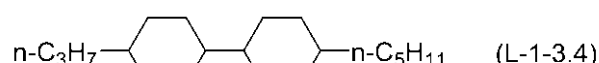
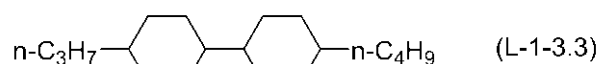
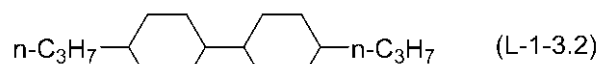
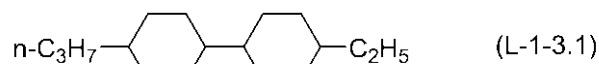
本発明の組成物の総量に対しての式 ( L - 1 - 3 ) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、 1 % であり、 5 % であり、 1 0 % であり、 1 3 % であり、 1 5 % であり、 1 7 % であり、 2 0 % であり、 2 3 % であり、 2 5 % であり、 3 0 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、 6 0 % であり、 5 5 % であり、 5 0 % であり、 4 5 % であり、 4 0 % であり、 3 7 % であり、 3 5 % であり、 3 3 % であり、 3 0 % であり、 2 7 % であり、 2 5 % であり、 2 3 % であり、 2 0 % であり、 1 7 % であり、 1 5 % であり、 1 3 % であり、 1 0 % である。

## 【 0 4 5 7 】

さらに、一般式 ( L - 1 - 3 ) で表される化合物は、式 ( L - 1 - 3 . 1 ) から式 ( L - 1 - 3 . 1 3 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 ( L - 1 - 3 . 1 )、式 ( L - 1 - 3 . 3 ) 又は式 ( L - 1 - 3 . 4 ) で表される化合物であることが好ましい。特に、式 ( L - 1 - 3 . 1 ) で表される化合物は本発明の組成物の応答速度を特に改善するため好ましい。また、応答速度よりも高い  $T_{ni}$  を求めるときは、式 ( L - 1 - 3 . 3 )、式 ( L - 1 - 3 . 4 )、式 ( L - 1 - 3 . 1 1 ) 及び式 ( L - 1 - 3 . 1 2 ) で表される化合物を用いることが好ましい。式 ( L - 1 - 3 . 3 )、式 ( L - 1 - 3 . 4 )、式 ( L - 1 - 3 . 1 1 ) 及び式 ( L - 1 - 3 . 1 2 ) で表される化合物の合計の含有量は、低温での溶解度を良くするために 2 0 % 以上にすることは好ましくない。

## 【 0 4 5 8 】

## 【化 1 5 1】



## 【 0 4 5 9】

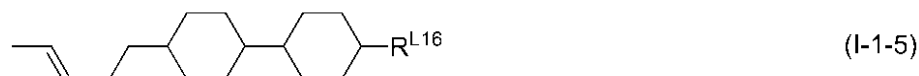
本発明の組成物の総量に対しての式 ( L - 1 - 3 . 1 ) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1 % であり、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、18 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、20 % であり、17 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、8 % であり、7 % であり、6 % である。

## 【 0 4 6 0】

一般式 ( L - 1 ) で表される化合物は一般式 ( L - 1 - 4 ) 及び / 又は ( L - 1 - 5 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

## 【 0 4 6 1】

## 【化 1 5 2】



## 【 0 4 6 2】

( 式中  $\text{R}^{\text{L15}}$  及び  $\text{R}^{\text{L16}}$  はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基又は炭素原子数 1 ~ 8 のアルコキシ基を表す。 )

$\text{R}^{\text{L15}}$  及び  $\text{R}^{\text{L16}}$  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。

## 【 0 4 6 3】

本発明の組成物の総量に対しての式 ( L - 1 - 4 ) 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、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、25 % であり、23 % であり、20 % であり、17 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % である。

## 【 0 4 6 4】

本発明の組成物の総量に対しての式 ( L - 1 - 5 ) 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、5 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、17 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、25 % であり、23 % であり、20 % であり、17 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % である。

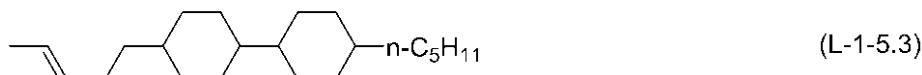
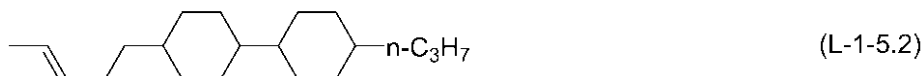
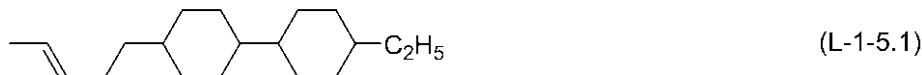
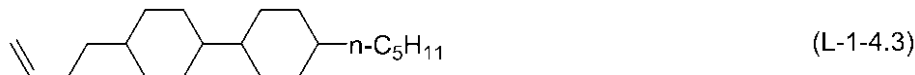
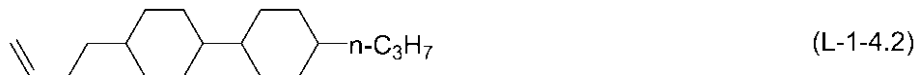


## 【 0 4 6 5 】

さらに、一般式 ( L - 1 - 4 ) 及び ( L - 1 - 5 ) で表される化合物は、式 ( L - 1 - 4 . 1 ) から式 ( L - 1 - 5 . 3 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 ( L - 1 - 4 . 2 ) 又は式 ( L - 1 - 5 . 2 ) で表される化合物であることが好ましい。

## 【 0 4 6 6 】

## 【 化 1 5 3 】



## 【 0 4 6 7 】

本発明の組成物の総量に対しての式 ( L - 1 - 4 . 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、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、18 % であり、20 % である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、20 % であり、17 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、8 % であり、7 % であり、6 % である。

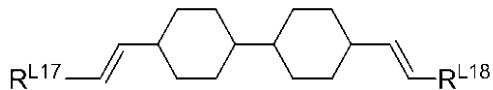
## 【 0 4 6 8 】

式 ( L - 1 - 1 . 3 )、式 ( L - 1 - 2 . 2 )、式 ( L - 1 - 3 . 1 )、式 ( L - 1 - 3 . 3 )、式 ( L - 1 - 3 . 4 )、式 ( L - 1 - 3 . 1 1 ) 及び式 ( L - 1 - 3 . 1 2 ) で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましく、式 ( L - 1 - 1 . 3 )、式 ( L - 1 - 2 . 2 )、式 ( L - 1 - 3 . 1 )、式 ( L - 1 - 3 . 3 )、式 ( L - 1 - 3 . 4 ) 及び式 ( L - 1 - 4 . 2 ) で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましく、これら化合物の合計の含有量の好ましい含有量の下限値は、本発明の組成物の総量に対して、1 % であり、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % であり、10 % であり、13 % であり、15 % であり、18 % であり、20 % であり、23 % であり、25 % であり、27 % であり、30 % であり、33 % であり、35 % であり、上限値は、本発明の組成物の総量に対して、80 % であり、70 % であり、60 % であり、50 % であり、45 % であり、40 % であり、37 % であり、35 % であり、33 % であり、30 % であり、28 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % である。組成物の信頼性を重視する場合には、式 ( L - 1 - 3 . 1 )、式 ( L - 1 - 3 . 3 ) 及び式 ( L - 1 - 3 . 4 ) で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましく、組成物の応答速度を重視する場合には、式 ( L - 1 - 1 . 3 )、式 ( L - 1 - 2 . 2 ) で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましい。

一般式 ( L - 1 ) で表される化合物は一般式 ( L - 1 - 6 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

## 【 0 4 6 9 】

## 【化 1 5 4】



(L-1-6)

## 【 0 4 7 0】

(式中  $R^{L17}$  及び  $R^{L18}$  はそれぞれ独立してメチル基又は水素原子を表す。)

本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-6) 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、5%であり、10%であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、35%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、42%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%である。

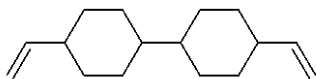
10

## 【 0 4 7 1】

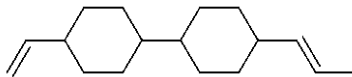
さらに、一般式 (L-1-6) で表される化合物は、式 (L-1-6.1) から式 (L-1-6.3) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

## 【 0 4 7 2】

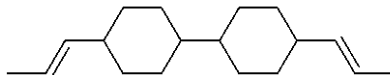
## 【化 1 5 5】



(L-1-6.1)



(L-1-6.2)



(L-1-6.3)

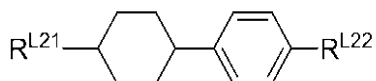
20

## 【 0 4 7 3】

一般式 (L-2) で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 4 7 4】

## 【化 1 5 6】



(L-2)

30

## 【 0 4 7 5】

(式中、 $R^{L21}$  及び  $R^{L22}$  はそれぞれ独立して、一般式 (L) における  $R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  と同じ意味を表す。)

$R^{L21}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、 $R^{L22}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましい。

## 【 0 4 7 6】

一般式 (L-1) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

40

## 【 0 4 7 7】

低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、反対に、応答速度を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

## 【 0 4 7 8】

本発明の組成物の総量に対しての式 (L-2) で表される化合物の好ましい含有量の下

50

限値は、１％であり、２％であり、３％であり、５％であり、７％であり、１０％である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、２０％であり、１５％であり、１３％であり、１０％であり、８％であり、７％であり、６％であり、５％であり、３％である。

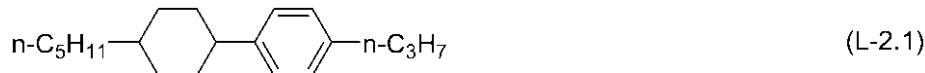
【０４７９】

さらに、一般式（Ｌ－２）で表される化合物は、式（Ｌ－２．１）から式（Ｌ－２．６）で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式（Ｌ－２．１）、式（Ｌ－２．３）、式（Ｌ－２．４）及び式（Ｌ－２．６）で表される化合物であることが好ましい。

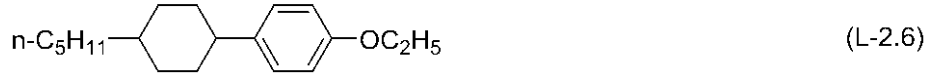
【０４８０】

10

【化１５７】



20



【０４８１】

一般式（Ｌ－３）で表される化合物は下記の化合物である。

【０４８２】

【化１５８】

30



【０４８３】

（式中、 $\text{R}^{\text{L}31}$  及び  $\text{R}^{\text{L}32}$  はそれぞれ独立して、一般式（Ｌ）における  $\text{R}^{\text{L}1}$  及び  $\text{R}^{\text{L}2}$  と同じ意味を表す。）

$\text{R}^{\text{L}31}$  及び  $\text{R}^{\text{L}32}$  はそれぞれ独立して炭素原子数１～５のアルキル基、炭素原子数４～５のアルケニル基又は炭素原子数１～４のアルコキシ基が好ましい。

【０４８４】

一般式（Ｌ－３）で表される化合物は単独で使用することもできるが、２以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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種類であり、２種類であり、３種類であり、４種類であり、５種類以上である。

40

【０４８５】

本発明の組成物の総量に対しての式（Ｌ－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、２％であり、３％であり、５％であり、７％であり、１０％である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、２０％であり、１５％であり、１３％であり、１０％であり、８％であり、７％であり、６％であり、５％であり

50

、 3 % である。

【 0 4 8 6 】

高い複屈折率を得る場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、反対に、高い  $T_{ni}$  を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

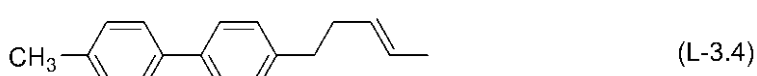
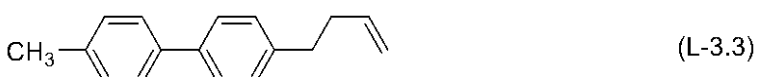
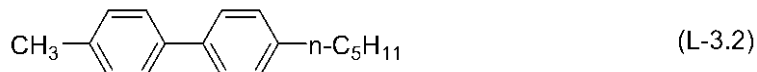
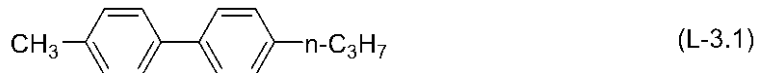
【 0 4 8 7 】

さらに、一般式 ( L - 3 ) で表される化合物は、式 ( L - 3 . 1 ) から式 ( L - 3 . 7 ) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 ( L - 3 . 2 ) から式 ( L - 3 . 7 ) で表される化合物であることが好ましい。

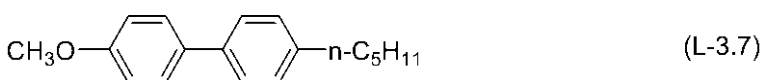
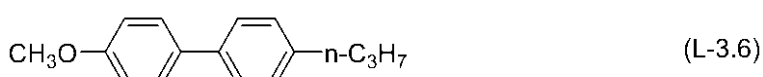
【 0 4 8 8 】

10

【 化 1 5 9 】



20



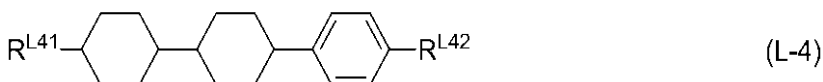
【 0 4 8 9 】

一般式 ( L - 4 ) で表される化合物は下記の化合物である。

【 0 4 9 0 】

【 化 1 6 0 】

30



【 0 4 9 1 】

( 式中、 $\text{R}^{\text{L41}}$  及び  $\text{R}^{\text{L42}}$  はそれぞれ独立して、一般式 ( L ) における  $\text{R}^{\text{L1}}$  及び  $\text{R}^{\text{L2}}$  と同じ意味を表す。 )

$\text{R}^{\text{L41}}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基又は炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、 $\text{R}^{\text{L42}}$  は炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基が好ましい。 )

一般式 ( L - 4 ) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

40

【 0 4 9 2 】

本発明の組成物において、一般式 ( L - 4 ) 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 4 9 3 】

50

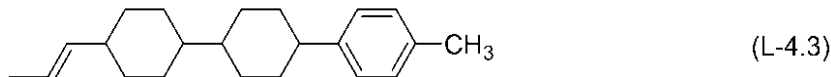
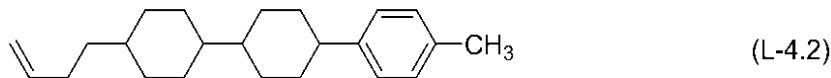
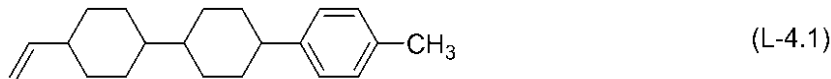
本発明の組成物の総量に対しての式(L-4)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、14%であり、16%であり、20%であり、23%であり、26%であり、30%であり、35%であり、40%である。本発明の組成物の総量に対しての式(L-4)で表される化合物の好ましい含有量の上限值は、50%であり、40%であり、35%であり、30%であり、20%であり、15%であり、10%であり、5%である。

【0494】

一般式(L-4)で表される化合物は、例えば式(L-4.1)から式(L-4.3)で表される化合物であることが好ましい。

【0495】

【化161】



【0496】

低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて、式(L-4.1)で表される化合物を含有していても、式(L-4.2)で表される化合物を含有していても、式(L-4.1)で表される化合物と式(L-4.2)で表される化合物との両方を含有していても良いし、式(L-4.1)から式(L-4.3)で表される化合物を全て含んでも良い。本発明の組成物の総量に対しての式(L-4.1)又は式(L-4.2)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、3%であり、5%であり、7%であり、9%であり、11%であり、12%であり、13%であり、18%であり、21%であり、好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%である。

【0497】

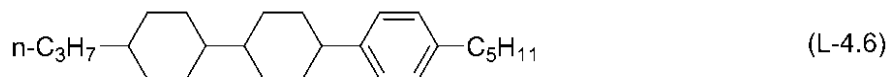
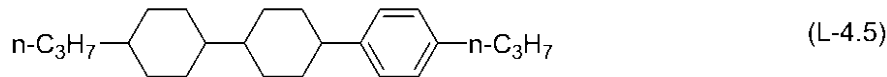
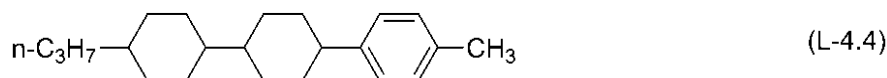
式(L-4.1)で表される化合物と式(L-4.2)で表される化合物との両方を含有する場合は、本発明の組成物の総量に対しての両化合物の好ましい含有量の下限値は、15%であり、19%であり、24%であり、30%であり、好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

【0498】

一般式(L-4)で表される化合物は、例えば式(L-4.4)から式(L-4.6)で表される化合物であることが好ましく、式(L-4.4)で表される化合物であることが好ましい。

【0499】

【化162】



【0500】

10

20

30

40

50

低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて、式(L-4.4)で表される化合物を含有していても、式(L-4.5)で表される化合物を含有していても、式(L-4.4)で表される化合物と式(L-4.5)で表される化合物との両方を含有していても良い。

【0501】

本発明の組成物の総量に対しての式(L-4.4)又は式(L-4.5)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、3%であり、5%であり、7%であり、9%であり、11%であり、12%であり、13%であり、18%であり、21%である。好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%である。

10

【0502】

式(L-4.4)で表される化合物と式(L-4.5)で表される化合物との両方を含有する場合は、本発明の組成物の総量に対しての両化合物の好ましい含有量の下限値は、15%であり、19%であり、24%であり、30%であり、好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

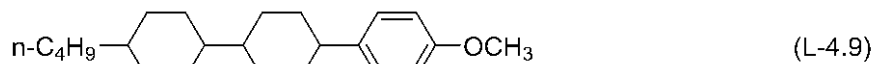
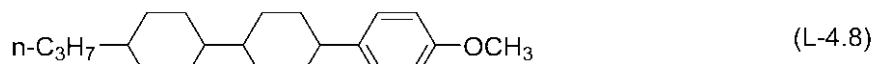
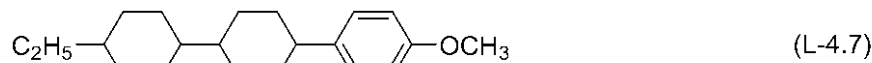
【0503】

一般式(L-4)で表される化合物は、式(L-4.7)から式(L-4.10)で表される化合物であることが好ましく、特に、式(L-4.9)で表される化合物が好ましい。

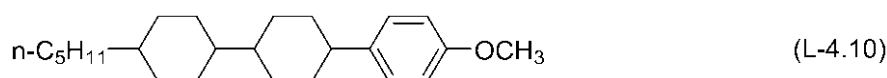
20

【0504】

【化163】



30

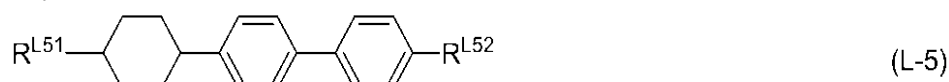


【0505】

一般式(L-5)で表される化合物は下記の化合物である。

【0506】

【化164】



40

【0507】

(式中、 $\text{R}^{\text{L}51}$ 及び $\text{R}^{\text{L}52}$ はそれぞれ独立して、一般式(L)における $\text{R}^{\text{L}1}$ 及び $\text{R}^{\text{L}2}$ と同じ意味を表す。)

$\text{R}^{\text{L}51}$ は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、 $\text{R}^{\text{L}52}$ は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましい。

【0508】

一般式(L-5)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ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、複屈折率などの求められる性

50

能に応じて適宜組み合わせる使用。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

【0509】

本発明の組成物において、一般式 (L-5) 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。

【0510】

本発明の組成物の総量に対しての式 (L-5) 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、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % であり、10 % であり、14 % であり、16 % であり、20 % であり、23 % であり、26 % であり、30 % であり、35 % であり、40 % である。本発明の組成物の総量に対しての式 (L-5) で表される化合物の好ましい含有量の上限値は、50 % であり、40 % であり、35 % であり、30 % であり、20 % であり、15 % であり、10 % であり、5 % である。

10

【0511】

一般式 (L-5) で表される化合物は、式 (L-5.1) 又は式 (L-5.2) で表される化合物であることが好ましく、特に、式 (L-5.1) で表される化合物であることが好ましい。

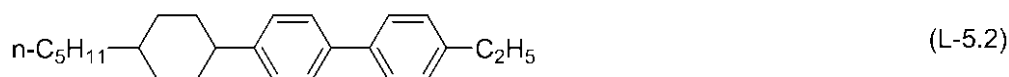
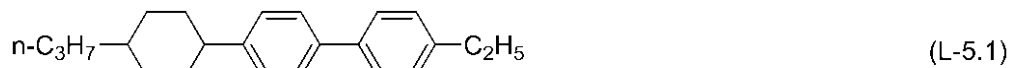
【0512】

本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、1 % であり、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % である。これら化合物の好ましい含有量の上限値は、20 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、9 % である。

20

【0513】

【化165】



【0514】

一般式 (L-5) で表される化合物は、式 (L-5.3) 又は式 (L-5.4) で表される化合物であることが好ましい。

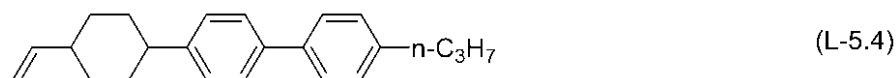
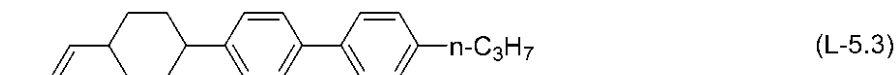
30

【0515】

本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、1 % であり、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % である。これら化合物の好ましい含有量の上限値は、20 % であり、15 % であり、13 % であり、10 % であり、9 % である。

【0516】

【化166】



40

【0517】

一般式 (L-5) で表される化合物は、式 (L-5.5) から式 (L-5.7) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、特に式 (L-5.7) で表される化合物であることが好ましい。

【0518】

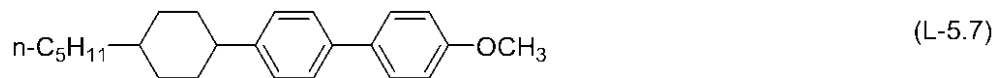
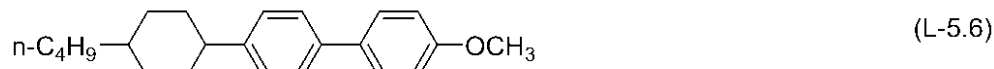
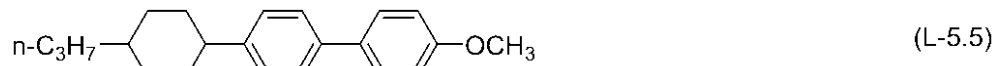
本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、1 % であり、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % である。これら化合物の好ましい含有量

50

の上限値は、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、9%である。

【0519】

【化167】



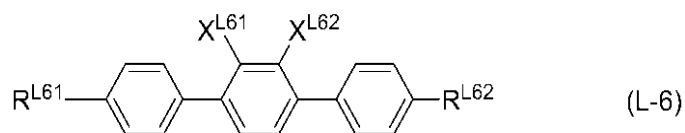
10

【0520】

一般式(L-6)で表される化合物は下記の化合物である。

【0521】

【化168】



【0522】

(式中、 $\text{R}^{\text{L61}}$ 及び $\text{R}^{\text{L62}}$ はそれぞれ独立して、一般式(L)における $\text{R}^{\text{L1}}$ 及び $\text{R}^{\text{L2}}$ と同じ意味を表し、 $\text{X}^{\text{L61}}$ 及び $\text{X}^{\text{L62}}$ はそれぞれ独立して水素原子又はフッ素原子を表す。)

20

$\text{R}^{\text{L61}}$ 及び $\text{R}^{\text{L62}}$ はそれぞれ独立して炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、 $\text{X}^{\text{L61}}$ 及び $\text{X}^{\text{L62}}$ のうち一方がフッ素原子他方が水素原子であることが好ましい。

【0523】

一般式(L-6)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。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、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。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種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

30

【0524】

本発明の組成物の総量に対しての式(L-6)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、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、14%であり、16%であり、20%であり、23%であり、26%であり、30%であり、35%であり、40%である。本発明の組成物の総量に対しての式(L-6)で表される化合物の好ましい含有量の上限値は、50%であり、40%であり、35%であり、30%であり、20%であり、15%であり、10%であり、5%である。nを大きくすることに重点を置く場合には含有量を多くした方が好ましく、低温での析出に重点を置いた場合には含有量は少ない方が好ましい。

40

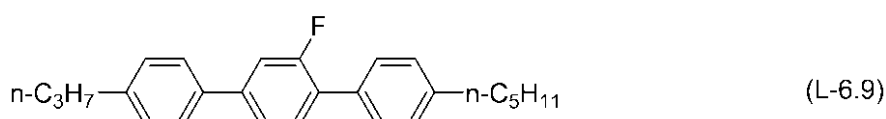
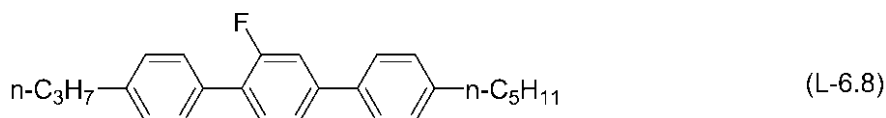
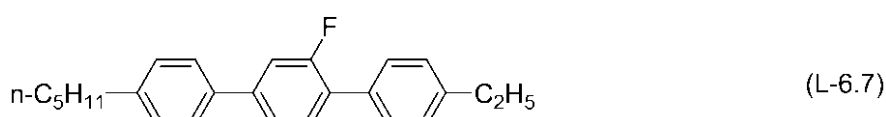
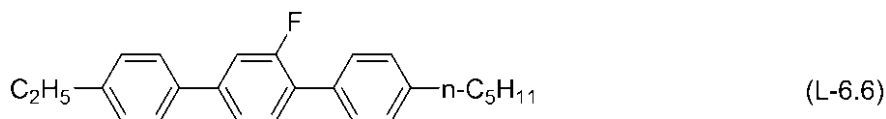
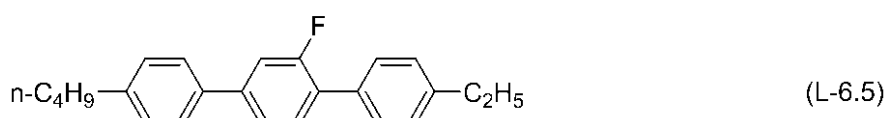
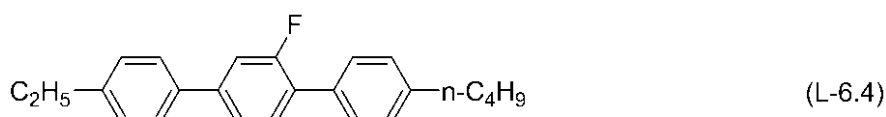
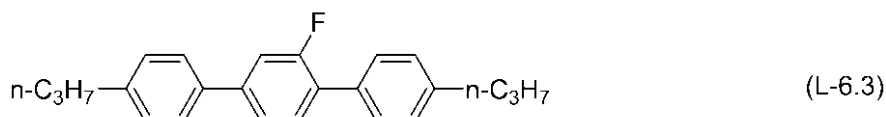
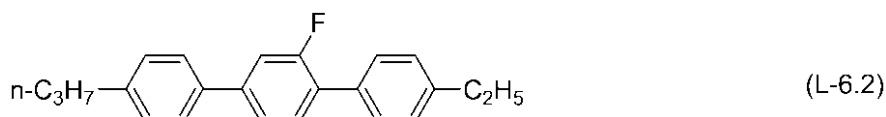
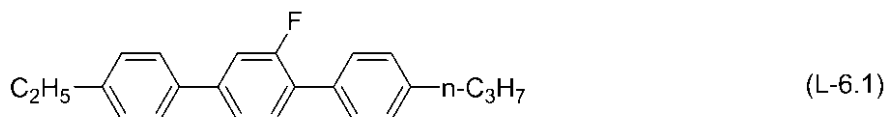
【0525】

一般式(L-6)で表される化合物は、式(L-6.1)から式(L-6.9)で表される化合物であることが好ましい。

【0526】



## 【化 1 6 9】



## 【 0 5 2 7 】

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、これらの化合物の中から 1 種 ~ 3 種類含有することが好ましく、1 種 ~ 4 種類含有することがさらに好ましい。また、選ぶ化合物の分子量分布が広いことも溶解性に有効であるため、例えば、式 (L - 6 . 1) 又は (L - 6 . 2) で表される化合物から 1 種類、式 (L - 6 . 4) 又は (L - 6 . 5) で表される化合物から 1 種類、式 (L - 6 . 6) 又は式 (L - 6 . 7) で表される化合物から 1 種類、式 (L - 6 . 8) 又は (L - 6 . 9) で表される化合物から 1 種類の化合物を選び、これらを適宜組み合わせることが好ましい。その中でも、式 (L - 6 . 1)、式 (L - 6 . 3) 式 (L - 6 . 4)、式 (L - 6 . 6) 及び式 (L - 6 . 9) で表される化合物を含むことが好ましい。

## 【 0 5 2 8 】

さらに、一般式 (L - 6) で表される化合物は、例えば式 (L - 6 . 10) から式 (L - 6 . 17) で表される化合物であることが好ましく、その中でも、式 (L - 6 . 11) で表される化合物であることが好ましい。

## 【 0 5 2 9 】

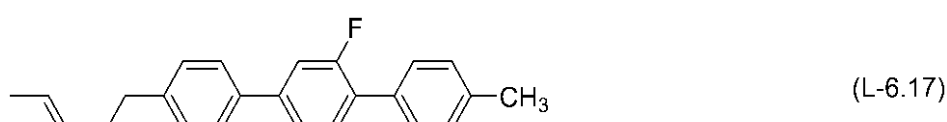
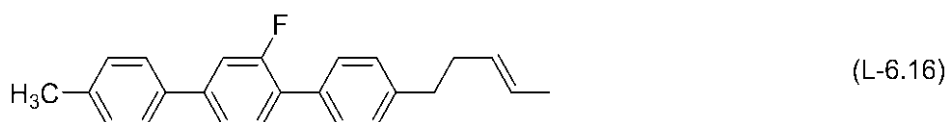
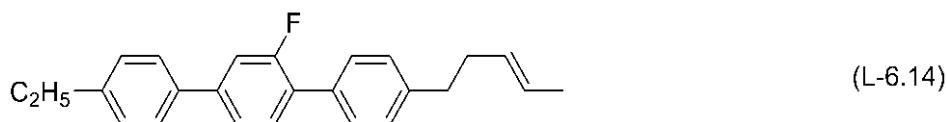
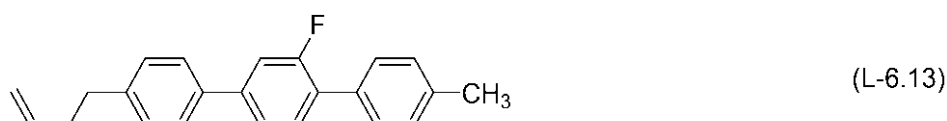
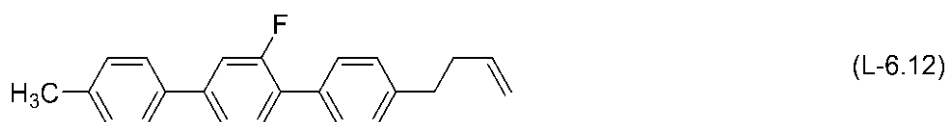
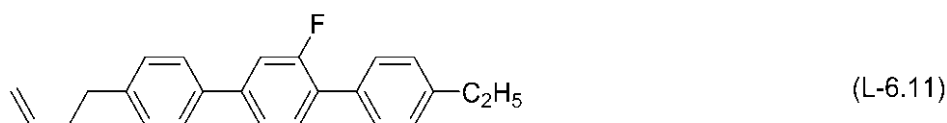
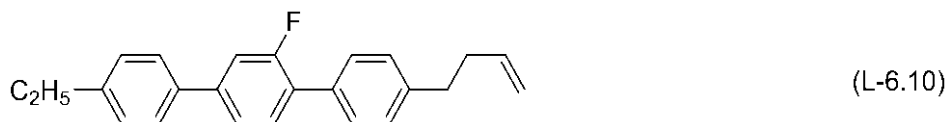
10

20

30

40

## 【化 1 7 0】



## 【 0 5 3 0】

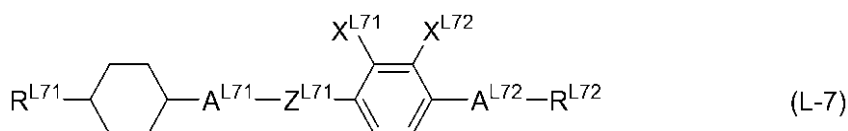
本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限值は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%である。これら化合物の好ましい含有量の上限值は、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、9%である。

## 【 0 5 3 1】

一般式(L-7)で表される化合物は下記の化合物である。

## 【 0 5 3 2】

## 【化 1 7 1】



## 【 0 5 3 3】

(式中、 $R^{L71}$  及び  $R^{L72}$  はそれぞれ独立して一般式(L)における  $R^{L1}$  及び  $R^{L2}$  と同じ意味を表し、 $A^{L71}$  及び  $A^{L72}$  はそれぞれ独立して一般式(L)における  $A^{L2}$  及び  $A^{L3}$  と同じ意味を表すが、 $A^{L71}$  及び  $A^{L72}$  上の水素原子はそれぞれ独立してフッ素原子によって置換されていてもよく、 $Z^{L71}$  は一般式(L)における  $Z^{L2}$  と同じ意味を表し、 $X^{L71}$  及び  $X^{L72}$  はそれぞれ独立してフッ素原子又は水素原子を表す。)

式中、 $R^{L71}$  及び  $R^{L72}$  はそれぞれ独立して炭素原子数1~5のアルキル基、炭素

10

20

30

40

50

原子数 2 ～ 5 のアルケニル基又は炭素原子数 1 ～ 4 のアルコキシ基が好ましく、 $A^{L71}$  及び  $A^{L72}$  はそれぞれ独立して 1, 4 - シクロヘキシレン基又は 1, 4 - フェニレン基が好ましく、 $A^{L71}$  及び  $A^{L72}$  上の水素原子はそれぞれ独立してフッ素原子によって置換されていてもよく、 $Z^{L71}$  は単結合又は - C O O - が好ましく、単結合が好ましく、 $X^{L71}$  及び  $X^{L72}$  は水素原子が好ましい。

#### 【0534】

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、複屈折率などの求められる性能に応じて組み合わせる。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 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類である。

10

#### 【0535】

本発明の組成物において、一般式 (L - 7) 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。

#### 【0536】

本発明の組成物の総量に対しての式 (L - 7) 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、2 % であり、3 % であり、5 % であり、7 % であり、10 % であり、14 % であり、16 % であり、20 % である。本発明の組成物の総量に対しての式 (L - 7) で表される化合物の好ましい含有量の上限値は、30 % であり、25 % であり、23 % であり、20 % であり、18 % であり、15 % であり、10 % であり、5 % である。

20

#### 【0537】

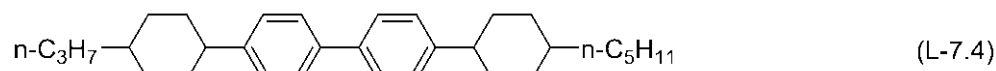
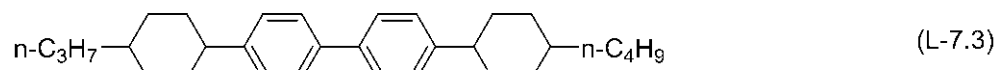
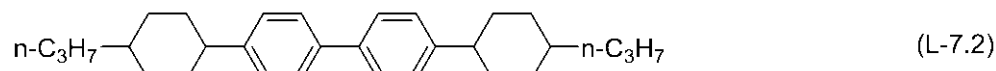
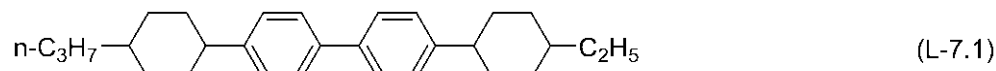
本発明の組成物が高い  $T_{ni}$  の実施形態が望まれる場合は式 (L - 7) で表される化合物の含有量を多めにすることが好ましく、低粘度の実施形態が望まれる場合は含有量を少なめにすることが好ましい。

#### 【0538】

さらに、一般式 (L - 7) で表される化合物は、式 (L - 7.1) から式 (L - 7.4) で表される化合物であることが好ましく、式 (L - 7.2) で表される化合物であることが好ましい。

#### 【0539】

#### 【化172】



30

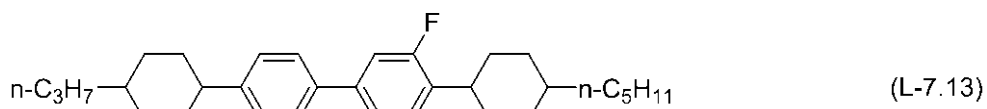
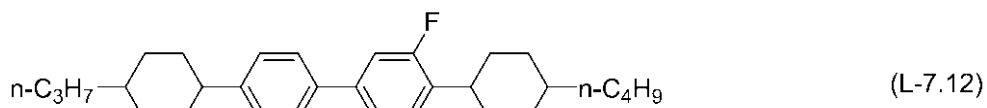
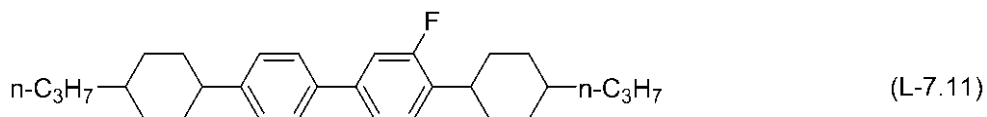
40

#### 【0540】

さらに、一般式 (L - 7) で表される化合物は、式 (L - 7.11) から式 (L - 7.13) で表される化合物であることが好ましく、式 (L - 7.11) で表される化合物であることが好ましい。

#### 【0541】

## 【化 1 7 3】



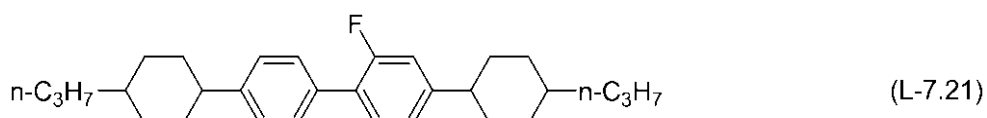
10

## 【 0 5 4 2】

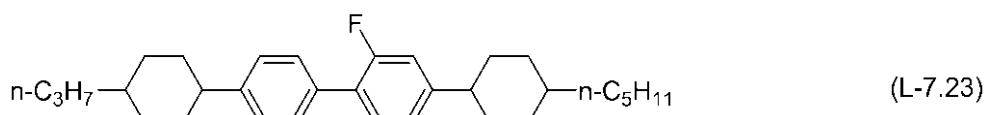
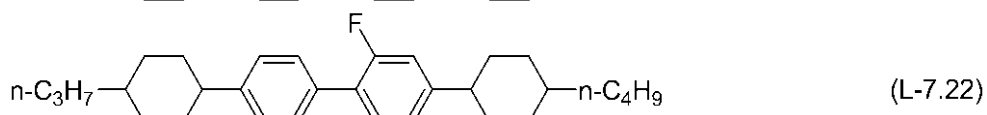
さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.21) から式 (L-7.23) で表される化合物である。式 (L-7.21) で表される化合物であることが好ましい。

## 【 0 5 4 3】

## 【化 1 7 4】



20



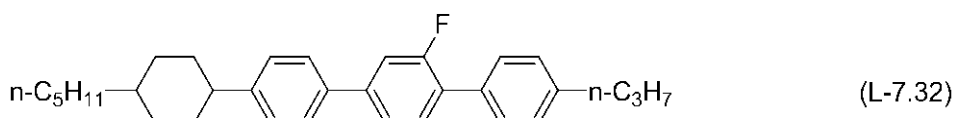
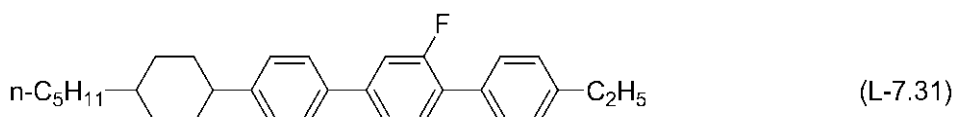
## 【 0 5 4 4】

さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.31) から式 (L-7.34) で表される化合物であることが好ましく、式 (L-7.31) 又は / 及び式 (L-7.32) で表される化合物であることが好ましい。

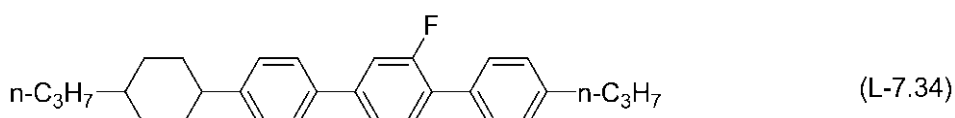
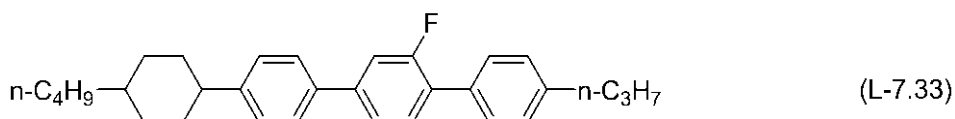
30

## 【 0 5 4 5】

## 【化 1 7 5】



40



## 【 0 5 4 6】

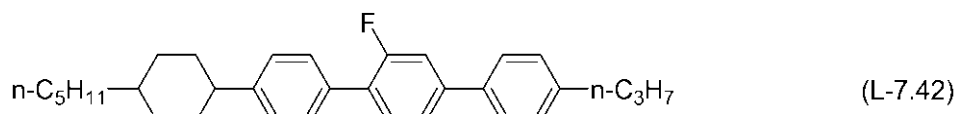
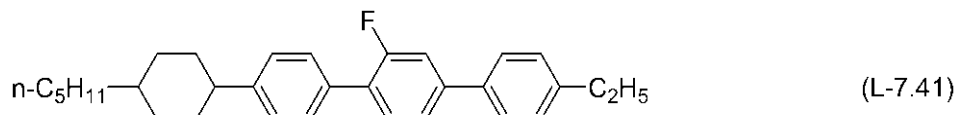
さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.41) から式 (L-7.44) で表される化合物であることが好ましく、式 (L-7.41) 又は / 及び式 (L-

50

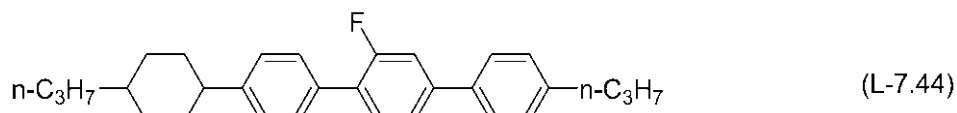
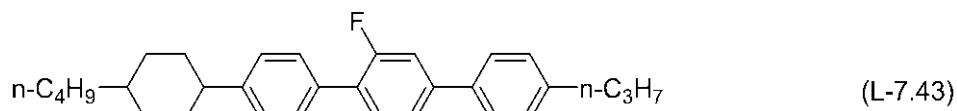
7.42) で表される化合物であることが好ましい。

【0547】

【化176】



10



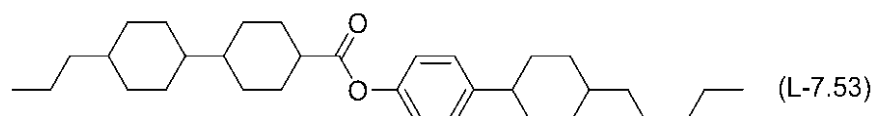
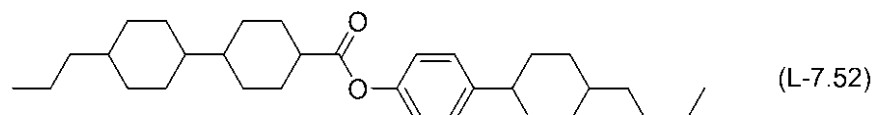
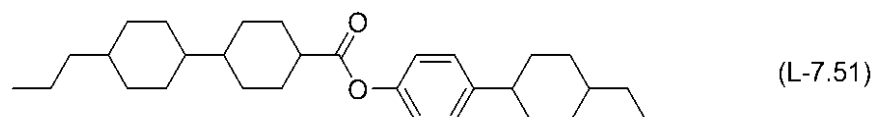
【0548】

さらに、一般式(L-7)で表される化合物は、式(L-7.51)から式(L-7.53)で表される化合物であることが好ましい。

20

【0549】

【化177】



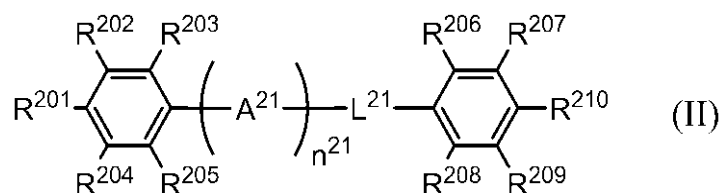
30

【0550】

本発明に係る液晶組成物は、一般式(I)で表される重合性モノマーおよび自発配向性モノマーを含有するが、その他の重合性化合物を併用しても良い。すなわち、本発明に係る液晶組成物は、一般式(II)で表される重合性化合物をさらに含むことが好ましい。当該その他の重合性化合物としては、一般式(II)：

【0551】

【化178】



40

【0552】

(式中、 $R^{201}$ 、 $R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{205}$ 、 $R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{208}$ 、 $R^{209}$  及び  $R^{210}$  は、それぞれ独立して、 $P^{21}$ - $S^{21}$ -、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数1から18のアルキル基、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数1から18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、 $P^2$

50

<sup>1</sup> は上記一般式 (I) の (R - I) ~ (R - IX) のいずれかを表し、

S<sup>2 1</sup> は、単結合又は炭素原子数 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<sub>2</sub>- は、酸素原子が直接隣接しないように、-O-、-OCO- 又は -COO- で置換されてよく、

n<sup>2 1</sup> は、0、1 又は 2 を表し、

A<sup>2 1</sup> は、

(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<sub>2</sub>- 又は隣接していない 2 個以上の -CH<sub>2</sub>- は -O- に置き換えられてもよい。)

(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= に置き換えられてもよい。)

(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= に置き換えられてもよい。)

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、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、シアノ基、ニトロ基又は P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - で置換されていても良く、

上記一般式 (II) の 1 分子内に少なくとも 1 以上の P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - を有し、

L<sup>2 1</sup> は単結合、-OCH<sub>2</sub>-、-CH<sub>2</sub>O-、-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-、-OC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O-、-COO-、-OCO-、-CH=CR<sup>a</sup>-COO-、-CH=CR<sup>a</sup>-OCO-、-COO-CR<sup>a</sup>=CH-、-OCO-CR<sup>a</sup>=CH-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-COO-、-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-OCO-、-OCO-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-、-COO-(CH<sub>2</sub>)<sub>z</sub>-、-CH=CH-、-CF<sub>2</sub>O-、-OCF<sub>2</sub>- 又は -C=C- (式中、R<sup>a</sup> 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、z はそれぞれ独立して 1 ~ 4 の整数を表す。) を表すが、

P<sup>2 1</sup>、S<sup>2 1</sup>、及び A<sup>2 1</sup> 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も良いが、但し、一般式 (I) で表される化合物を除く。) で表される重合性化合物が好ましい。

#### 【0553】

一般式 (I) で表される重合性化合物と、上記一般式 (II) で表される重合性化合物とを含む液晶組成物は、表示不良の発生をより低減できるという観点で効果がある。

#### 【0554】

上記一般式 (II) において、当該一般式 (II) で表される化合物の 1 分子内に 1 又は 2 以上の P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - を有することが好ましく、4 以下の P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - を有することが好ましく、前記一般式 (II) の 1 分子内に存在する P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - の数は、1 以上 4 以下が好ましく、1 以上 3 以下がより好ましく、上記一般式 (II) で表される化合物の分子内における P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - の数は、2 又は 3 であることが特に好ましい。

#### 【0555】

すなわち、一般式 (II) で表される化合物は、2 つのベンゼン環と、必要により環 A<sup>2 1</sup> とが連結した構造であり、これら 2 つのベンゼン環および環 A<sup>2 1</sup> において P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - を少なくとも一つ有していることから、一般式 (II) で表される化合物は重合性化合物としての作用・効果を奏する。

#### 【0556】

上記一般式 (II) において、R<sup>2 0 1</sup>、R<sup>2 0 2</sup>、R<sup>2 0 3</sup>、R<sup>2 0 4</sup>、R<sup>2 0 5</sup>、R<sup>2 0 6</sup>、R<sup>2 0 7</sup>、R<sup>2 0 8</sup>、R<sup>2 0 9</sup> 及び R<sup>2 1 0</sup> からなる群から選択される 1 種または 2 種以上が P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - である場合は、R<sup>2 0 1</sup>、R<sup>2 0 2</sup>、R<sup>2 0 4</sup>、R<sup>2 0 7</sup>、R<sup>2 0 9</sup> 又は R<sup>2 1 0</sup> のいずれか 1 種または 2 種以上が P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - であることが好ましく、R<sup>2 0 1</sup> 及び R<sup>2 1 0</sup> が P<sup>2 1</sup> - S<sup>2 1</sup> - であることがより好ましい。

#### 【0557】

上記一般式 (I I) において、 $R^{201}$  及び  $R^{210}$  は、それぞれ独立して、 $P^{21} - S^{21} -$  であることが好ましく、この場合、 $R^{201}$  及び  $R^{210}$  は同一の  $P^{21} - S^{21} -$  であっても、異なる  $P^{21} - S^{21} -$  であってもよい。

【0558】

上記一般式 (I I) において、 $R^{201}$ 、 $R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{205}$ 、 $R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{208}$ 、 $R^{209}$  及び  $R^{210}$  は、それぞれ独立して、 $P^{21} - S^{21} -$ 、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数 1 から 18 のアルキル基、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数 1 から 18 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すが、この場合、前記アルキル基およびアルコキシ基の好ましい炭素原子数は、1 ~ 16 であり、より好ましくは 1 ~ 10 であり、さらに好ましくは 1 ~ 8 であり、よりさらに好ましくは 1 ~ 6 であり、さらにより好ましくは 1 ~ 4 であり、特に好ましくは 1 ~ 3 である。また、前記アルキル基およびアルコキシ基は、直鎖状または分岐状であってもよいが、直鎖状が特に好ましい。

10

【0559】

上記一般式 (I I) において、 $R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{205}$ 、 $R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{208}$  及び  $R^{209}$  は、それぞれ独立して、 $P^{21} - S^{21} -$ 、炭素原子数 1 から 3 のアルキル基、フッ素原子又は水素原子であることが好ましく、 $P^{21} - S^{21} -$ 、フッ素原子又は水素原子であることが更に好ましく、フッ素原子又は水素原子であることがより好ましい。

【0560】

$P^{21}$  は式 (R - 1) であることが好ましく、アクリル基またはメタクリル基であることがより好ましく、メタクリル基であることがさらに好ましい。

20

【0561】

$S^{21}$  は、単結合又は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキレン基であることが好ましく、単結合であることが更に好ましい。

【0562】

上記一般式 (I I) において、 $n^{21}$  は、0 又は 1 が好ましい。

【0563】

上記一般式 (I I) において、 $A^{21}$  は、1, 4 - フェニレン基又はナフタレン - 2, 6 - ジイル基であることが好ましく、1, 4 - フェニレン基であることが更に好ましい。

30

【0564】

上記一般式 (I I) において、 $L^{21}$  は、単結合、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-C_2H_4-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-CH=CH-OCO-$ 、 $-COO-CH=CH-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-C_2H_4-COO-$ 、 $-C_2H_4-OCO-$ 、 $-OCO-C_2H_4-$ 、 $-COO-C_2H_4-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$  又は  $-C-C-$  が好ましい。

【0565】

一般式 (I I) 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。

40

【0566】

50

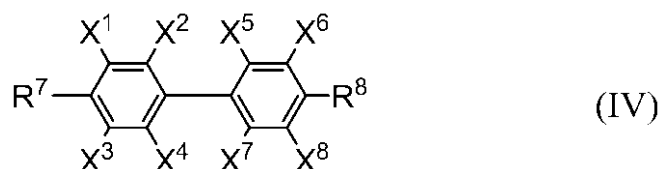
本発明に係る液晶組成物全体（１００質量％）のうち、一般式（Ⅰ）および一般式（ⅠⅠ）で表される重合性化合物との合計含有量の上限値は、６質量％が好ましく、５．８質量％が好ましく、５．５質量％が好ましく、５．２質量％が好ましく、５質量％が好ましく、４．８質量％が好ましく、４．６質量％が好ましく、４．４質量％が好ましく、４．２質量％が好ましく、４質量％が好ましく、３．５質量％が好ましく、３質量％が好ましく、２．５質量％が好ましく、２質量％が好ましく、１．５質量％が好ましく、１質量％が好ましく、０．９５質量％が好ましく、０．９質量％が好ましく、０．８５質量％が好ましく、０．８質量％が好ましく、０．７５質量％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。  
前記合計含有量の下限値は、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％が好ましい。

【０５６７】

本発明に係る一般式（ⅠⅠ）で表される化合物は、一般式（ⅠⅤ）で表される重合性化合物であることが好ましい。

【０５６８】

【化１７９】



【０５６９】

上記一般式（ⅠⅤ）中、 $R^7$  及び  $R^8$  は、それぞれ独立して、上記の式（ $R-1$ ）から式（ $R-9$ ）のいずれかを表し、 $X^1$  から  $X^8$  は、それぞれ独立して、トリフルオロメチル基、フッ素原子または水素原子を表す。

【０５７０】

上記一般式（ⅠⅤ）中、 $R^7$  及び  $R^8$  は、それぞれ独立して、メタクリル基またはアクリル基であることが好ましい。

【０５７１】

前記一般式（ⅠⅤ）で表される化合物は、式（ⅠⅤ-１１）～式（ⅠⅤ-１５）からなる群から選択される１種または２種以上であることが更に好ましく、式（ⅠⅤ-１１）であることが特に好ましい。

【０５７２】

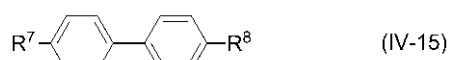
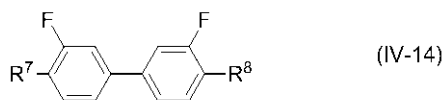
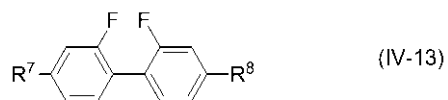
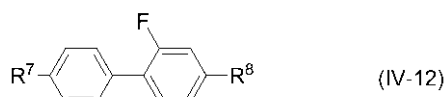
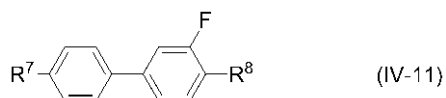
10

20

30



## 【化 1 8 0】



## 【 0 5 7 3】

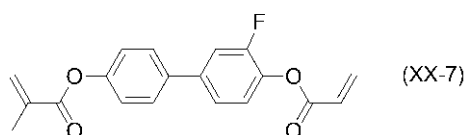
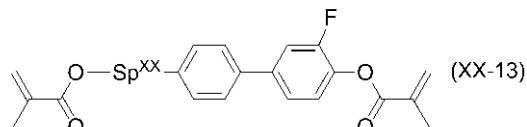
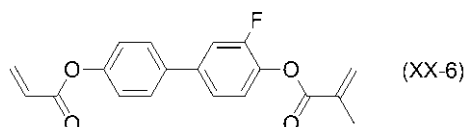
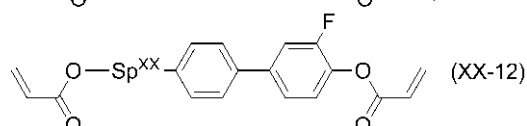
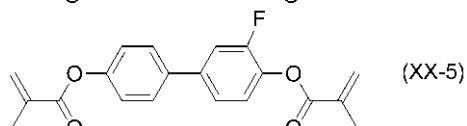
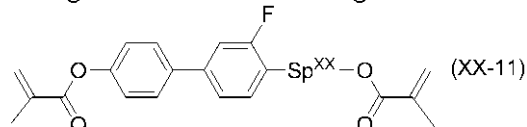
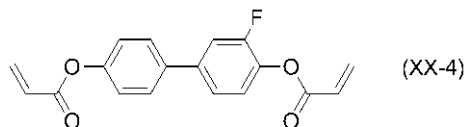
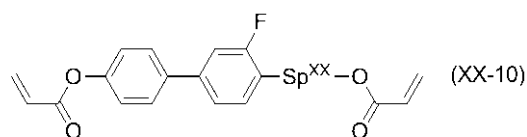
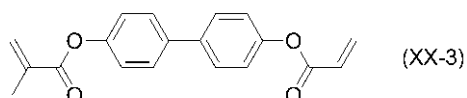
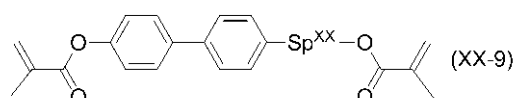
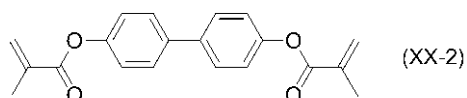
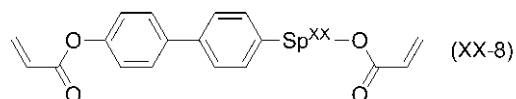
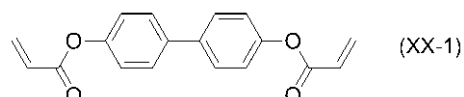
式 (IV - 11) から式 (IV - 15) で表される重合性化合物と一般式 (I) とを併用した場合、更に良好な配向状態が得られる。

## 【 0 5 7 4】

本発明に係る一般式 (II) で表される化合物は、具体的には、例えば式 (XX - 1) から一般式 (XX - 13) で表される化合物が好ましく、式 (XX - 1) から式 (XX - 7) が更に好ましい。

## 【 0 5 7 5】

## 【化 1 8 1】



10

20

30

40

50

## 【 0 5 7 6 】

式 ( X X - 1 ) から一般式 ( X X - 1 3 ) 中、 $S p^{\times \times}$  は炭素原子数 1 ~ 8 のアルキレン基または  $-O-(CH_2)_s-$  (式中、 $s$  は 1 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 5 7 7 】

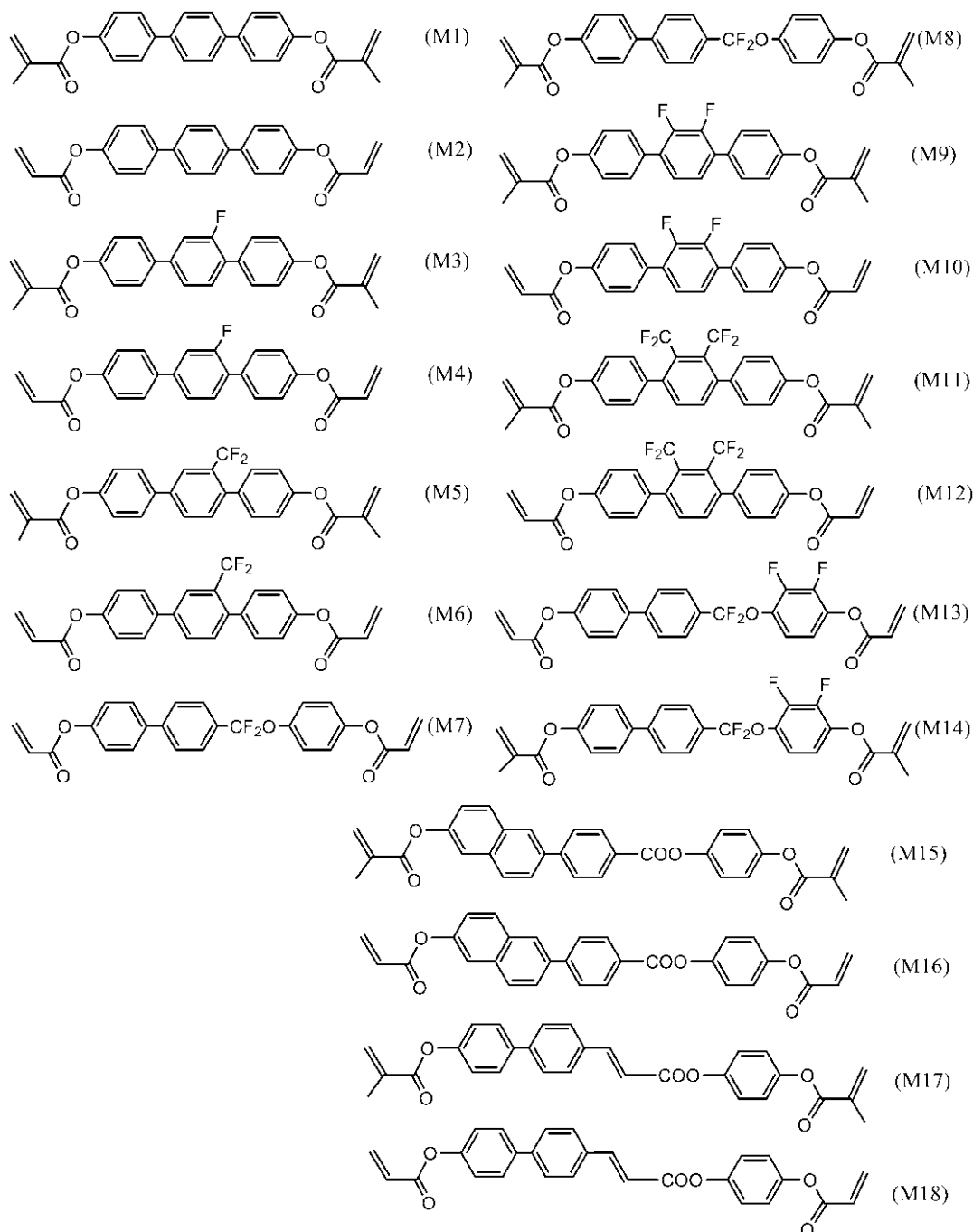
式 ( X X - 1 ) から一般式 ( X X - 1 3 ) 中、1, 4 - フェニレン基中の水素原子は、更に、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-CF_3$ 、 $-CH_3$  または式 ( R - 1 ) から式 ( R - 1 5 ) のいずれかによって置換されていても良い。

## 【 0 5 7 8 】

また、一般式 ( I I ) で表される化合物として、例えば、式 ( M 1 ) から式 ( M 1 8 ) で表される重合性化合物が好ましい。

## 【 0 5 7 9 】

## 【 化 1 8 2 】

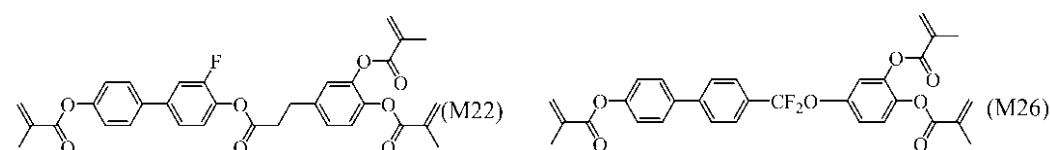
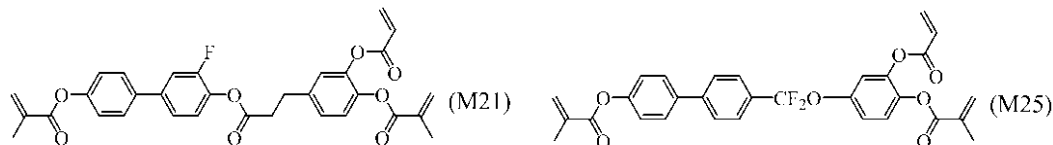
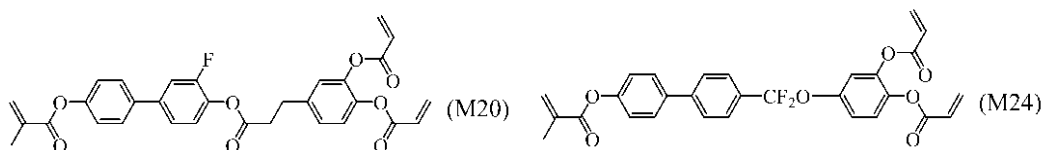
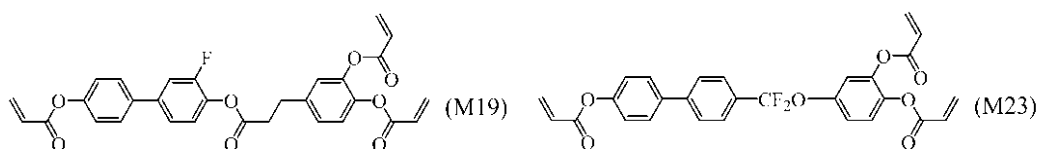


## 【 0 5 8 0 】

また、式 (M19) から式 (M34) のような重合性化合物も好ましい。

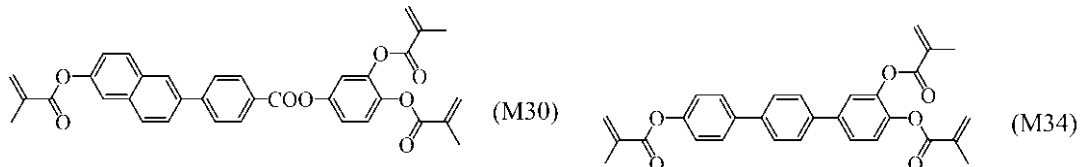
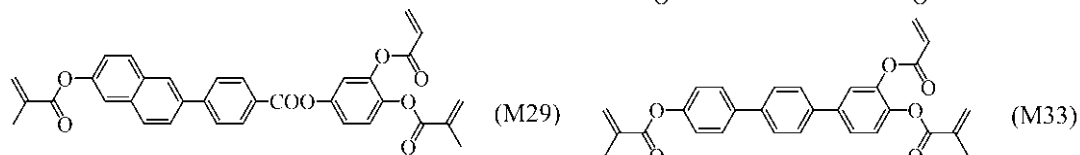
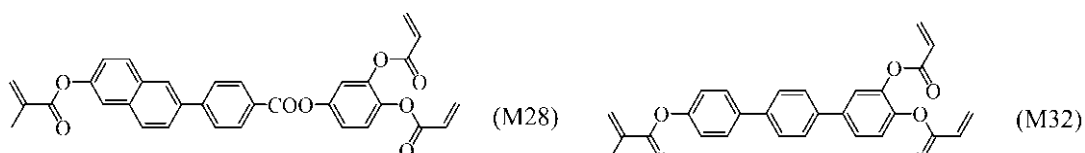
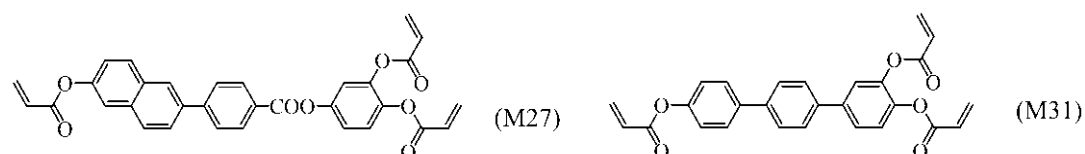
【0581】

【化183】



【0582】

【化184】



【0583】

式 (M19) から式 (M34) 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、-CF<sub>3</sub>、-CH<sub>3</sub> によって置換されていても良い。

【0584】

また、一般式 (II) で表される化合物は、式 (M35) ~ 式 (M65) で表される重合性化合物も好ましい。

【0585】

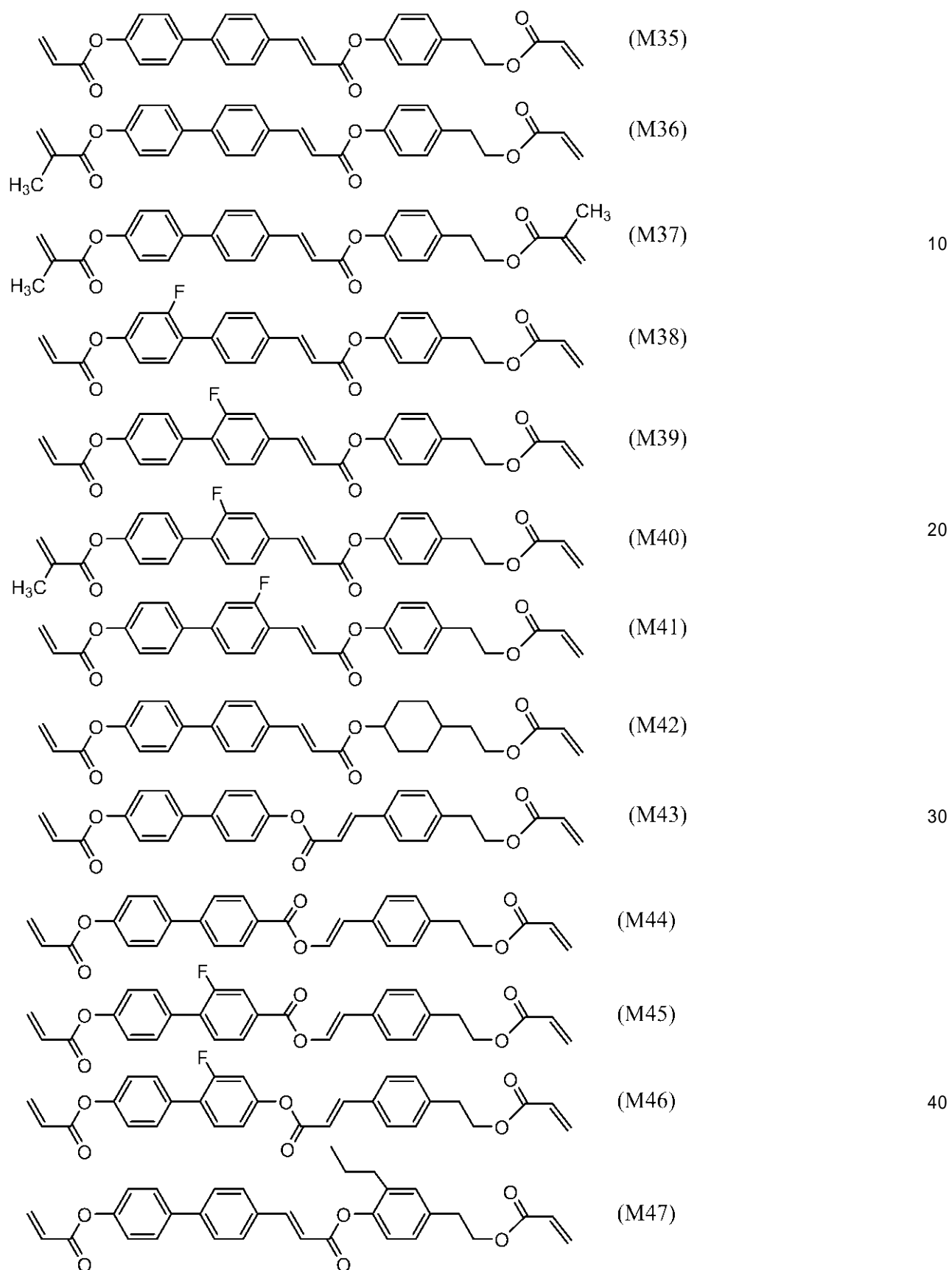
10

20

30

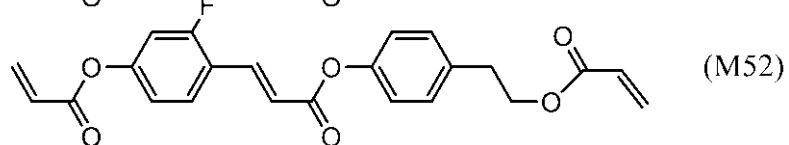
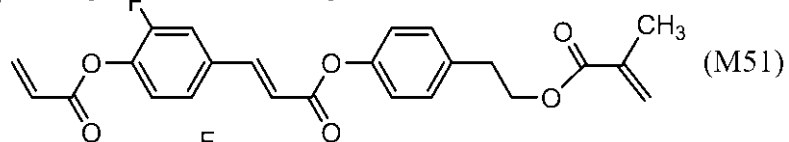
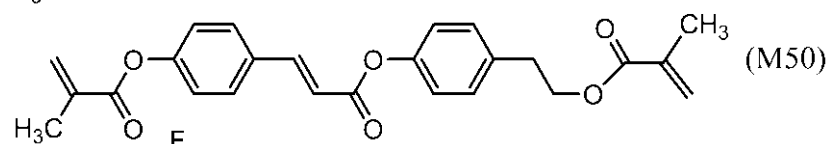
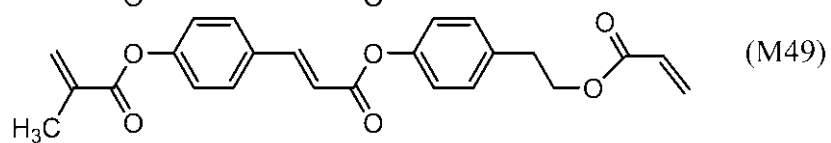
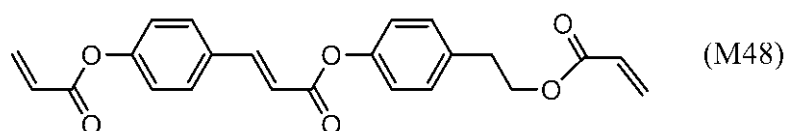
40

## 【化 1 8 5】



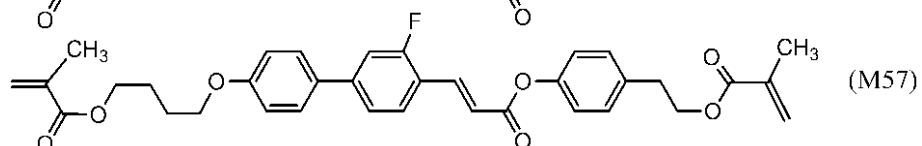
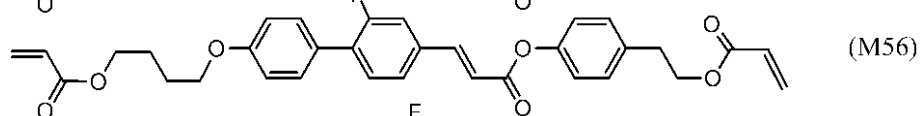
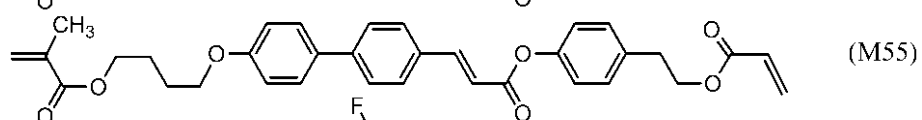
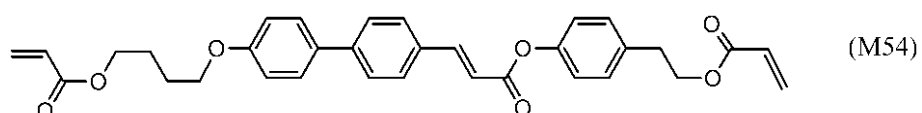
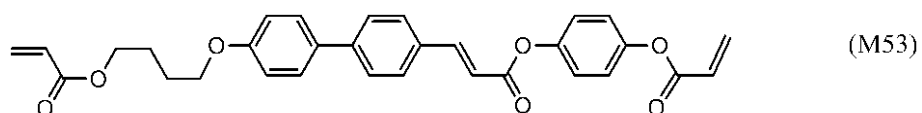
## 【 0 5 8 6 】

## 【化 1 8 6】



## 【 0 5 8 7】

## 【化 1 8 7】



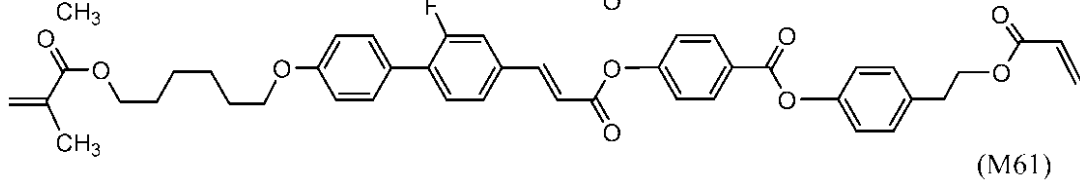
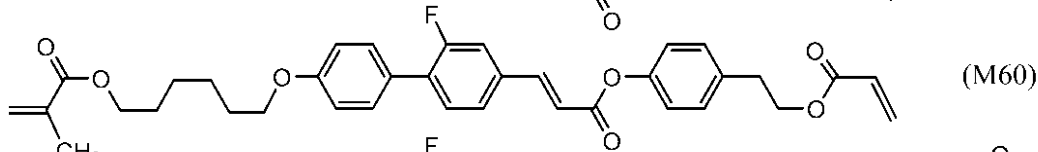
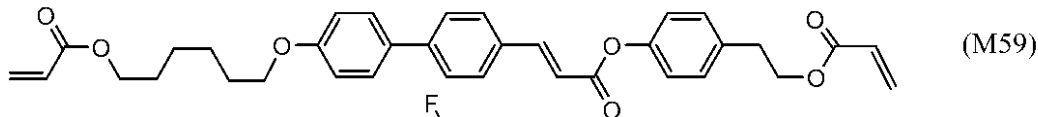
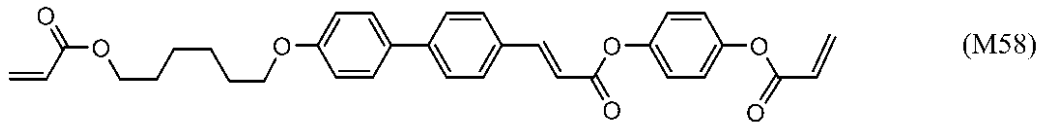
## 【 0 5 8 8】

10

20

30

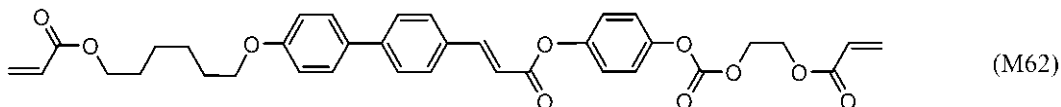
## 【化 1 8 8】



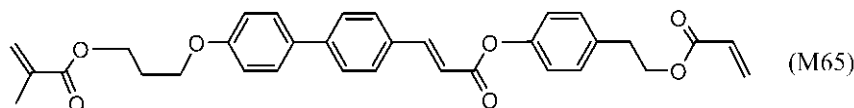
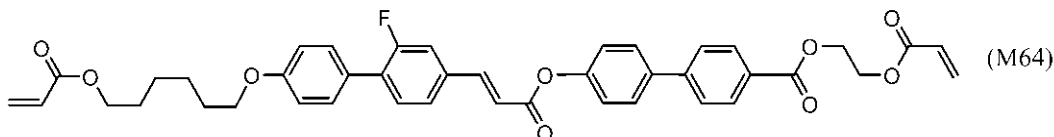
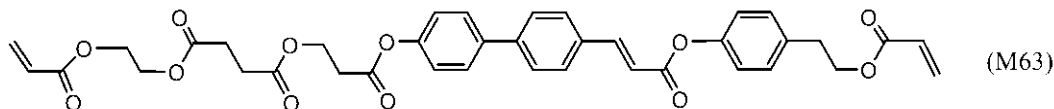
10

## 【 0 5 8 9】

## 【化 1 8 9】



20



30

## 【 0 5 9 0】

本発明に係る液晶組成物において、式(M1)～式(M65)で表される重合性化合物の液晶組成物全体に対する含有量は、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。

40

## 【 0 5 9 1】

本発明の液晶組成物は、上述の化合物以外に、通常の内マチック液晶、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、光安定剤又は赤外線吸収剤等を含含有しても良い。

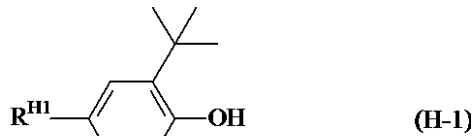
## 【 0 5 9 2】

50

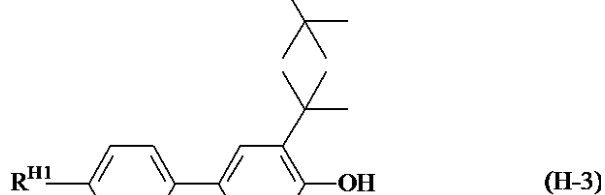
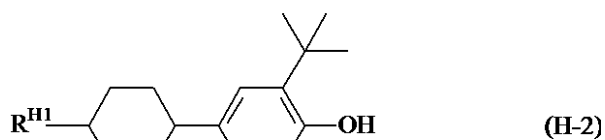
酸化防止剤として、一般式（H - 1）から一般式（H - 4）で表されるヒンダードフェノールが挙げられる。

【0593】

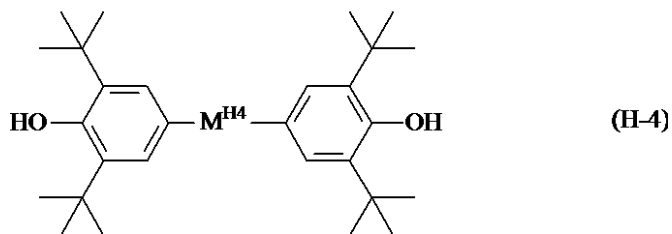
【化190】



10



20



【0594】

30

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。

【0595】

40

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

50

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。

【0596】

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。

【0597】

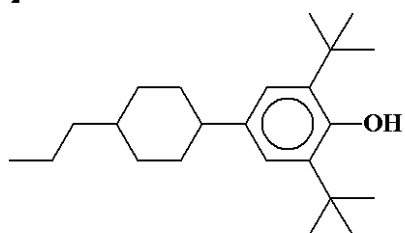
一般式 (H-1) から一般式 (H-4) 中、1,4-シクロヘキシレン基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の -CH<sub>2</sub>- は -O- 又は -S- によって置換されていても良い。また、1,4-シクロヘキシレン基中の水素原子はそれぞれ独立的に、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良い。

【0598】

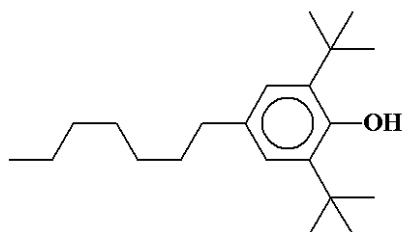
更に具体的には、例えば、式 (H-11) から式 (H-15) が挙げられる。

【0599】

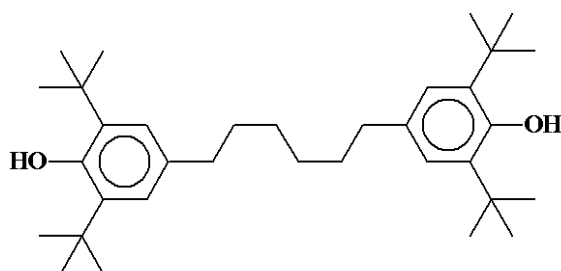
【化191】



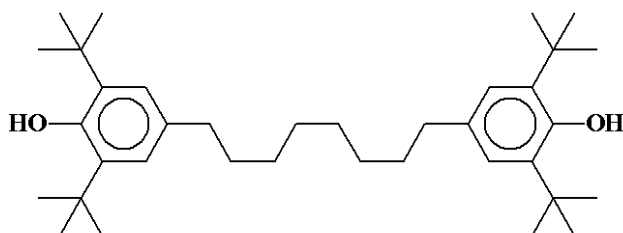
(H-11)



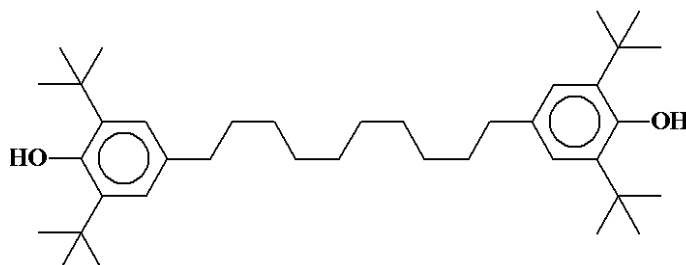
(H-12)



(H-13)



(H-14)



(H-15)



## 【0600】

本発明の液晶組成物に酸化防止剤が含有する場合、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。酸化防止剤の含有する場合の上限は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。

## 【0601】

本発明の液晶組成物は、20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-5.0が特に好ましい。

## 【0602】

本発明の液晶組成物は、20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。

## 【0603】

本発明の液晶組成物は、20における粘度( )が10から50mPa・sであるが、10から45mPa・sであることが好ましく、10から40mPa・sであることが好ましく、10から35mPa・sであることが好ましく、10から30mPa・sであることが好ましく、10から25mPa・sであることが更に好ましく、10から22mPa・sであることが特に好ましい。

## 【0604】

本発明の液晶組成物は、20における回転粘性(  $\gamma_1$  )が50から160mPa・sであるが、55から160mPa・sであることが好ましく、60から160mPa・sであることが好ましく、60から150mPa・sであることが好ましく、60から140mPa・sであることが好ましく、60から130mPa・sであることが好ましく、60から125mPa・sであることが好ましく、60から120mPa・sであることがより好ましく、60から115mPa・sであることがより好ましく、60から110mPa・sであることがより好ましく、60から100mPa・sであることが特に好ましい。

## 【0605】

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100 がより好ましく、70 から85 が特に好ましい。

## 【0606】

例えば、本発明に係る液晶組成物全体が負の誘電率異方性を示す場合、自発配向性モノマーと、一般式( I )で表される重合性モノマーと、一般式( N - 1 )、( N - 2 )及び( N - 3 )で表される化合物から選ばれる化合物を1種類又は2種類以上と、一般式( L )で表される化合物と、を含むことが好ましい。

## 【0607】

本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式( I )で表される重合性モノマーと、一般式( N - 1 )、一般式( N - 2 )、一般式( N - 3 )および一般式( L )で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の上限値は、100質量%、99質量%、98質量%、97質量%、96質量%、95質量%、94質量%、93質量%、92質量%、91質量%、90質量%、89質量%、88質量%、87質量%、86質量%、85質量%、84質量%であることが好ましい。

## 【0608】

また、本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式( I )で表される重合性モノマーと、一般式( N - 1 )

10

20

30

40

50

、一般式 ( N - 2 ) 、一般式 ( N - 3 ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の下限値は、78質量%、80質量%、81質量%、83質量%、85質量%、86質量%、87質量%、88質量%、89質量%、90質量%、91質量%、92質量%、93質量%、94質量%、95質量%、96質量%、97質量%、98質量%、99質量%であることが好ましい。

【0609】

本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式 ( I ) で表される重合性モノマーと、一般式 ( N - 1 a ) 、一般式 ( N - 1 b ) 、一般式 ( N - 1 c ) 、一般式 ( N - 1 d ) 、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の上限値は、100質量%、99質量%、98質量%、97質量%、96質量%、95質量%、94質量%、93質量%、92質量%、91質量%、90質量%、89質量%、88質量%、87質量%、86質量%、85質量%、84質量%であることが好ましい。

10

【0610】

また、本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式 ( I ) で表される重合性モノマーと、一般式 ( N - 1 a ) 、一般式 ( N - 1 b ) 、一般式 ( N - 1 c ) 、一般式 ( N - 1 d ) 、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の下限値は、78質量%、80質量%、81質量%、83質量%、85質量%、86質量%、87質量%、88質量%、89質量%、90質量%、91質量%、92質量%、93質量%、94質量%、95質量%、96質量%、97質量%、98質量%、99質量%であることが好ましい。

20

【0611】

本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、一般式 ( I ) で表される重合性モノマーと、一般式 ( I I ) で表される重合性化合物と、一般式 ( N - 1 a ) 、一般式 ( N - 1 b ) 、一般式 ( N - 1 c ) 、一般式 ( N - 1 d ) 、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の上限値は、100質量%、99質量%、98質量%、97質量%、96質量%、95質量%、94質量%、93質量%、92質量%、91質量%、90質量%、89質量%、88質量%、87質量%、86質量%、85質量%であることが好ましい。

30

【0612】

また、本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、一般式 ( I ) で表される重合性モノマーと、一般式 ( I I ) で表される重合性化合物と、一般式 ( N - 1 a ) 、一般式 ( N - 1 b ) 、一般式 ( N - 1 c ) 、一般式 ( N - 1 d ) 、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の下限値は、78質量%、80質量%、81質量%、83質量%、85質量%、86質量%、87質量%、88質量%、89質量%、90質量%、91質量%、92質量%、93質量%、94質量%、95質量%、96質量%、97質量%、98質量%であることが好ましい。

40

【0613】

本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、一般式 ( I ) で表される重合性モノマーと、一般式 ( I I ) で表される重合性化合物と、一般式 ( N - 1 a ) 、一般式 ( N - 1 b ) 、一般式 ( N - 1 c ) 、一般式 ( N - 1 d ) 、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の上限値は、100質量%、99質量%、98質量%、97質量%、96質量%、95質量%、94質量%、93質量%、92質量%、91質量%、90質量%、89質量%、88質量%、87質量%、86質量%、85質量%であることが好ましい。

【0614】

また、本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、一般式 ( I ) で表される重合性モノマーと、一般式 ( I I ) で表される重合性化合物

50

と、一般式 (N - 1 a)、一般式 (N - 1 b)、一般式 (N - 1 c)、一般式 (N - 1 d)、一般式 (N - 1 e) および一般式 (L) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の下限値は、78質量%、80質量%、81質量%、83質量%、85質量%、86質量%、87質量%、88質量%、89質量%、90質量%、91質量%、92質量%、93質量%、94質量%、95質量%、96質量%、97質量%、98質量%であることが好ましい。

【0615】

本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、2種以上の一般式 (II - 1) で表される重合性モノマーと、一般式 (N - 1 a)、一般式 (N - 1 b)、一般式 (N - 1 c)、一般式 (N - 1 d)、一般式 (N - 1 e) および一般式 (L) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の上限値は、100質量%、99質量%、98質量%、97質量%、96質量%、95質量%、94質量%、93質量%、92質量%、91質量%、90質量%、89質量%、88質量%、87質量%、86質量%、85質量%であることが好ましい。

10

【0616】

また、本発明に係る液晶組成物全体のうち、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、2種以上の一般式 (II - 1) で表される重合性モノマーと、一般式 (N - 1 a)、一般式 (N - 1 b)、一般式 (N - 1 c)、一般式 (N - 1 d)、一般式 (N - 1 e) および一般式 (L) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の下限値は、78質量%、80質量%、81質量%、83質量%、85質量%、86質量%、87質量%、88質量%、89質量%、90質量%、91質量%、92質量%、93質量%、94質量%、95質量%、96質量%、97質量%、98質量%であることが好ましい。

20

【0617】

また、本発明に係る液晶組成物は、配向性を重視する場合は、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式 (I) で表される重合性モノマーと、を必須に含み、一般式 (N - 1 - 1)、一般式 (N - 1 - 2)、一般式 (N - 1 - 3) または一般式 (N - 1 - 4) を含むことが好ましい。

【0618】

また、本発明に係る液晶組成物は、応答速度を重視する場合は、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式 (I) で表される重合性モノマーと、を必須に含み、一般式 (N - 1 - 10) または一般式 (N - 1 - 11) を含むことが好ましい。

30

また、本発明に係る液晶組成物は、配向性を重視する場合は、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式 (I) で表される重合性モノマーと、1種または2種以上の一般式 (II) で表される重合性化合物と、を必須に含み、一般式 (N - 1 - 1)、一般式 (N - 1 - 2)、一般式 (N - 1 - 3) または一般式 (N - 1 - 4) を含むことが好ましい。

【0619】

また、本発明に係る液晶組成物は、応答速度を重視する場合は、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、1種または2種以上の一般式 (I) で表される重合性モノマーと、1種または2種以上の一般式 (II) で表される重合性化合物と、を必須に含み、一般式 (N - 1 - 10) または一般式 (N - 1 - 11) を含むことが好ましい。

40

【0620】

また、本発明に係る液晶組成物は、配向性を重視する場合は、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、2種以上の一般式 (II - 1) で表される重合性化合物と、を必須に含み、一般式 (N - 1 - 1)、一般式 (N - 1 - 2)、一般式 (N - 1 - 3) または一般式 (N - 1 - 4) を含むことが好ましい。

【0621】

また、本発明に係る液晶組成物は、応答速度を重視する場合は、1種または2種以上の自発配向性モノマーと、2種以上の一般式 (II - 1) で表される重合性化合物と、を必

50

須に含み、一般式 ( N - 1 - 1 0 ) または一般式 ( N - 1 - 1 1 ) を含むことが好ましい。

【 0 6 2 2 】

本発明に係る液晶組成物全体のうち、一般式 ( N - 1 - 4 )、一般式 ( N - 1 b )、一般式 ( N - 1 c )、一般式 ( N - 1 d )、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の上限値は、99質量%、98質量%、97質量%、96質量%、95質量%、94質量%、93質量%、92質量%、91質量%、90質量%、89質量%、88質量%、87質量%、86質量%、85質量%、84質量%であることが好ましい。

【 0 6 2 3 】

また、本発明に係る液晶組成物全体のうち、一般式 ( N - 1 - 4 )、一般式 ( N - 1 b )、一般式 ( N - 1 c )、一般式 ( N - 1 d )、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の下限値は、78質量%、80質量%、81質量%、83質量%、85質量%、86質量%、87質量%、88質量%、89質量%、90質量%、91質量%、92質量%、93質量%、94質量%、95質量%、96質量%、97質量%、98質量%であることが好ましい。

【 0 6 2 4 】

本発明に係る液晶組成物全体のうち、一般式 ( N - 1 a )、一般式 ( N - 1 b )、一般式 ( N - 1 c )、一般式 ( N - 1 d )、一般式 ( N - 1 e )、一般式 ( L - 1 )、一般式 ( L - 3 )、一般式 ( L - 4 )、一般式 ( L - 5 ) および一般式 ( L - 6 ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の上限値は、99質量%、98質量%、97質量%、96質量%、95質量%、94質量%、93質量%、92質量%、91質量%、90質量%、89質量%、88質量%、87質量%、86質量%、85質量%、84質量%、83質量%、82質量%、81質量%、80質量%であることが好ましい。

【 0 6 2 5 】

また、本発明に係る液晶組成物全体のうち、一般式 ( N - 1 a )、一般式 ( N - 1 b )、一般式 ( N - 1 c )、一般式 ( N - 1 d )、一般式 ( N - 1 e ) および一般式 ( L - 1 )、一般式 ( L - 3 )、一般式 ( L - 4 )、一般式 ( L - 5 ) および一般式 ( L - 6 ) で表される化合物のみから構成される成分の占める割合の下限値は、68質量%、70質量%、71質量%、73質量%、75質量%、78質量%、80質量%、81質量%、83質量%、85質量%、86質量%、87質量%、88質量%、89質量%、90質量%、91質量%、92質量%、93質量%、94質量%、95質量%、96質量%、97質量%、98質量%であることが好ましい。

【 0 6 2 6 】

本発明の液晶組成物を用いた液晶表示素子は、高速応答という顕著な特徴を有しており、加えて、チルト角が十分に得られ、未反応の重合性化合物がないか、問題にならないほど少なく、電圧保持率 ( V H R ) が高いため、配向不良や表示不良といった不具合がないか、十分に抑制されている。また、チルト角及び重合性化合物の残留量を容易に制御できるため、製造のためのエネルギーコストの最適化及び削減が容易であるため、生産効率の向上と安定した量産に最適である。

【 0 6 2 7 】

本発明の液晶組成物を用いた液晶表示素子は、特に、アクティブマトリックス駆動用液晶表示素子に有用であり、P S A モード、P S V A モード、V A モード、P S - I P S モード又はP S - F F S モード用液晶表示素子に用いることができる。

【 0 6 2 8 】

本発明に係る液晶表示素子は、対向に配置された第1の基板および第2の基板と、前記第1の基板または前記第2の基板に設けられる共通電極と、前記第1の基板または前記第2の基板に設けられ、薄膜トランジスタを有する画素電極と、前記第1の基板と第2の基板間に設けられる液晶組成物を含有する液晶層と、を有することが好ましい。必要により前記液晶層と当接するように第1の基板および/または第2の基板の少なくとも一つの基

10

20

30

40

50

板の対向面側に、液晶分子の配向方向を制御する配向膜を設けてもよい。該配向膜としては、液晶表示素子の駆動モードに併せて、垂直配向膜や水平配向膜など適宜選択することができ、ラビング配向膜（例えば、ポリイミド）または光配向膜（分解型ポリイミドなど）などの公知の配向膜を使用することができる。さらに、カラーフィルターを、第1の基板または第2の基板上に適宜設けてもよく、また前記画素電極や共通電極上にカラーフィルターを設けることができる。

【0629】

本発明に係る液晶表示素子に使用される液晶セルの2枚の基板はガラス又はプラスチックの如き柔軟性をもつ透明な材料を用いることができ、一方はシリコン等の不透明な材料でも良い。透明電極層を有する透明基板は、例えば、ガラス板等の透明基板上にインジウムスズオキシド（ITO）をスパッタリングすることにより得ることができる。

10

【0630】

カラーフィルターは、例えば、顔料分散法、印刷法、電着法又は、染色法等によって作成することができる。顔料分散法によるカラーフィルターの作成方法を一例に説明すると、カラーフィルター用の硬化性着色組成物を、該透明基板上に塗布し、パターンニング処理を施し、そして加熱又は光照射により硬化させる。この工程を、赤、緑、青の3色についてそれぞれ行うことで、カラーフィルター用の画素部を作成することができる。その他、該基板上に、TFT、薄膜ダイオード、金属絶縁体金属比抵抗素子等の能動素子を設けた画素電極を設置してもよい。

【0631】

20

前記第1の基板および前記第2の基板を、共通電極や画素電極層が内側となるように対向させることが好ましい。

【0632】

第1の基板と第2の基板との間隔はスペーサーを介して、調整してもよい。このときは、得られる調光層の厚さが1～100μmとなるように調整するのが好ましい。1.5から10μmが更に好ましく、偏光板を使用する場合は、コントラストが最大になるように液晶の屈折率異方性  $n$  とセル厚  $d$  との積を調整することが好ましい。又、二枚の偏光板がある場合は、各偏光板の偏光軸を調整して視野角やコントラストが良好になるように調整することもできる。更に、視野角を広げるための位相差フィルムも使用することもできる。スペーサーとしては、例えば、ガラス粒子、プラスチック粒子、アルミナ粒子、フォトレジスト材料等が挙げられる。その後、エポキシ系熱硬化性組成物等のシール剤を、液晶注入口を設けた形で該基板にスクリーン印刷し、該基板同士を貼り合わせ、加熱しシール剤を熱硬化させる。

30

【0633】

2枚の基板間に液晶組成物を挟持させる方法は、通常の真空注入法又はODF法などを用いることができる。

【0634】

本発明の第2は、一对の基板のうち少なくとも一方の基板表面に配向膜を備えていない液晶表示素子に使用する液晶組成物であって、2種以上のビフェニル骨格を有する重合性化合物を含む液晶組成物である。ビフェニル基を有する重合性化合物を2種以上含むと反応速度に差が生じるため、配向ムラや表示不良などを低減することができる。

40

【0635】

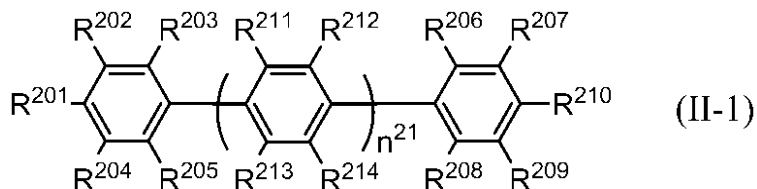
上記ビフェニル骨格を有する重合性化合物とは、2つのベンゼン環が直接連結したビフェニル骨格を備えているものであればよく、ターフェニルも含む概念である。そのため、2種以上のビフェニル骨格を有する重合性化合物とは、2つのベンゼン環が直接連結したビフェニル骨格を備えている重合性化合物が2種類以上存在することを意味する。

【0636】

本発明に係るビフェニル基を有する重合性化合物は、以下の式（II-1）：

【0637】

## 【化 1 9 2】



## 【 0 6 3 8】

(上記一般式(II-1)中、 $R^{201}$ 、 $R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{205}$ 、 $R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{208}$ 、 $R^{209}$ 、 $R^{210}$ 、 $R^{211}$ 、 $R^{212}$ 、 $R^{213}$ 及び $R^{214}$ はそれぞれ独立して、 $P^{21}-S^{21}$  -、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数1から18のアルキル基、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数1から18のアルコキシ基、ハロゲン原子(フッ素原子)又は水素原子のいずれかを表し、 $P^{21}$ は上記一般式(I)の(R-I)~(R-IX)のいずれかを表し、 $S^{21}$ は、単結合又は炭素原子数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 $-COO-$ で置換されてよく、 $n^{21}$ は、0、1又は2を表す。)で表されることが好ましい。

10

## 【 0 6 3 9】

上記一般式(II-1)において、当該一般式(II-1)で表される化合物の1分子内に1又は2以上の $P^{21}-S^{21}$  -を有することが好ましく、4以下の $P^{21}-S^{21}$  -を有することが好ましく、前記一般式(II)の1分子内に存在する $P^{21}-S^{21}$  -の数は、1以上4以下が好ましく、1以上3以下がより好ましく、上記一般式(II)で表される化合物の分子内における $P^{21}-S^{21}$  -の数は、2又は3であることが特に好ましい。

20

## 【 0 6 4 0】

すなわち、一般式(II-1)で表される化合物は、2つのベンゼン環(ビフェニル構造)を備えており、これら2つのベンゼン環において $P^{21}-S^{21}$  -を少なくとも一つ有していることから、一般式(II)で表される化合物は重合性化合物としての作用・効果を奏する。

## 【 0 6 4 1】

上記一般式(II-1)において、1種または2種以上の $P^{21}-S^{21}$  -を含む場合は、 $R^{201}$ 、 $R^{202}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{209}$ 又は $R^{210}$ のいずれか1種または2種以上が $P^{21}-S^{21}$  -であることが好ましく、 $R^{201}$ 及び $R^{210}$ が $P^{21}-S^{21}$  -であることがより好ましい。

30

## 【 0 6 4 2】

上記一般式(II-1)において、 $R^{201}$ 及び $R^{210}$ は、それぞれ独立して、 $P^{21}-S^{21}$  -であることが好ましく、この場合、 $R^{201}$ 及び $R^{210}$ は同一の $P^{21}-S^{21}$  -であっても、異なる $P^{21}-S^{21}$  -であってもよい。

## 【 0 6 4 3】

上記一般式(II)において、 $R^{201}$ 、 $R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{205}$ 、 $R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{208}$ 、 $R^{209}$ 、 $R^{210}$ 、 $R^{211}$ 、 $R^{212}$ 、 $R^{213}$ 及び $R^{214}$ はそれぞれ独立して、 $P^{21}-S^{21}$  -、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数1から18のアルキル基、フッ素原子に置換されてもよい炭素原子数1から18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すが、この場合、前記アルキル基およびアルコキシ基の好ましい炭素原子数は、1~16であり、より好ましくは1~10であり、さらに好ましくは1~8であり、よりさらに好ましくは1~6であり、さらにより好ましくは1~4であり、特に好ましくは1~3である。また、前記アルキル基およびアルコキシ基は、直鎖状または分岐状であってもよいが、直鎖状が特に好ましい。

40

## 【 0 6 4 4】

上記一般式(II-1)において、 $R^{201}$ 、 $R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{205}$

50

$R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{208}$ 、 $R^{209}$ 、 $R^{210}$ 、 $R^{211}$ 、 $R^{212}$ 、 $R^{213}$  及び  $R^{214}$  はそれぞれ独立して、 $P^{21}$  -  $S^{21}$  -、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であることが好ましく、 $P^{21}$  -  $S^{21}$  -、フッ素原子又は水素原子であることが更に好ましく、フッ素原子又は水素原子であることがより好ましい。

【0645】

上記一般式 (II - 1) において、 $P^{21}$  は式 (R - I) であることが好ましく、アクリル基またはメタクリル基であることがより好ましく、メタクリル基であることがさらに好ましい。

【0646】

上記一般式 (II - 1) において、 $S^{21}$  は、単結合又は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキレン基であることが好ましく、単結合であることが更に好ましい。

【0647】

上記一般式 (II - 1) において、 $n^{21}$  は、0 が好ましい。

【0648】

本発明に係る液晶組成物は、上記一般式 (II - 1) で表されるビフェニル基を有する重合性化合物を 2 種 ~ 6 種含むことが好ましく、2 種 ~ 5 種含むことがより好ましく、2 種 ~ 4 種含むことがさらに好ましく、2 種 ~ 3 種含むことがよりさらに好ましく、2 種が特に好ましい。異なる化学構造を備えた上記一般式 (II - 1) で表されるビフェニル基を有する重合性化合物を 2 種以上含むと反応速度に差が生じるため、配向ムラや表示不良などを低減することができる。

【0649】

また、上記 2 種以上ビフェニル骨格を有する重合性化合物の一つとして、上記一般式 (I a) で表される化合物を使用してもよい。

【0650】

本発明に係る液晶組成物に好適に使用できるビフェニル骨格を有する重合性化合物としては、上記式 (XX - 1) から一般式 (XX - 13) で表される重合性化合物、上記式 RM - 1 ~ RM - 14 および式 I - 1 - 1 ~ 式 I - 7 - 6 が挙げられる。

【0651】

そのため、本発明に係る液晶組成物において、2 種以上のビフェニル骨格を有する重合性化合物の好適な態様としては、上記式 (XX - 1) から一般式 (XX - 13) で表される重合性化合物、上記式 RM - 1 ~ RM - 14 で表される重合性化合物および式 I - 1 - 1 ~ 式 I - 7 - 6 で表される重合性化合物からなる群から選択される 2 種である。

【0652】

上記 2 種以上のビフェニル骨格を有する重合性化合物の合計含有量は、0.02 から 10 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、5 質量%、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。

【0653】

本発明に係る液晶組成物は、前記 2 種以上のビフェニル骨格を有する重合性化合物のそれぞれとは異なる化学構造を備え、かつ極性基を有する自発配向性モノマーを含むことが

10

20

30

40

50

好ましい。

【0654】

当該自発配向性モノマーとしては、上述した自発性モノマーを好適に使用することができる。

【0655】

また、本発明に係る液晶組成物の好適な態様としては、上記一般式(II-1)で表されるビフェニル基を有する重合性化合物を2種以上と、上記自発配向性モノマーを1種または2種以上と、一般式(N-1a)~(N-1g)で表される化合物群と、一般式(L)で表される化合物とを含み、これらの化合物で液晶組成物の85~100質量%を占めることが好ましい。

10

【0656】

本発明の第3は、対向に配置された第一の基板および第二の基板と、前記第一の基板と前記第二の基板との間に充填された液晶層と、前記第一の基板上に、マトリクス状に配置される複数のゲートバスライン及びデータバスライン、前記ゲートバスラインとデータバスラインとの交差部に設けられる薄膜トランジスタならびに前記薄膜トランジスタにより駆動される画素電極を画素毎に有する電極層と、前記第一の基板または前記第二の基板上に形成された共通電極と、前記第一の基板および前記第二の基板の間に2種以上のビフェニル骨格を有する重合性化合物が硬化された樹脂成分と、を有する、少なくとも一方の基板表面に配向膜を備えていない液晶表示素子である。

本発明の液晶組成物に含まれる重合性化合物または重合性モノマーおよび自発配向性モノマーを重合させる方法としては、液晶の良好な配向性能を得るためには、適度な重合速度が望ましいので、紫外線又は電子線等の活性エネルギー線を単一又は併用又は順番に照射することによって重合させる方法が好ましい。紫外線を使用する場合、偏光光源を用いても良いし、非偏光光源を用いても良い。また、液晶組成物を2枚の基板間に挟持させた状態で重合を行う場合には、少なくとも照射面側の基板は活性エネルギー線に対して適当な透明性が与えられていなければならない。また、光照射時にマスクを用いて特定の部分のみを重合させた後、電場や磁場又は温度等の条件を変化させることにより、未重合部分の配向状態を変化させて、更に活性エネルギー線を照射して重合させるという手段を用いても良い。特に紫外線露光する際には、液晶組成物に交流電界を印加しながら紫外線露光することが好ましい。印加する交流電界は、周波数10Hzから10kHzの交流が好ましく、周波数60Hzから10kHzがより好ましく、電圧は液晶表示素子の所望のプレチルト角に依存して選ばれる。つまり、印加する電圧により液晶表示素子のプレチルト角を制御することができる。PSVAモードの液晶表示素子においては、配向安定性及びコントラストの観点からプレチルト角を80度から89.9度に制御することが好ましい。

20

30

【0657】

本発明の液晶組成物に含まれる重合性化合物を重合させる際に使用する紫外線又は電子線等の活性エネルギー線の照射時の温度は特に制限されることはない。例えば、配向膜を有する基板を備えた液晶表示素子に本発明の液晶組成物を適用する場合は、前記液晶組成物の液晶状態が保持される温度範囲内であることが好ましい。室温に近い温度、即ち、典型的には15~35で重合させることが好ましい。

40

【0658】

一方、例えば、配向膜を有していない基板を備えた液晶表示素子に本発明の液晶組成物を適用する場合は、上記の配向膜を有する基板を備えた液晶表示素子に適用する照射時の温度範囲より広い温度範囲でもよい。

【0659】

紫外線を発生させるランプとしては、メタルハライドランプ、高圧水銀ランプ、超高圧水銀ランプ等を用いることができる。また、照射する紫外線の波長としては、液晶組成物の吸収波長域でない波長領域の紫外線を照射することが好ましく、必要に応じて、紫外線をカットして使用することが好ましい。照射する紫外線の強度は、0.1mW/cm<sup>2</sup>~100W/cm<sup>2</sup>が好ましく、2mW/cm<sup>2</sup>~50W/cm<sup>2</sup>が更に好ましい。照射す

50



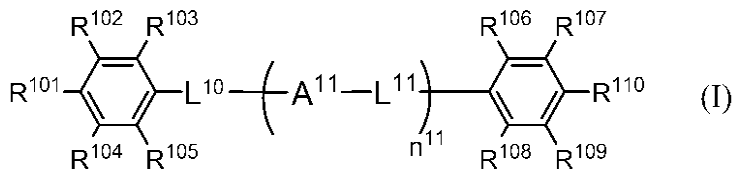
る紫外線のエネルギー量は、適宜調整することができるが、 $10 \text{ mJ} / \text{cm}^2$  から  $500 \text{ J} / \text{cm}^2$  が好ましく、 $100 \text{ mJ} / \text{cm}^2$  から  $200 \text{ J} / \text{cm}^2$  が更に好ましい。紫外線を照射する際に、強度を変化させても良い。紫外線を照射する時間は照射する紫外線強度により適宜選択されるが、10秒から3600秒が好ましく、10秒から600秒が更に好ましい。

【0660】

本発明の第三は、一般式 (I) で表される化合物である。

【0661】

【化193】



10

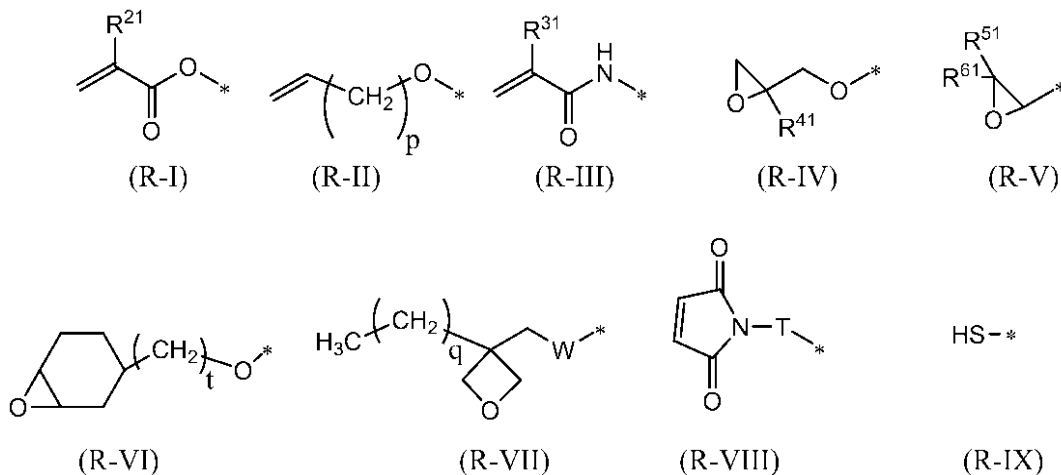
【0662】

(上記一般式 (I) 中、 $R^{101}$ 、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$ 、 $R^{109}$  及び  $R^{110}$  は、それぞれ独立して、 $P^{11} - S^{11}$ 、炭素原子数 1 から 18 のアルキル基、炭素原子数 1 から 18 のアルコキシ基、ハロゲン原子又は水素原子のいずれかを表し、 $P^{11}$  は、以下の式 (R-I) から式 (R-IX) のいずれかを表し、

20

【0663】

【化194】



30

【0664】

(上記式 (R-I) ~ (R-IX) 中、 $R^{21}$ 、 $R^{31}$ 、 $R^{41}$ 、 $R^{51}$  および  $R^{61}$  はお互いに独立して、水素原子、炭素原子数 1 ~ 5 個のアルキル基であり、W は単結合、-O- またはメチレン基であり、T は単結合または -COO- であり、p、t および q はそれぞれ独立して、0、1 または 2 である。)

40

$S^{11}$  は、単結合又は炭素原子数 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<sub>2</sub>- は、酸素原子が直接隣接しないように、-O-、-OCO- 又は -COO- で置換されてよく、

$n^{11}$  は、0、1 又は 2 を表し、

$A^{11}$  は、下記の基 (a)、基 (b) 及び基 (c) :

(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<sub>2</sub>- は又は隣接していない 2 個以上の -CH<sub>2</sub>- は -O- に置き換えられてもよい。)

(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= に置き換えられてもよい。) 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

50

、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=に置き換えられても良い。)

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、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、シアノ基、ニトロ基又は $P^{11}-S^{11}$ -で置換されていても良く、

$L^{10}$  および  $L^{11}$  は、それぞれ独立して、単結合、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-C_2H_4-$ 、 $-OC_2H_4O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CR^a-COO-$ 、 $-CH=CR^a-OCO-$ 、 $-COO-CR^a=CH-$ 、 $-OCO-CR^a=CH-$ 、 $-(CH_2)_z-COO-$ 、 $-(CH_2)_z-OCO-$ 、 $-OCO-(CH_2)_z-$ 、 $-COO-(CH_2)_z-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$  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、 $z$  はそれぞれ独立して1~4の整数を表す。)を表し、

上記一般式(I)の1分子内に少なくとも2以上の $P^{11}-S^{11}$ -を有し、

上記一般式(I)の1分子内に炭素原子数1~18個のアルキル基を有し、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 $-O-$ によって置換されていてもよく、

$P^{11}$ 、 $S^{11}$ 、 $L^{11}$  及び  $A^{11}$  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も良い。) 10

本発明に係る一般式(I)で表される化合物の好ましい形態は上記の通りである。なお、本発明に係る一般式(I)で表される化合物の最も好ましい形態は、即ち、上記一般式(I)において、 $A^{11}$  が炭素原子数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、シアノ基、ニトロ基又は $P^{11}-S^{11}$ -で置換されていても良い1,4-フェニレン基であり、

$L^{10}$  と  $L^{11}$  とは両者とも単結合であり、

$R^{101}$ 、 $R^{102}$ 、 $R^{103}$ 、 $R^{104}$ 、 $R^{105}$ 、 $R^{106}$ 、 $R^{107}$ 、 $R^{108}$ 、 $R^{109}$  及び  $R^{110}$  は、それぞれ独立して、 $P^{11}-S^{11}$ -、炭素原子数1から10の直鎖状アルキル基、炭素原子数1から10の直鎖状アルコキシ基、ハロゲン原子又は水素原子のいずれかを表し、

上記一般式(I)で表される重合性モノマーの1分子内に少なくとも2以上の $P^{11}-S^{11}$ -を有し、

上記一般式(I)の1分子内に炭素原子数1~10個のアルキル基(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 $-O-$ によって置換されていてもよい)を少なくとも1つ有し、

$n^{11}$  は、0又は1を表し、

$P^{11}$  が上記式(R-1)であり、 $S^{11}$  が単結合又は炭素原子数1~3のアルキレン基であることが特に好ましい。

#### 【0665】

以下、本発明に係る一般式(I)で表される化合物の一例の合成を説明する。

#### 【0666】

一般式(RM-3)に表される化合物の製造

4-ブロモ-2,6-ジメチルフェノールと4-ブロモ-2,6-ジメチルフェノールとのパラジウム触媒を用いた鈴木カップリング反応を行い(S-1)を得る。次いで、脱アセタール化を行い、メタクリル酸とのエステル化反応により、目的物の(RM-3)を得ることができる。

#### 【0667】

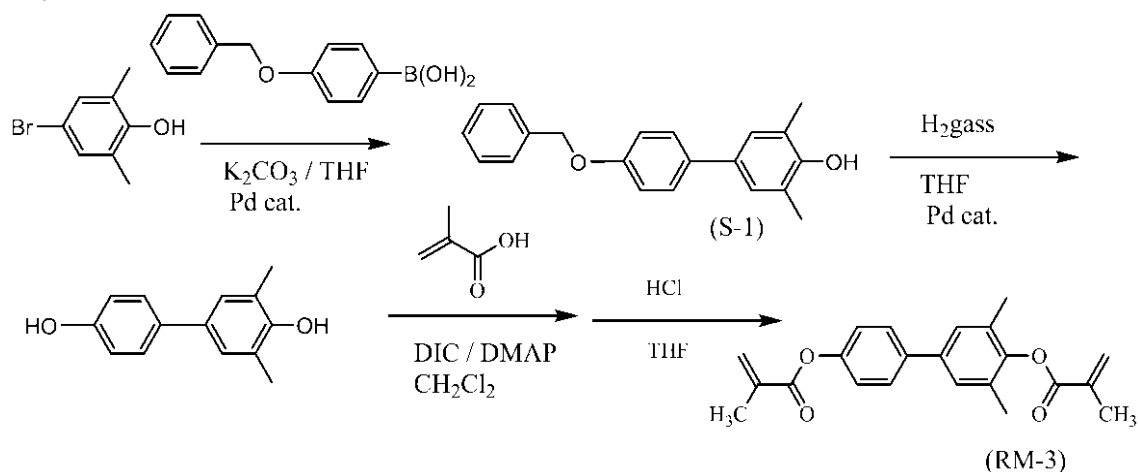
10

20

30

40

## 【化 1 9 5】



10

## 【実施例】

## 【 0 6 6 8】

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。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。

## 【 0 6 6 9】

20

(合成例 1)

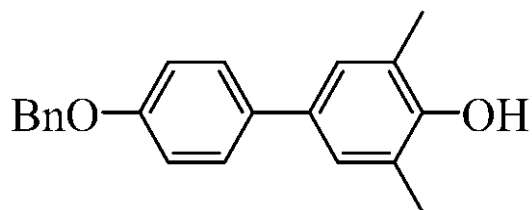
「RM-3 の合成方法」

攪拌装置、冷却器、滴下ロートを備えた反応容器に 4 - ブロモ - 2 , 6 - ジメチルフェノール 20 g、2 mol / l 炭酸カリウム水溶液 100 ml、ジクロロピス [ジ - t - ブチル (p - ジメチルアミノフェノール) ホスフィノ] パラジウム 3 . 5 g、THF 100 ml を仕込み、50 で攪拌した。4 - ベンジルオキシフェニルボロン酸 24 g の THF 溶液 100 ml をゆっくり滴下した。そのまま 50 で 5 時間反応させた。反応終了後、冷却し、酢酸エチル 200 ml を加え、有機層を水、飽和食塩水で洗浄し、溶媒を留去し、シリカゲルカラムによる精製とヘキサン・酢酸エチルによる再結晶を行い、目的化合物 4' - ベンジルオキシ - 3 , 5 - ジメチル - 4 - ビフェノールを 26 g 得た。

30

## 【 0 6 7 0】

## 【化 1 9 6】



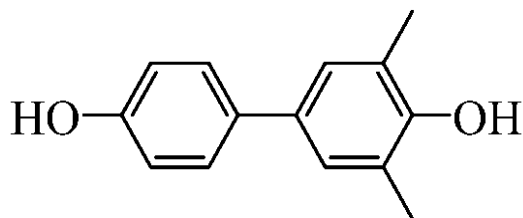
## 【 0 6 7 1】

オートクレーブに 4' - ベンジルオキシ - 3 , 5 - ジメチル - 4 - ビフェノール 18 g、5 % パラジウム炭素 0 . 9 g、THF 100 ml を加え、水素圧 0 . 5 MPa 下、50 で 3 時間攪拌した。反応後、セルロースでろ過し、さらに THF で洗浄した、ろ液を濃縮し、シリカゲルカラムによる精製、ヘキサンによる分散洗浄を行い、目的化合物 4 , 4' - ジヒドロキシ - 3 , 5 - ビフェニル 13 g を得た。

40

## 【 0 6 7 2】

## 【化 1 9 7】



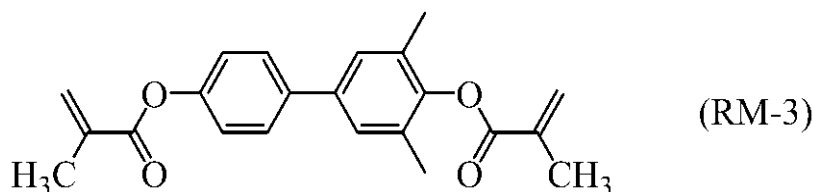
## 【 0 6 7 3】

更に攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に、合成した 4, 4' - ジヒドロキシ - 3, 5 - ビフェニル 8 g ( 3 7 ミリモル )、メタクリル酸 7 . 1 g ( 8 2 ミリモル )、ジメチルアミノピリジン 0 . 2 3 g、ジクロロメタン 1 6 0 m l を仕込み、氷冷バスにて 5 以下に反応容器を保ち、ジイソプロピルカルボジイミド 1 1 g ( 9 0 ミリモル ) をゆっくり滴下した。滴下終了後、反応容器を室温に戻し 1 1 時間反応させた。反応液をろ過した後、ろ液にジクロロメタン 1 5 0 m l を加え、5 % 塩酸水溶液で洗浄し、更に飽和食塩水で洗浄し、有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を留去した後、シリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製を行い、式 ( R M - 3 ) 表される目的化合物を 1 1 g 得た。

10

## 【 0 6 7 4】

## 【化 1 9 8】



(RM-3)

20

## 【 0 6 7 5】

得られた化合物の物性値 (  $^1\text{H}$  - NMR、 $^{13}\text{C}$  - NMR および融点 ) は以下の通りである。物性値 :  $^1\text{H}$  - NMR ( 溶媒 : 重クロロホルム ) : : 7 . 5 7 - 7 . 5 4 ( m , 2 H ) , 7 . 2 6 ( s , 2 H ) , 7 . 1 9 - 7 . 1 5 ( m , 2 H ) , 6 . 3 9 ( d , 2 H ) , 5 . 7 6 ( d q , 2 H ) , 2 . 2 1 ( s , 6 H ) , 2 . 1 1 ( d , 3 H ) , 2 . 0 7 ( d , 3 H )

30

$^{13}\text{C}$  - NMR ( 溶媒 : 重クロロホルム ) : 1 6 5 . 8 , 1 6 5 . 1 , 1 5 0 . 2 , 1 4 7 . 8 , 1 3 8 . 4 , 1 3 8 . 0 , 1 3 5 . 8 , 1 3 5 . 5 , 1 3 0 . 5 , 1 3 0 . 5 , 1 2 8 . 0 , 1 2 8 . 0 , 1 2 7 . 3 , 1 2 7 . 3 , 1 2 7 . 2 , 1 2 7 . 1 , 1 2 1 . 7 , 1 2 1 . 7 , 1 8 . 4 , 1 8 . 3 , 1 6 . 4 , 1 6 . 4

融点 : 1 1 1

( 合成例 2 )

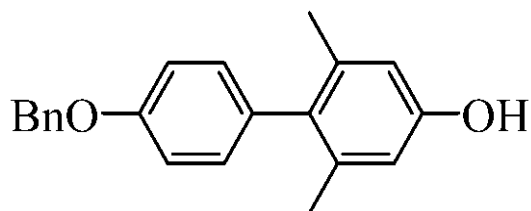
「 R M - 4 の合成方法」

攪拌装置、冷却器、滴下ロートを備えた反応容器に 4 - ブロモ - 3, 5 - ジメチルフェノール 1 0 g、2 m o l / l 炭酸カリウム水溶液 5 0 m l、ジクロロビス [ ジ - t - ブチル ( p - ジメチルアミノフェノール ) ホスフィノ ] パラジウム 1 . 8 g、T H F 5 0 m l を仕込み、5 0 で攪拌した。4 - ベンジルオキシフェニルボロン酸 1 2 g の T H F 溶液 3 6 m l をゆっくり滴下した。そのまま 5 0 で 4 時間反応させた。反応終了後、冷却し、酢酸エチル 5 0 m l を加え、有機層を水、飽和食塩水で洗浄し、溶媒を留去し、シリカゲルカラムによる精製とヘキサン・酢酸エチルによる洗浄を行い、目的化合物 4' - ベンジルオキシ - 2, 6 - ジメチル - 4 - ビフェノールを 1 3 g 得た。

40

## 【 0 6 7 6】

## 【化 1 9 9】



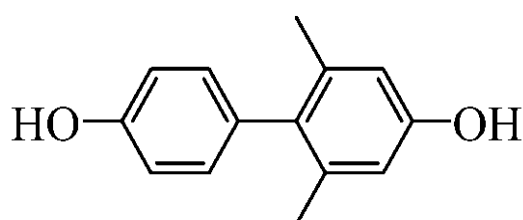
## 【 0 6 7 7】

オートクレープに 4'-ベンジルオキシ-2,6-ジメチル-4-ピフェノール 11 g、5%パラジウム炭素 0.6 g、THF 100 ml を加え、水素圧 0.5 MPa 下、50 で 3 時間攪拌した。反応後、セルロースでろ過し、さらに THF で洗浄した、ろ液を濃縮し、シリカゲルカラムによる精製、ヘキサンによる分散洗浄を行い、目的化合物 4,4'-ジヒドロキシ-2,6-ビフェニル 7 g を得た。

10

## 【 0 6 7 8】

## 【化 2 0 0】



20

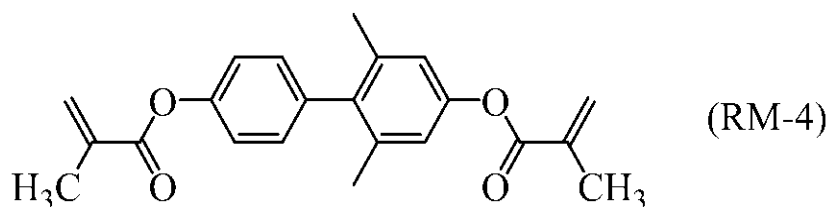
## 【 0 6 7 9】

更に攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に、4,4'-ジヒドロキシ-2,6-ビフェニル 7 g (32 ミリモル)、メタクリル酸 6.0 g (70 ミリモル)、ジメチルアミノピリジン 0.2 g、ジクロロメタン 140 ml を仕込み、氷冷バスにて 5 以下に反応容器を保ち、ジイソプロピルカルボジイミド 9.6 g (76 ミリモル) を溶解した THF 50 ml をゆっくり滴下した。滴下終了後、反応容器を室温に戻し 15 時間反応させた。反応液をろ過した後、ろ液にジクロロメタン 120 ml を加え、5%塩酸水溶液で洗浄し、更に飽和食塩水で洗浄し、有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を留去した後、アミノシリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製を行い、さらにメタノールによる分散洗浄した。-20 で析出させた後、ろ取、真空乾燥を行い、式 (RM-4) 表される目的の化合物を 11 g 得た。

30

## 【 0 6 8 0】

## 【化 2 0 1】



(RM-4)

40

## 【 0 6 8 1】

得られた化合物の物性値 ( $^1\text{H}$ -NMR、 $^{13}\text{C}$ -NMR および融点) は以下の通りである。物性値:  $^1\text{H}$ -NMR (溶媒: 重クロロホルム): 7.64 - 7.54 (m, 4 H), 7.26 (s, 2 H), 6.75 (d, 2 H), 6.15 (dq, 2 H), 2.48 - 2.46 (m, 6 H), 2.43 (s, 6 H)

$^{13}\text{C}$ -NMR (溶媒: 重クロロホルム): 166.4, 166.1, 150.1, 149.9, 138.8, 138.1, 136.3, 136.2, 130.5, 130.5, 128.4, 128.4, 127.5, 127.4, 122.2, 121.9, 120.4, 120.4, 21.3, 21.2,

50

18.7, 18.7

融点：89

(合成例3)

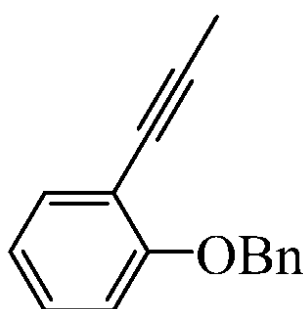
「RM-7の合成方法」

窒素雰囲気下、攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に、1-ベンジルオキシ-2-ブロモベンゼン25g、トリエチルアミン10g、1-トリメチルシリル-1-プロピン13g、及びN,N-ジメチルホルムアミド250mlを仕込み、触媒としてテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム1.5gを室温で加えた後、反応容器を70に加熱して7時間撪拌した。放冷した後、水及びトルエンを加えて分液し、水層にトルエンを加えて抽出し、併せた有機層を水及び飽和食塩水にて洗浄した。無水硫酸ナトリウムを加えて乾燥した後、有機溶媒を減圧留去し、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、以下の化学式で表される目的化合物18gを得た。

10

【0682】

【化202】



20

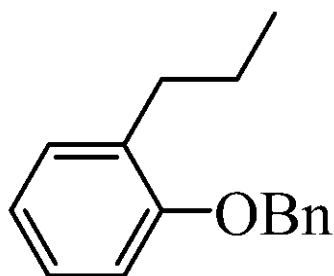
【0683】

オートクレーブに先に合成した化合物18g、5%パラジウム炭素0.5g、THF60mlを加え、水素圧0.5MPa下、40で5時間撪拌した。反応後、セルロースでろ過し、さらにTHFで洗浄した、ろ液を濃縮し、シリカゲルカラムによる精製を行い、以下の化学式で表される目的化合物16gを得た。

【0684】

【化203】

30



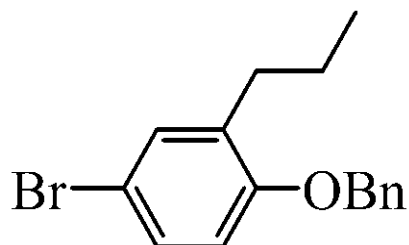
【0685】

攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に1-ベンジルオキシ-2-プロピルベンゼン16g、アセトニトリル100mlを仕込み、0でN-ブロモコハク酸イミド12.5gを加え、室温で4時間撪拌した。反応液を減圧濃縮後、ヘキサンを加え沈殿物をろ過した。ろ液を水、飽和食塩水で洗浄後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒を減圧濃縮し、以下の化学式で表される目的化合物18gを得た。

40

【0686】

## 【化 2 0 4】



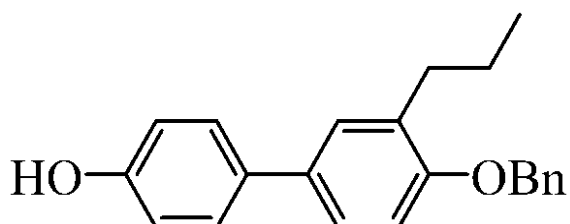
## 【 0 6 8 7】

攪拌装置、冷却器、滴下ロートを備えた反応容器に 4 - ブロモ - 1 - ベンジルオキシ - 2 - プロピルベンゼン 17 g、2 mol / l 炭酸カリウム水溶液 60 ml、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 0.8 g、エタノール 60 ml を仕込み、50 で攪拌した。4 - ヒドロキシフェニルボロン酸 9 g の THF 溶液 20 ml をゆっくり滴下した。そのまま 50 で 6 時間反応させた。反応終了後、冷却し、酢酸エチル 100 ml を加え、有機層を水、飽和食塩水で洗浄し、溶媒を留去し、シリカゲルカラムによる精製とヘキサンによる際結晶を行い、以下の化学式で表される目的化合物を 13 g 得た。

10

## 【 0 6 8 8】

## 【化 2 0 5】



20

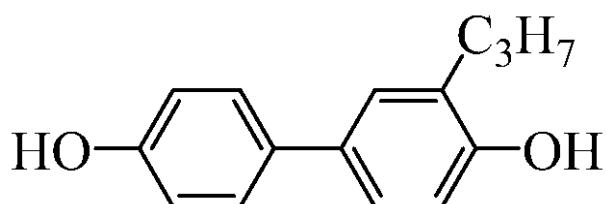
## 【 0 6 8 9】

オートクレーブに先に合成した化合物 12 g、5 % パラジウム炭素 0.6 g、THF 80 ml を加え、水素圧 0.5 MPa 下、50 で 4 時間攪拌した。反応後、セルロースでろ過し、さらに THF で洗浄した、ろ液を濃縮し、シリカゲルカラムによる精製を行い、以下の化学式で表される目的化合物 11 g を得た。

30

## 【 0 6 9 0】

## 【化 2 0 6】



## 【 0 6 9 1】

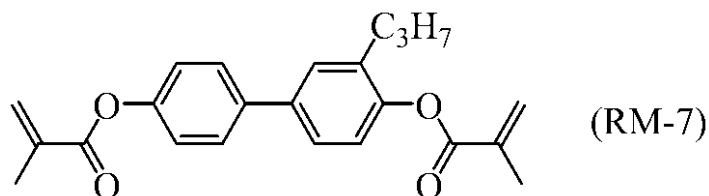
更に攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に、先に合成した化合物 10 g (43 ミリモル)、メタクリル酸 7.7 g (90 ミリモル)、ジメチルアミノピリジン 0.2 g、ジクロロメタン 100 ml を仕込み、氷冷バスにて 5 以下に反応容器を保ち、ジイソプロピルカルボジイミド 11.6 g (91 ミリモル) を溶解した THF 50 ml をゆっくり滴下した。滴下終了後、反応容器を室温に戻し 10 時間反応させた。反応液をろ過した後、ろ液にジクロロメタン 100 ml を加え、5 % 塩酸水溶液で洗浄し、更に飽和食塩水で洗浄し、有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を留去した後、アミノシリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製を行い、さらにメタノールによる分散洗浄した。- 20 で静置させた後、ろ取、真空乾燥を行い、式 (RM - 7) で表される目的の化合物を 11 g 得た。

40

## 【 0 6 9 2】

50

## 【化 2 0 7】



## 【 0 6 9 3】

得られた化合物の物性値 ( $^1\text{H}$ -NMR、 $^{13}\text{C}$ -NMR および融点) は以下の通りである。物性値:  $^1\text{H}$ -NMR (溶媒: 重クロロホルム): 7.70 - 7.58 (m, 4 H), 7.34 (d, 1 H), 7.18 (d, 2 H), 6.55 (d, 2 H), 6.15 (d, 2 H), 2.46 (t, 2 H), 2.18 (s, 6 H), 1.66 (m, 2 H), 0.96 (t, 3 H)

10

$^{13}\text{C}$ -NMR (溶媒: 重クロロホルム): 166.2, 166.1, 150.2, 146.9, 138.0, 137.6, 136.0, 135.7, 132.5, 128.0, 128.0, 127.8, 127.8, 122.1, 121.9, 121.8, 120.7, 120.6, 32.6, 24.1, 18.1, 18.0, 12.8

融点: 119

20

(合成例 4)

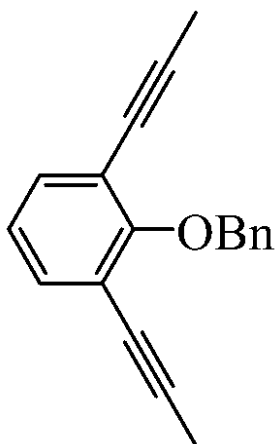
「RM-18 の合成方法」

窒素雰囲気下、攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に、1-ベンジルオキシ-2,6-ジプロモベンゼン 30 g、トリエチルアミン 10 g、1-トリメチルシリル-1-プロピン 25 g、及び N,N-ジメチルホルムアミド 300 ml を仕込み、触媒としてテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 2 g を室温で加えた後、反応容器を 70 に加熱して 8 時間攪拌した。放冷した後、水及びトルエンを加えて分液し、水層にトルエンを加えて抽出し、併せた有機層を水及び飽和食塩水にて洗浄した。無水硫酸ナトリウムを加えて乾燥した後、有機溶媒を減圧留去し、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、目的化合物 20 g を得た。

30

## 【 0 6 9 4】

## 【化 2 0 8】



40

## 【 0 6 9 5】

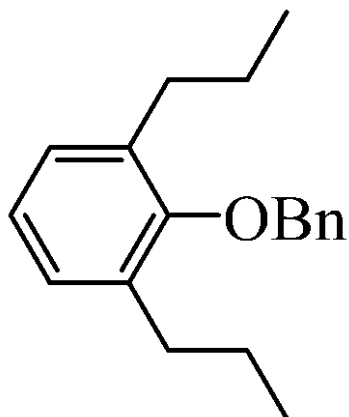
オートクレーブに先に合成した化合物 20 g、5%パラジウム炭素 0.6 g、THF 100 ml を加え、水素圧 0.5 MPa 下、50 で 5 時間攪拌した。反応後、セルロースでろ過し、さらに THF で洗浄した、ろ液を濃縮し、シリカゲルカラムによる精製を行い、以下の化学式で表される目的化合物 18 g を得た。

## 【 0 6 9 6】

50



【化 2 0 9】



10

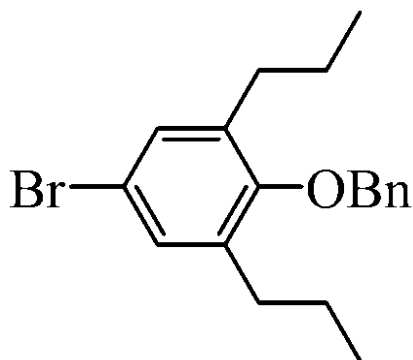
【 0 6 9 7】

攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に 1 - ベンジルオキシ - 2 , 6 - ジプロピルベンゼン 1 6 g、アセトニトリル 1 0 0 m l を仕込み、0 で N - ブロモコハク酸イミド 1 2 g を加え、室温で 6 時間攪拌した。反応液を減圧濃縮後、ヘキサンを加え沈殿物をろ過した。ろ液を水、飽和食塩水で洗浄後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒を減圧濃縮し、以下の化学式で表される目的化合物 1 8 g を得た。

【 0 6 9 8】

20

【化 2 1 0】



30

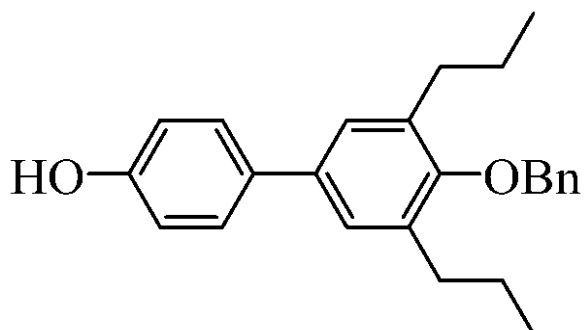
【 0 6 9 9】

攪拌装置、冷却器、滴下ロートを備えた反応容器に 4 - ブロモ - 1 - ベンジルオキシ - 3 , 5 - ジプロピルベンゼン 1 6 g、2 m o l / l 炭酸カリウム水溶液 6 0 m l、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 1 . 0 g、エタノール 5 0 m l を仕込み、5 0 で攪拌した。4 - ヒドロキシフェニルボロン酸 1 2 g の T H F 溶液 3 0 m l をゆっくり滴下した。そのまま 6 0 で 1 0 時間反応させた。反応終了後、冷却し、酢酸エチル 1 0 0 m l を加え、有機層を水、飽和食塩水で洗浄し、溶媒を留去し、シリカゲルカラムによる精製とヘキサンによる際結晶を行い、以下の化学式で表される目的化合物を 1 2 g 得た。

【 0 7 0 0】

40

【化 2 1 1】



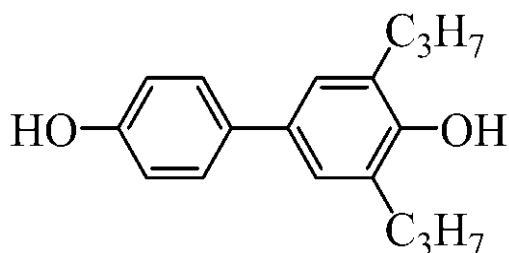
50

## 【 0 7 0 1 】

オートクレーブに先に合成した化合物 11 g、5 %パラジウム炭素 0.6 g、THF 50 mlを加え、水素圧 0.5 MPa下、50℃で5時間攪拌した。反応後、セルロースでろ過し、さらにTHFで洗浄した、ろ液を濃縮し、シリカゲルカラムによる精製を行い、以下の化学式で表される目的化合物 7.5 gを得た。

## 【 0 7 0 2 】

## 【 化 2 1 2 】



10

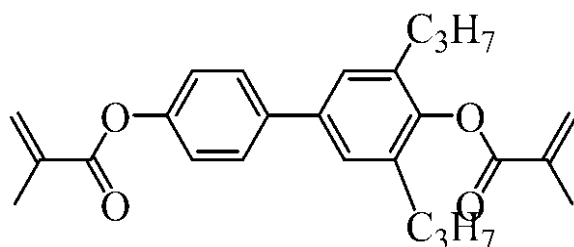
## 【 0 7 0 3 】

更に攪拌装置、冷却器及び温度計を備えた反応容器に、上記で表される化合物 7 g (25ミリモル)、メタクリル酸 4.7 g (54ミリモル)、ジメチルアミノピリジン 0.2 g、ジクロロメタン 100 mlを仕込み、氷冷バスにて5℃以下に反応容器を保ち、ジイソプロピルカルボジイミド 7 g (55ミリモル)を溶解したTHF 50 mlをゆっくり滴下した。滴下終了後、反応容器を室温に戻し15時間反応させた。反応液をろ過した後、ろ液にジクロロメタン 100 mlを加え、5 %塩酸水溶液で洗浄し、更に飽和食塩水で洗浄し、有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を留去した後、アミノシリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製を行い、さらにメタノールによる分散洗浄した。-20℃で析出させた後、ろ取、真空乾燥を行い、以下の式 (RM-18) 表される目的の化合物を 8 g得た。

20

## 【 0 7 0 4 】

## 【 化 2 1 3 】



30

## 【 0 7 0 5 】

得られた化合物の物性値 ( $^1\text{H}$ -NMR、 $^{13}\text{C}$ -NMRおよび融点)は以下の通りである。物性値: ( $^1\text{H}$ -NMR (溶媒:重クロロホルム): 7.64 - 7.54 (m, 4 H), 7.26 (s, 2 H), 6.75 (d, 2 H), 6.15 (dq, 2 H), 2.48 - 2.46 (t, 4 H), 2.23 (s, 6 H), 1.64 (m, 4 H), 0.96 (t, 6 H)

40

$^{13}\text{C}$ -NMR (溶媒:重クロロホルム): 166.4, 166.0, 150.2, 146.8, 138.4, 137.6, 136.0, 135.8, 132.5, 132.5, 128.0, 128.0, 127.8, 127.8, 122.1, 121.9, 120.7, 120.6, 32.8, 32.8, 24.3, 24.2, 17.9, 17.9, 12.8, 12.8

融点: 125

実施例中、測定した特性は以下の通りである。

## 【 0 7 0 6 】

$T_{ni}$ : ネマチック相 - 等方性液体相転移温度 ( )

$n$ : 20℃における屈折率異方性

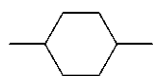
50

: 20 における粘度 ( m P a · s )  
 1 : 20 における回転粘性 ( m P a · s )  
 : 20 における誘電率異方性  
 $K_{33}$  : 20 における弾性定数  $K_{33}$  ( p N )

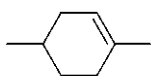
< 環構造 >

【 0 7 0 7 】

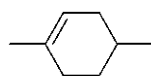
【 化 2 1 4 】



Cy

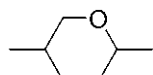


Cy1

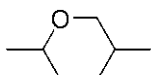


Cy2

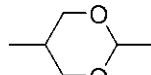
10



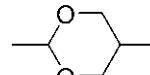
Py



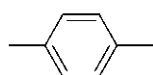
Py'



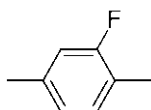
Oc



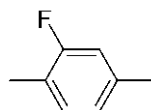
Oc'



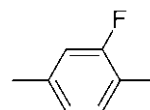
Ph



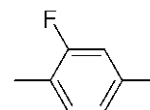
Ph1



Ph2

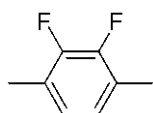


Ph3

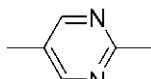


Ph4

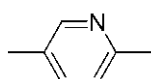
20



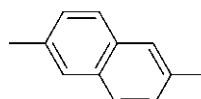
Ph5



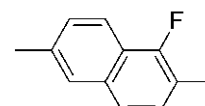
Ma



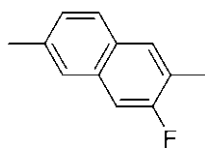
Mb



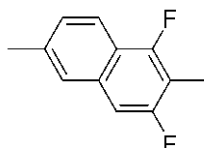
Np



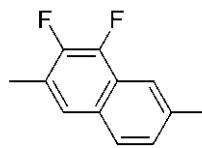
Np1



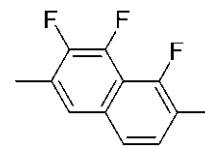
Np2



Np3



Np4



Np5

30

【 0 7 0 8 】

< 側鎖構造 >

【 0 7 0 9 】

【表 1】

略号	化学構造
$-n$	$-C_nH_{2n+1}$
$n-$	$C_nH_{2n+1}-$
$-On$	$-OC_nH_{2n+1}$
$nO-$	$C_nH_{2n+1}O-$
$-V$	$-CH=CH_2$
$V-$	$CH_2=CH-$
$-VI$	$-CH=CH-CH_3$
$1V-$	$CH_3-CH=CH-$
$-2V$	$-CH_2-CH_2-CH=CH_2$
$V2-$	$CH_2=CH-CH_2-CH_2-$
$-2V1$	$-CH_2-CH_2-CH=CH-CH_3$
$1V2-$	$CH_3-CH=CH-CH_2-CH_2-$

10

20

30

【0710】

(ただし、表中の n は自然数である。)

&lt;連結構造&gt;

【0711】

【表 2】

略号	化学構造
—n—	—C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> —
—nO—	—C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> O—
—On—	—OC <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> —
—COO—	—C(=O)—O—
—OCO—	—O—C(=O)—
—V—	—CH=CH—
—nV—	—C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> —CH=CH—
—Vn—	—CH=CH—C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> —
—T—	—C≡C—
—CF <sub>2</sub> O—	—CF <sub>2</sub> —O—
—OCF <sub>2</sub> —	—O—CF <sub>2</sub> —

10

## 【0712】

20

(ただし、表中のnは自然数である。)

本実施例および比較例における「低温保存性」、「垂直配向性」、「プレチルト角形成」および「応答特性」の評価は以下の方法で行った。

## 【0713】

(低温保存性の評価試験)

液晶組成物をメンブレンフィルター(Agilent Technologies社製、PTFE 13m-0.2μm)にてろ過を行い、真空減圧条件にて15分間静置し溶存空気の除去を行った。これをアセトンにて洗浄し十分に乾燥させたバイアル瓶に0.5g秤量し、-25℃の環境下に10日間静置した。その後、目視にて析出の有無を観察し、以下の2段階で判定した。

30

## 【0714】

A：析出が確認できない。

## 【0715】

B：1週間後に析出する。

## 【0716】

D：析出が確認できる。

## 【0717】

(垂直配向性の評価試験)

絶縁層上にパターン化された透明な共通電極からなる透明電極層を有し、カラーフィルター層を具備した配向膜を有さない第一の基板(共通電極基板)と、アクティブ素子により駆動される透明画素電極を有する画素電極層を有する配向膜を有さない第二の基板(画素電極基板)とを作製した。第一の基板上に液晶組成物を滴下し、第二の基板上で挟持し、シール材を常圧で110℃2時間の条件で硬化させ、セルギャップ3.2μmの液晶セルを得た。このときの垂直配向性および滴下痕などの配向ムラを、偏光顕微鏡を用いて観察し、以下の4段階で評価した。

40

## 【0718】

A：全面に渡り、均一に垂直配向

B：ごく僅かに配向欠陥が有るも許容できるレベル

C：配向欠陥が有り許容できないレベル

D：配向不良がかなり劣悪

50

(ブレチルト角形成の評価試験)

上記(垂直配向性の評価試験)で使用した液晶セルの初期状態のブレチルト角をシンテック製OPTIPROを用いて測定した。

【0719】

(応答特性の評価試験)

上記(ブレチルト角形成の評価試験)にて使用したセルギャップ $3.2\text{ }\mu\text{m}$ のセルに、さらに、東芝ライテック社製のUV蛍光ランプを60分間照射した( $313\text{ nm}$ における照度 $1.7\text{ mW/cm}^2$ )。これにより得られたセルに対して、応答速度を測定した。応答速度は、 $6\text{ V}$ における $V_{off}$ を、 $25$ の温度条件で、AUTRONIC-MELCHERS社のDMS703を用いて測定した。

10

【0720】

(液晶組成物の調製と評価結果)

上記合成例で得られた化合物または下記に示すと通りの化合物と混合比率で液晶組成物を調製し、その組成物をLC-1とした。以下に液晶組成物の構成とその物性値の結果を示した。

【0721】

LC-1のネマチック相-等方性液体相転移温度( $T_{NI}$ )は $75$ 、固体相-ネマチック相転移温度( $T_{CN}$ )は $-33$ 、屈折率異方性( $n$ )は $0.11$ 、誘電率異方性( $\epsilon$ )は $-2.8$ 、回転粘性( $\gamma_1$ )は $98\text{ mPa}\cdot\text{s}$ であった。なお、屈折率異方性( $n$ )、誘電率異方性( $\epsilon$ )、及び回転粘性( $\gamma_1$ )は、いずれも $25$ における測定結果である(以下、同様)。

20

【0722】

【表 3】

		L C - 1
液晶化合物	<b>3-Ph-Ph-O1</b>	6
[質量%]	<b>3-Ph-Ph-1</b>	9
	<b>3-Cy-Cy-Ph-1</b>	7
	<b>3-Cy-10-Ph5-O1</b>	6
	<b>3-Cy-10-Ph5-O2</b>	8
	<b>2-Cy-Cy-10-Ph5-O2</b>	6
	<b>3-Cy-Cy-10-Ph5-O2</b>	8
	<b>2-Cy-Ph-Ph5-O2</b>	7
	<b>3-Cy-Ph-Ph5-O2</b>	6
	<b>3-Cy-Ph-Ph5-O3</b>	6
	<b>3-Cy-Cy-2</b>	20
	<b>3-Cy-Cy-5</b>	5
	<b>3-Cy-Ph-Ph-2</b>	6
	合計	100
物性値	<b>Tni [°C]</b>	75
	<b>Δn</b>	0.112
	<b>Δε</b>	-3
	<b>γ<sub>1</sub> [mPa・s]</b>	122
	<b>K<sub>11</sub> [pN]</b>	14.1
	<b>K<sub>33</sub> [pN]</b>	13.9

10

20

## 【 0 7 2 3 】

30

( 比較例 1 ~ 4 )

L C - 1 を 1 0 0 質量部としたときに、下記の自発配向性モノマー ( P - 1 ) を 1 . 0 質量部、式 ( R M - R 1 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部添加した重合性化合物を含有する液晶組成物を比較例 1 とした。

## 【 0 7 2 4 】

液晶組成物 L C - 1 を 1 0 0 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 1 ) を 1 . 0 質量部、式 ( R M - R 2 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部添加した重合性化合物を含有する液晶組成物を比較例 2 とした。

## 【 0 7 2 5 】

液晶組成物 L C - 1 を 1 0 0 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 1 ) を 1 . 0 質量部、式 ( R M - R 2 ) で表される化合物を 0 . 6 質量部添加した重合性化合物を含有する液晶組成物を比較例 3 とした。

40

## 【 0 7 2 6 】

液晶組成物 L C - 1 を 1 0 0 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 1 ) を 1 . 0 質量部、式 ( R M - R 2 ) で表される化合物を 0 . 9 質量部添加した重合性化合物を含有する液晶組成物を比較例 4 とした。

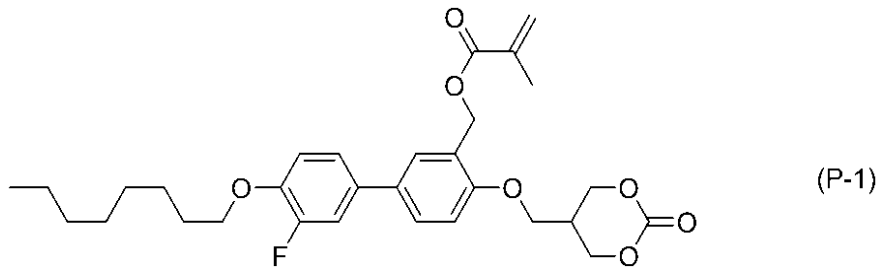
## 【 0 7 2 7 】

比較例 1 ~ 4 の紫外線照射後の重合性化合物の垂直配向性試験の結果は表2のとおりであった。

## 【 0 7 2 8 】

50

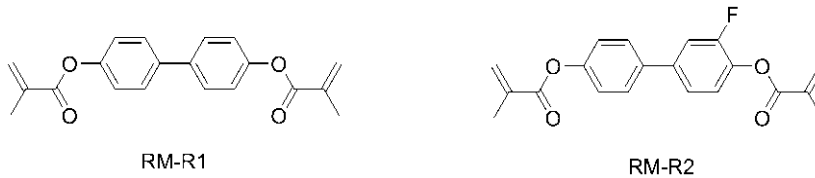
【化 2 1 5】



【 0 7 2 9】

10

【化 2 1 6】



【 0 7 3 0】

【表 4】

	ベース組成物 (100質量部)	自発配向性モノマー	重合性化合物	添加量 (質量部)	低温保存性	垂直配向性試験
比較例1	LC-1	P-1	RM-R1	0.3	A	C
比較例2	LC-1	P-1	RM-R2	0.3	A	C
比較例3	LC-1	P-1	RM-R2	0.6	A	C
比較例4	LC-1	P-1	RM-R2	0.9	B	D

20

【 0 7 3 1】

(実施例1～111)

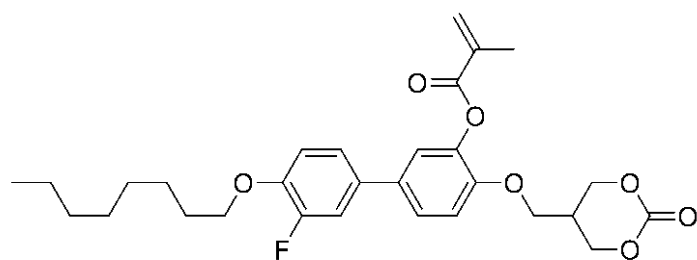
30

下記に示す自発配向性モノマー(P-2)から(P-35)および重合性モノマー(RM-1)から(RM-15)をそれぞれ下記表3に示す添加量でLC-1に添加した以外は、比較例1と同様にして液晶組成物を調製した。

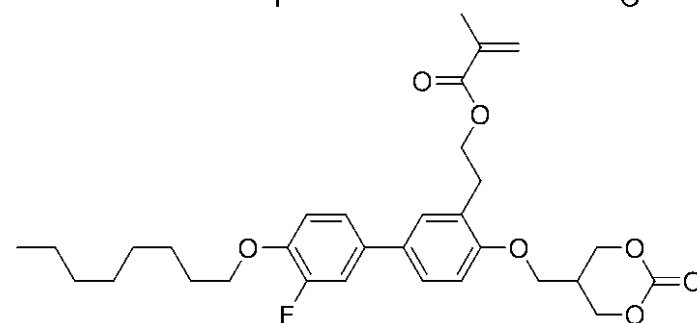
【 0 7 3 2】



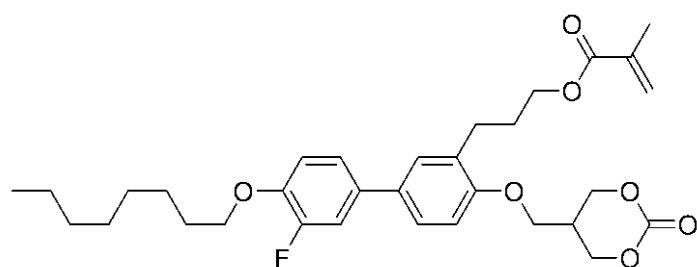
【化 2 1 7】



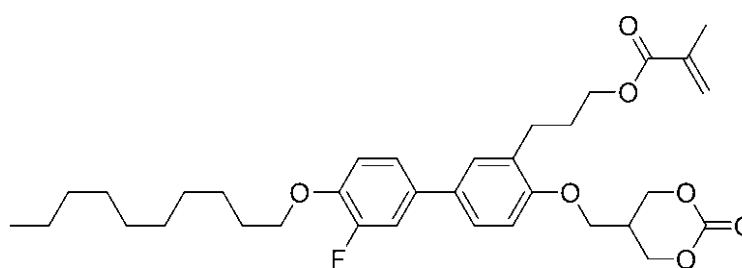
(P-2)



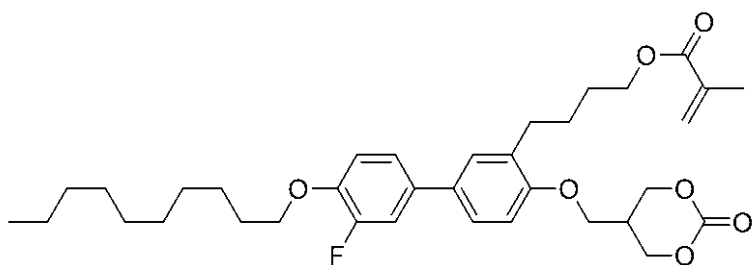
(P-3)



(P-4)



(P-5)



(P-6)

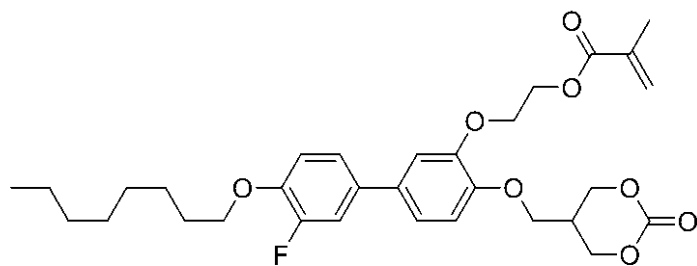
【 0 7 3 3 】

10

20

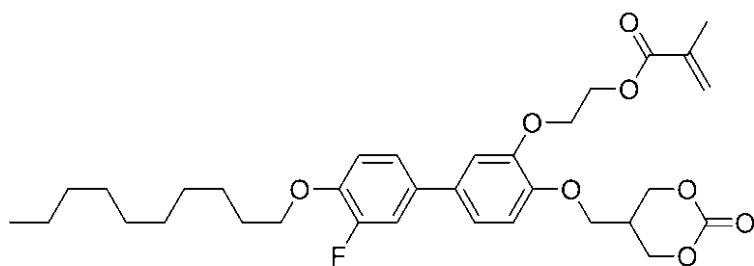
30

【化 2 1 8】

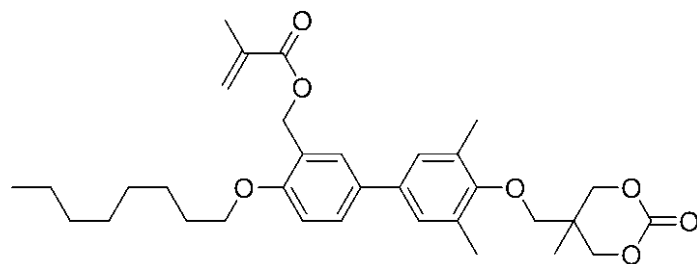


(P-7)

10

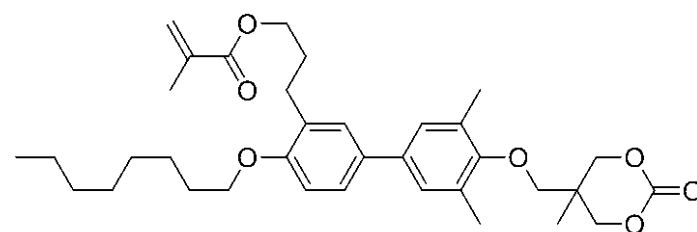


(P-8)



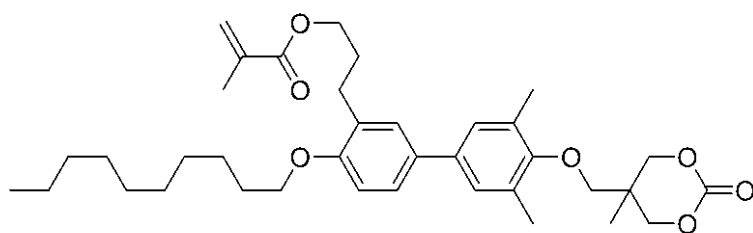
(P-9)

20

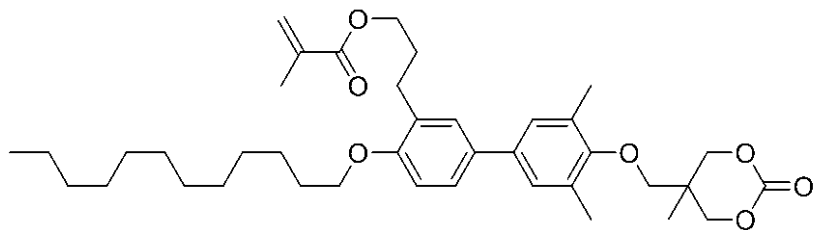


(P-10)

30



(P-11)

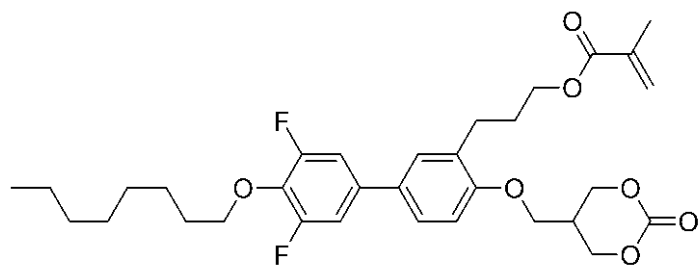


(P-12)

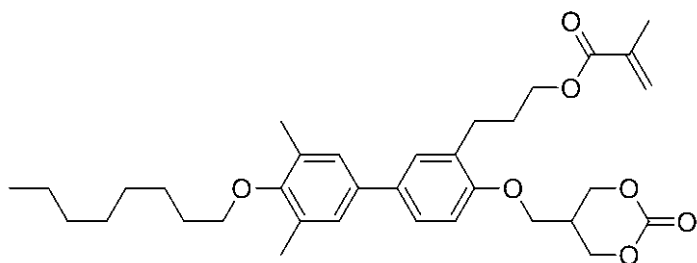
40

【 0 7 3 4】

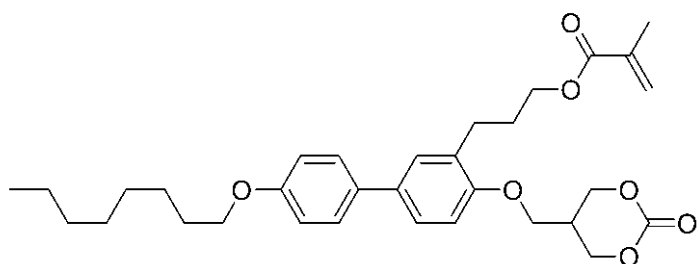
【化 2 1 9】



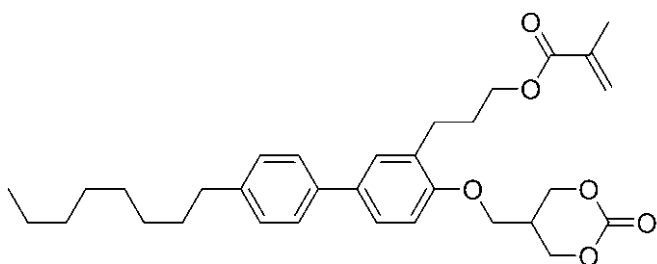
(P-13)



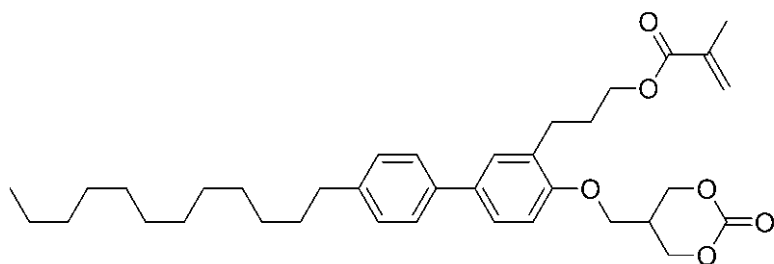
(P-14)



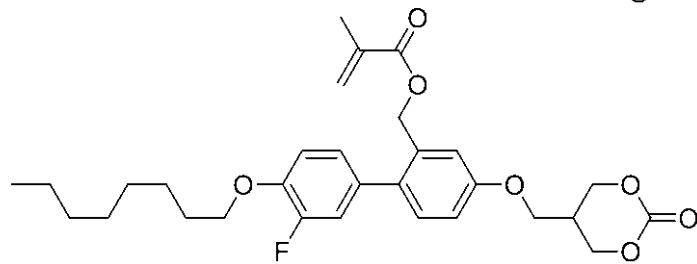
(P-15)



(P-16)



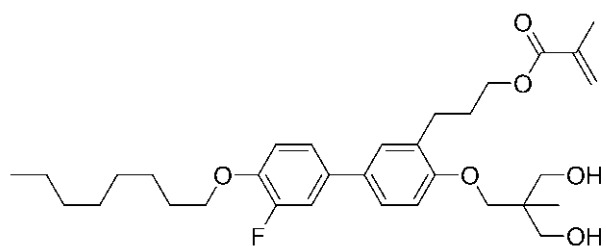
(P-17)



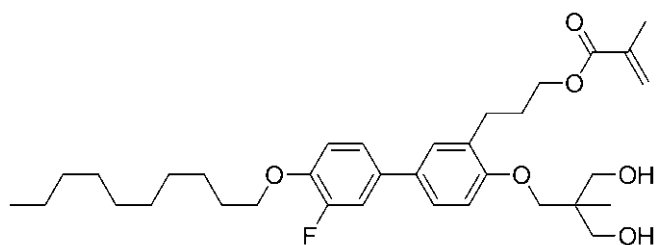
(P-18)

【 0 7 3 5】

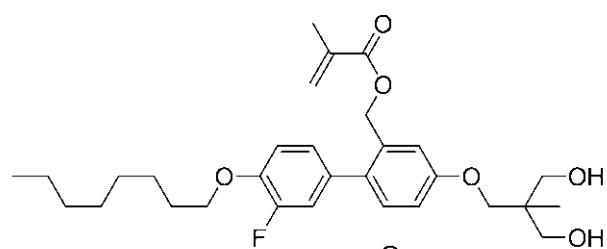
【化 2 2 0】



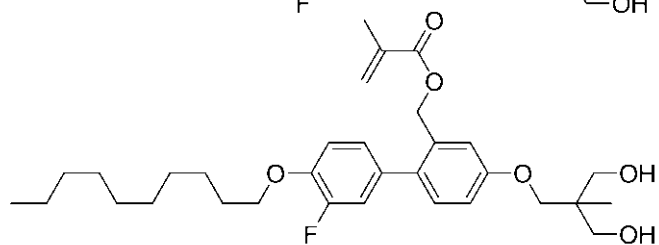
(P-19)



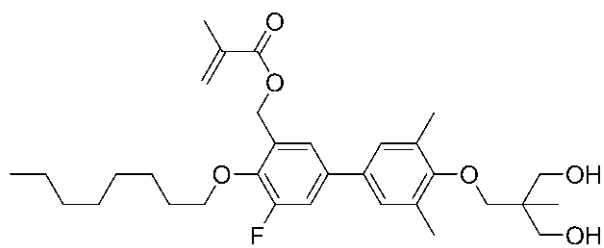
(P-20)



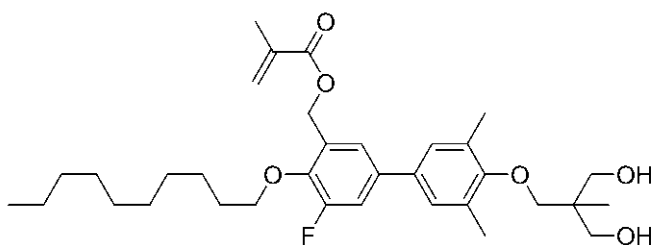
(P-21)



(P-22)



(P-23)



(P-24)

【 0 7 3 6 】

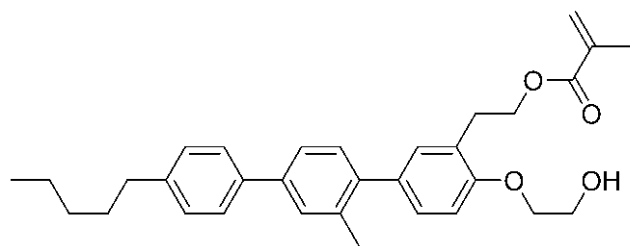
10

20

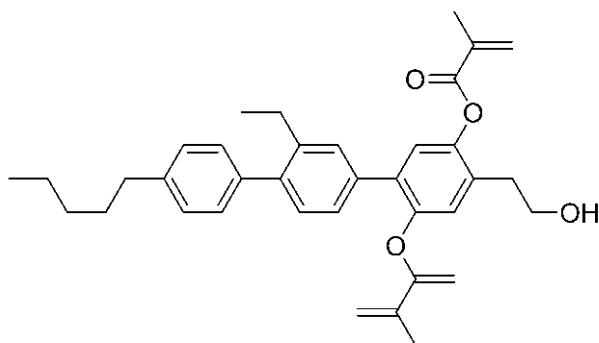
30

40

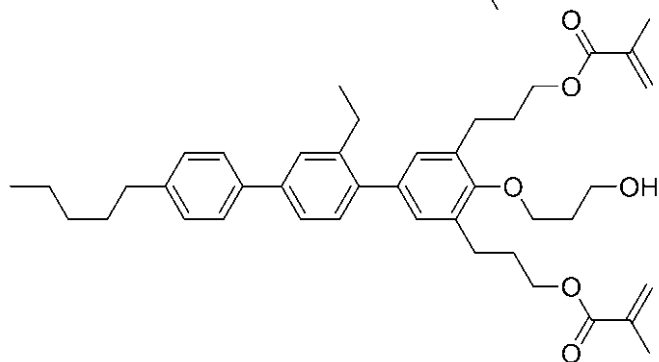
【化 2 2 1】



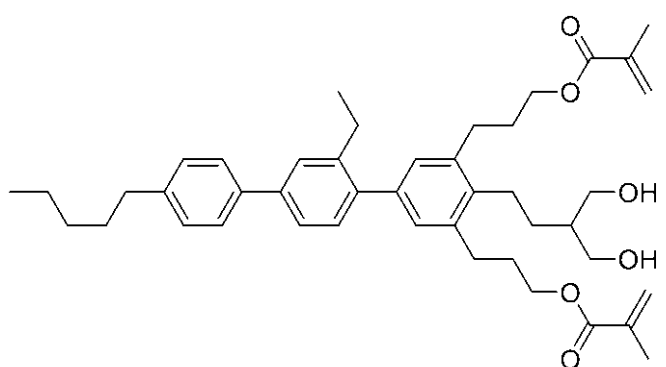
(P-25)



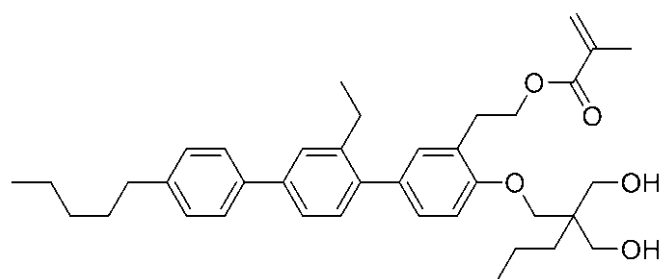
(P-26)



(P-27)



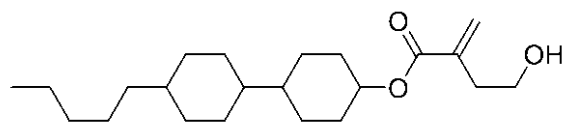
(P-28)



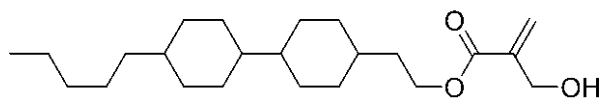
(P-29)

【 0 7 3 7 】

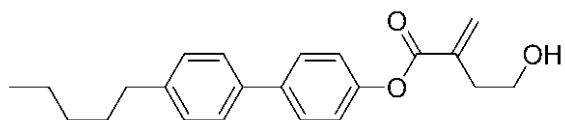
【化 2 2 2】



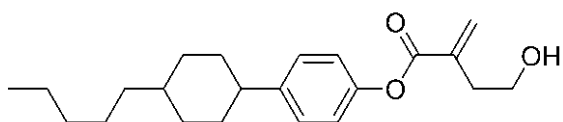
(P-30)



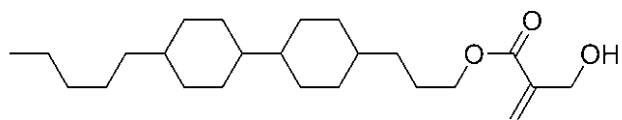
(P-31)



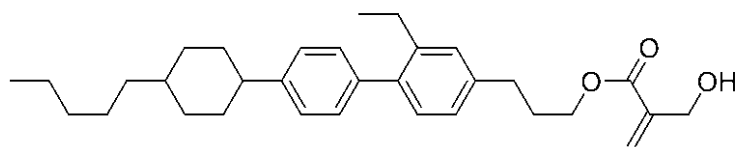
(P-32)



(P-33)



(P-34)



(P-35)

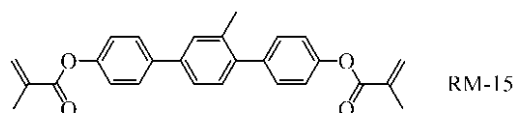
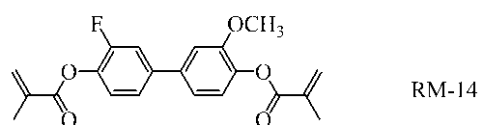
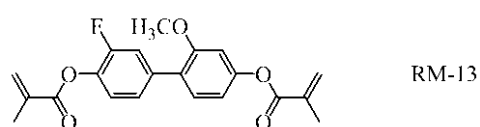
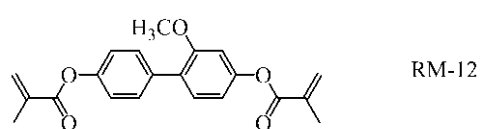
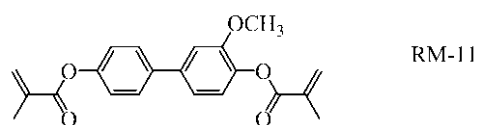
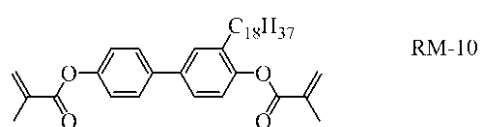
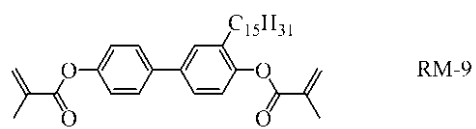
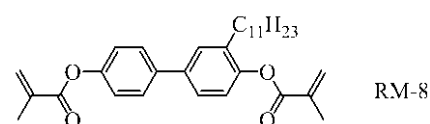
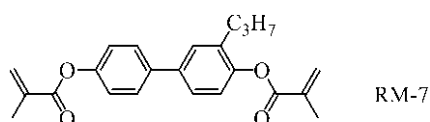
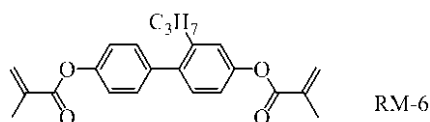
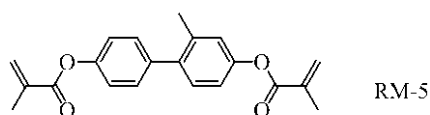
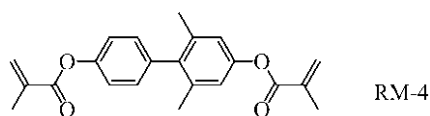
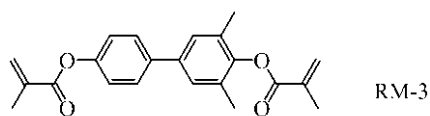
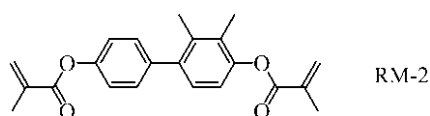
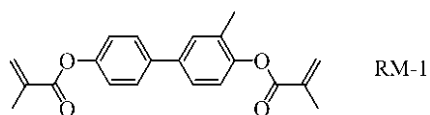
【 0 7 3 8】

10

20

30

## 【化 2 2 3】



## 【 0 7 3 9 】

10

20

30

【表 5】

	ベース組成物(100質量部)	自発配向性モノマー	添加量(質量%)	重合性モノマー	添加量(質量部)	低温保存性	垂直配向性試験
実施例1	LC-1	P-1	0.5	RM-1	0.3	A	B
実施例2	LC-1	P-1	0.5	RM-2	0.3	A	A
実施例3	LC-1	P-1	0.5	RM-3	0.3	A	A
実施例4	LC-1	P-1	0.5	RM-4	0.3	A	A
実施例5	LC-1	P-1	0.5	RM-5	0.3	A	B
実施例6	LC-1	P-1	0.5	RM-6	0.3	A	B
実施例7	LC-1	P-1	0.5	RM-7	0.3	A	A
実施例8	LC-1	P-1	0.5	RM-8	0.3	B	A
実施例9	LC-1	P-1	0.5	RM-9	0.3	B	A
実施例10	LC-1	P-1	0.5	RM-10	0.3	B	A
実施例11	LC-1	P-1	0.5	RM-11	0.3	A	B
実施例12	LC-1	P-1	0.5	RM-12	0.3	A	B
実施例13	LC-1	P-1	0.5	RM-13	0.3	A	B
実施例14	LC-1	P-1	0.5	RM-14	0.3	A	B
実施例15	LC-1	P-1	0.5	RM-15	0.3	A	A
実施例16	LC-1	P-2	1	RM-1	0.3	A	B
実施例17	LC-1	P-2	1	RM-2	0.3	A	A
実施例18	LC-1	P-2	1	RM-3	0.3	A	A
実施例19	LC-1	P-2	1	RM-4	0.3	A	A
実施例20	LC-1	P-2	1	RM-7	0.3	A	A
実施例21	LC-1	P-2	1	RM-8	0.3	B	A
実施例22	LC-1	P-2	1	RM-15	0.3	B	A
実施例23	LC-1	P-3	1	RM-1	0.3	A	B
実施例24	LC-1	P-3	1	RM-2	0.3	A	A
実施例25	LC-1	P-3	1	RM-3	0.3	A	A
実施例26	LC-1	P-3	1	RM-4	0.3	A	A
実施例27	LC-1	P-3	1	RM-7	0.3	A	A

【 0 7 4 0 】



【表 6】

	ベース組成物 (100重量部)	自発配向性モノマー	添加量(質量部)	重合性モノマー	添加量(質量部)	低温保存性	垂直配向性試験
実施例28	LC-1	P-3	1	RM-8	0.3	B	A
実施例29	LC-1	P-3	1	RM-15	0.3	B	A
実施例30	LC-1	P-4	1	RM-1	0.3	A	B
実施例31	LC-1	P-4	1	RM-2	0.3	A	A
実施例32	LC-1	P-4	1	RM-3	0.3	A	A
実施例33	LC-1	P-4	1	RM-4	0.3	A	A
実施例34	LC-1	P-4	1	RM-7	0.3	A	A
実施例35	LC-1	P-4	1	RM-8	0.3	B	A
実施例36	LC-1	P-4	1	RM-11	0.3	A	B
実施例37	LC-1	P-4	1	RM-15	0.3	B	A
実施例38	LC-1	P-5	1	RM-1	0.3	A	B
実施例39	LC-1	P-5	1	RM-2	0.3	A	A
実施例40	LC-1	P-5	1	RM-3	0.3	A	A
実施例41	LC-1	P-5	1	RM-4	0.3	A	A
実施例42	LC-1	P-5	1	RM-5	0.3	A	A
実施例43	LC-1	P-5	1	RM-7	0.3	A	A
実施例44	LC-1	P-5	1	RM-8	0.3	B	A
実施例45	LC-1	P-5	1	RM-10	0.3	B	A
実施例46	LC-1	P-6	1	RM-1	0.3	A	B
実施例47	LC-1	P-6	1	RM-2	0.3	A	A
実施例48	LC-1	P-6	1	RM-3	0.3	A	A
実施例49	LC-1	P-6	1	RM-4	0.3	A	A
実施例50	LC-1	P-6	1	RM-5	0.3	A	A
実施例51	LC-1	P-6	1	RM-7	0.3	A	A
実施例52	LC-1	P-6	1	RM-8	0.3	B	A
実施例53	LC-1	P-6	1	RM-10	0.3	B	A
実施例54	LC-1	P-6	1	RM-15	0.3	B	A

【 0 7 4 1 】

10

20

30

40

【表 7】

	ベース組成物 (100重量部)	自発配向性モノマー	添加量 (質量部)	重合性モノマー	添加量 (質量部)	低温保存性	垂直配向性試験
実施例55	LC-1	P-7	1	RM-2	0.3	A	A
実施例56	LC-1	P-8	1	RM-3	0.3	A	A
実施例57	LC-1	P-9	1	RM-4	0.3	A	A
実施例58	LC-1	P-10	1	RM-7	0.3	A	A
実施例59	LC-1	P-11	1	RM-8	0.3	B	A
実施例60	LC-1	P-12	1	RM-10	0.3	B	A
実施例61	LC-1	P-13	1	RM-2	0.3	A	A
実施例62	LC-1	P-13	1	RM-3	0.3	A	A
実施例63	LC-1	P-13	1	RM-4	0.3	A	A
実施例64	LC-1	P-13	1	RM-7	0.3	A	A
実施例65	LC-1	P-13	1	RM-8	0.3	B	A
実施例66	LC-1	P-13	1	RM-10	0.3	B	A
実施例67	LC-1	P-14	1	RM-2	0.3	A	A
実施例68	LC-1	P-14	1	RM-3	0.3	A	A
実施例69	LC-1	P-14	1	RM-4	0.3	A	A
実施例70	LC-1	P-14	1	RM-7	0.3	A	A
実施例71	LC-1	P-14	1	RM-8	0.3	B	A
実施例72	LC-1	P-14	1	RM-10	0.3	B	A
実施例73	LC-1	P-15	1	RM-1	0.3	A	B
実施例74	LC-1	P-16	1	RM-2	0.3	A	A
実施例75	LC-1	P-17	1	RM-3	0.3	A	A
実施例76	LC-1	P-18	1	RM-4	0.3	A	A
実施例77	LC-1	P-19	1	RM-8	0.3	A	A
実施例78	LC-1	P-20	1	RM-3	0.3	A	A
実施例79	LC-1	P-20	1	RM-4	0.3	A	A
実施例80	LC-1	P-20	1	RM-8	0.3	A	A

【 0 7 4 2 】

10

20

30

【表 8】

	ベース組成物 (100重量部)	自発配向性モノマー	添加量(質量部)	重合性モノマー	添加量(質量部)	低温保存性	垂直配向性試験
実施例81	LC-1	P-25	0.5	RM-2	0.3	A	A
実施例82	LC-1	P-25	0.5	RM-3	0.3	A	A
実施例83	LC-1	P-25	0.5	RM-4	0.3	A	A
実施例84	LC-1	P-25	0.5	RM-7	0.3	A	A
実施例85	LC-1	P-25	0.5	RM-8	0.3	B	A
実施例86	LC-1	P-25	0.5	RM-10	0.3	B	A
実施例87	LC-1	P-26	0.5	RM-2	0.3	A	A
実施例88	LC-1	P-26	0.5	RM-3	0.3	A	A
実施例89	LC-1	P-26	0.5	RM-4	0.3	A	A
実施例90	LC-1	P-26	0.5	RM-7	0.3	A	A
実施例91	LC-1	P-26	0.5	RM-8	0.3	B	A
実施例92	LC-1	P-26	0.5	RM-10	0.3	B	A
実施例93	LC-1	P-28	0.5	RM-3	0.3	A	A
実施例94	LC-1	P-28	0.5	RM-4	0.3	A	A
実施例95	LC-1	P-28	0.5	RM-7	0.3	A	A
実施例96	LC-1	P-28	0.5	RM-8	0.3	B	A
実施例97	LC-1	P-29	0.5	RM-3	0.3	A	A
実施例98	LC-1	P-29	0.5	RM-4	0.3	A	A
実施例99	LC-1	P-29	0.5	RM-7	0.3	A	B
実施例100	LC-1	P-29	0.5	RM-8	0.3	B	A
実施例101	LC-1	P-30	1	RM-2	0.3	A	A
実施例102	LC-1	P-30	1	RM-3	0.3	A	A
実施例103	LC-1	P-30	1	RM-4	0.3	A	A
実施例104	LC-1	P-30	1	RM-7	0.3	A	A
実施例105	LC-1	P-30	1	RM-8	0.3	B	A
実施例106	LC-1	P-30	1	RM-10	0.3	B	A
実施例107	LC-1	P-32	1	RM-3	0.3	A	A
実施例108	LC-1	P-32	1	RM-4	0.3	A	A
実施例109	LC-1	P-32	1	RM-7	0.3	A	A
実施例110	LC-1	P-32	1	RM-8	0.3	B	A
実施例111	LC-1	P-32	1	RM-10	0.3	B	A

【0743】

実施例1～111の低温保存性について、長鎖アルキル基を有する重合性モノマーにおいて1週間程度経つと析出が生じ始める。そのほか短鎖アルキルもしくはアルコキシ基含有重合性化合物においては溶解性がよく、低温保存性は良好であった。また、セルに垂直配向助剤、重合性モノマーを含有した液晶組成物を封入したセルを偏光子と検光子が直交

10

20

30

40

50

して配置された偏光顕微鏡にセットし、透過光を観察した。液晶分子が垂直配向すれば、偏光板の作用により光は透過できず、セルは黒く表示される。この試験法により上記サンプルを評価したところ、すべてのサンプルにおいて配向ムラは生じず、一様な垂直配向性を示すことが確認された。代表的な配向試験の評価結果を図1および図2に示す。図1は比較例2、図2は実施例40の液晶を注入したセルのクロスニコル下での写真である。図1のセル周辺部における白く見える部分は垂直配向しておらず、斜めもしくは水平配向している部分であり、配向ムラを示している。図1には白位部分が多く見られ、垂直配向していない部位が多く存在している。また、セル中に4分割されたようなドメインが見られる。これは、滴下ムラであり、液晶組成物を滴下し、広がる際に組成物同士が交わる際、一様に混ざらずできるムラであり、これも欠陥の一種である。しかしながら、図2では白い線はほとんど見られず、一様に黒が示されている。図1、図2において、一部見える白い直線は、配向ムラではなく、物理的なガラス上の傷であるため、配向不良ではない。したがって、これは液晶が一面垂直配向していることを示しており、上記に示した垂直配向助剤（自発配向性モノマー）と重合性モノマーを適宜組み合わせることによって液晶分子が垂直配向することが確認された。

#### 【0744】

また、紫外光照射による重合によって生じるブレチルト角を評価したところ、すべてのサンプルにおいて適切なチルト角が付与されていることを確認した。これらを使用した液晶表示素子は、十分なブレチルト角が付与されているため、十分に高速応答であることが確認された。

#### 【0745】

また、重合性モノマーとして実施例2～4などで使用しているRM-2～RM-4を含む組成物で液晶セルを作製する際に、展開性（濡れ広がり）が良好であった。

#### 【0746】

（実施例112～129）

液晶組成物LC-1を100質量部に対して、自発配向性モノマー（P-1）を1.0質量部、式（RM-R2）で表される化合物を0.3質量部及び式（RM-1）で表される化合物を0.5質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例112とした。

#### 【0747】

液晶組成物LC-1を100質量部に対して、自発配向性モノマー（P-1）を1.0質量部、式（RM-R2）で表される化合物を0.3質量部及び式（RM-2）で表される化合物を1.0質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例113とした。

#### 【0748】

液晶組成物LC-1を100質量部に対して、自発配向性モノマー（P-5）を1.0質量部、式（RM-R2）で表される化合物を0.3質量部及び式（RM-3）で表される化合物を0.3質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例114とした。

#### 【0749】

液晶組成物LC-1を100質量部に対して、自発配向性モノマー（P-5）を1.0質量部、式（RM-R2）で表される化合物を0.3質量部及び式（RM-3）で表される化合物を0.6質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例115とした。

#### 【0750】

液晶組成物LC-1を100質量部に対して、自発配向性モノマー（P-6）を1.0質量部、式（RM-R2）で表される化合物を0.3質量部及び式（RM-3）で表される化合物を0.5質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例116とした。

#### 【0751】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 6) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 3) で表される化合物を 1.0 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 117 とした。

【0752】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 6) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 4) で表される化合物を 0.3 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 118 とした。

【0753】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 6) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 4) で表される化合物を 0.6 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 119 とした。

【0754】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 13) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 7) で表される化合物を 0.3 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 120 とした。

【0755】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 13) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 7) で表される化合物を 0.6 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 121 とした。

【0756】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 14) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 8) で表される化合物を 0.5 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 122 とした。

【0757】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 14) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 8) で表される化合物を 1.0 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 123 とした。

【0758】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 1) を 0.5 質量部、自発配向性モノマー (P - 5) を 1.0 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 4) で表される化合物を 0.3 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 124 とした。

【0759】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 5) を 0.5 質量部、自発配向性モノマー (P - 6) を 1.2 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 3) で表される化合物を 1.0 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 125 とした。

【0760】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー (P - 5) を 1.0 質量部、自発配向性モノマー (P - 8) を 0.5 質量部、式 (RM - R2) で表される化合物を 0.3 質量部及び式 (RM - 4) で表される化合物を 0.5 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 126 とした。

【0761】

10

20

30

40

50

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 5 ) を 0 . 8 質量部、自発配向性モノマー ( P - 17 ) を 0 . 2 質量部、式 ( RM - R2 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部及び式 ( RM - 4 ) で表される化合物を 1 . 0 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 127 とした。

【 0762 】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 6 ) を 1 . 2 質量部、自発配向性モノマー ( P - 13 ) を 0 . 3 質量部、式 ( RM - R2 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部及び式 ( RM - 3 ) で表される化合物を 0 . 5 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 128 とした。

【 0763 】

10

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 6 ) を 1 . 0 質量部、自発配向性モノマー ( P - 19 ) を 0 . 5 質量部、式 ( RM - R2 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部及び式 ( RM - 3 ) で表される化合物を 0 . 6 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 129 とした。

【 0764 】

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 6 ) を 1 . 0 質量部、自発配向性モノマー ( P - 26 ) を 0 . 3 質量部、式 ( RM - R2 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部及び式 ( RM - 4 ) で表される化合物を 0 . 5 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 130 とした。

【 0765 】

20

液晶組成物 LC - 1 を 100 質量部に対して、自発配向性モノマー ( P - 6 ) を 1 . 0 質量部、自発配向性モノマー ( P - 32 ) を 0 . 5 質量部、式 ( RM - R2 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部及び式 ( RM - 4 ) で表される化合物を 0 . 3 質量部添加した重合性モノマーを含有する液晶組成物を実施例 131 とした。

【 0766 】

【表 9】

	組成物(100重量%)	自発配向 助剤1	自発配向 助剤2	重合性化 合物1	重合性化 合物2	重合性化合物2 添加量(質量%)	低温保 存性	垂直配向 性試験
実施例112	LC-1	P-1	-	RM-R2	RM-1	0.5	A	A
実施例113	LC-1	P-1	-	RM-R2	RM-2	1	B	A
実施例114	LC-1	P-5	-	RM-R2	RM-3	0.3	A	B
実施例115	LC-1	P-5	-	RM-R2	RM-3	0.6	A	A
実施例116	LC-1	P-6	-	RM-R2	RM-3	0.5	A	A
実施例117	LC-1	P-6	-	RM-R2	RM-3	1	A	A
実施例118	LC-1	P-6	-	RM-R2	RM-4	0.3	A	A
実施例119	LC-1	P-6	-	RM-R2	RM-4	0.6	A	A
実施例120	LC-1	P-13	-	RM-R2	RM-7	0.3	A	A
実施例121	LC-1	P-13	-	RM-R2	RM-7	0.6	A	A
実施例122	LC-1	P-14	-	RM-R2	RM-8	0.5	A	A
実施例123	LC-1	P-14	-	RM-R2	RM-8	1	B	A
実施例124	LC-1	P-1	P-5	RM-R2	RM-4	0.3	A	A
実施例125	LC-1	P-5	P-6	RM-R2	RM-3	1	A	A
実施例126	LC-1	P-5	P-8	RM-R2	RM-4	0.5	A	A
実施例127	LC-1	P-5	P-17	RM-R2	RM-4	1	A	A
実施例128	LC-1	P-6	P-13	RM-R2	RM-3	0.5	A	A
実施例129	LC-1	P-6	P-19	RM-R2	RM-3	0.6	A	A
実施例130	LC-1	P-6	P-26	RM-R2	RM-4	0.5	A	A
実施例131	LC-1	P-6	P-32	RM-R2	RM-3	1	A	A

## 【0767】

実施例112から123においては自発配向性助剤を1種類、重合性化合物（または重合性モノマー）を2種類用いた場合の低温保存性と垂直配向性について評価したところ、比較例に用いた重合性化合物を用いても、新たに重合性化合物を添加することにより低温保存性および垂直配向性が改善されることが確認された。自発配向性モノマーの液晶への溶解性が低い場合、一成分の濃度を下げ、さらに異なる自発配向性モノマーを加え、垂直配向性を向上させることができる。実施例124から131において自発配向性モノマー2種、重合性化合物2種を混合することにより、低温保存性と垂直配向性が改善されることが確認された。

## 【0768】

また、重合性モノマーとして実施例113～118などで使用しているRM-2～RM-4を含む組成物で液晶セルを作製する際に、展開性（濡れ広がり）が良好であった。

## 【0769】

（実施例132～140）

さらに組成物LC-1に代えて、下記に示す通りの化合物及び混合比率で構成される組成物を調製し、調製した液晶組成物をLC-2からLC-8とした。

## 【0770】

【表 10】

		LC-2	LC-3	LC-4	LC-5	LC-6	LC-7	LC-8
	3-Ph-Ph-1	11	13	8	9	12.7		
	3-Cy-10-Ph5-O1		16		8.5	6		
	3-Cy-10-Ph5-O2					6.5		
	3-Cy-Ph-O1			14	15		7	
	3-Cy-Ph-O2			14				
	2-Cy-Cy-10-Ph5-O2					15		
	3-Cy-Cy-10-Ph5-O2	16		21	17	1.8		
	2-Cy-Ph-Ph5-O2	6		6	6.5	6	8.5	3
	3-Cy-Ph-Ph5-O2	7		8	8		8.5	8.5
	3-Cy-Ph-Ph5-O3					7		
	3-Cy-Ph-Ph5-O4	6		12	8.5	9		
	3-Cy-Cy-2	24	21	17	16.5	18	23.5	8
	3-Cy-Cy-4	7			3	7.5	10	7.5
	3-Cy-Ph5-O2	7					13	7
	5-Cy-Ph5-O2	7						
	3-Ph-Ph5-O2		14					16
	3-Cy-Cy-Ph5-O2							10
	4-Cy-Cy-Ph5-O2						9	
	5-Cy-Cy-Ph5-O2						5	8
	3-Cy-Cy-Ph-1	3	10					
	3-Cy-Ph-Ph-1	3						
	3-Cy-Ph-Ph-2	3	10		8	6		
	5-Cy-Ph-Ph-2		16			4.5		
	3-Ph-Ph5-Ph-2						7.5	8
	4-Ph-Ph5-Ph-2						8	
	3-Cy-Cy-V							14.5
	3-Cy-Cy-V-1							9.5
	合計	100	100	100	100	100	100	100
物性値	T <sub>ni</sub> [°C]	77	77	75.9	75	75.5	75.3	74.4
	Δn	0.112	0.112	0.109	0.112	0.102	0.1057	0.1069
	Δε	-3	-3	-2.9	-3.2	-2.6	-2.67	-2.87
	γ <sub>1</sub> [mPa·s]	110	110	124	121	87	93	79
	K <sub>11</sub> [pN]	16.6	16.6	-	14.9	-	12.5	13.7
	K <sub>33</sub> [pN]	14.7	14.7	-	12.3	-	11.7	13.5

【0771】

上記液晶組成物 LC-2 から LC-8 に対して、自発配向性モノマー（P-5、P-6、P-J-23、P-K-5、P-K-6、P-28 または P-35）と、重合性モノマー（RM-2、RM-3 または RM-4）と、を適切な濃度で混合し、上記と同様に配向性試験の評価を行ったところ、比較例より配向性が向上することを確認した。

10

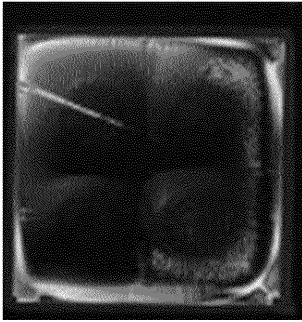
20

30

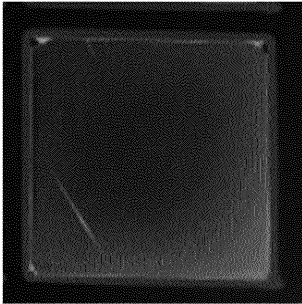
40



【図 1】



【図 2】



## フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
C 0 9 K	19/34	(2006.01)	C 0 9 K 19/34
C 0 9 K	19/12	(2006.01)	C 0 9 K 19/12
C 0 9 K	19/14	(2006.01)	C 0 9 K 19/14
C 0 9 K	19/16	(2006.01)	C 0 9 K 19/16
C 0 9 K	19/18	(2006.01)	C 0 9 K 19/18
C 0 9 K	19/20	(2006.01)	C 0 9 K 19/20
C 0 9 K	19/24	(2006.01)	C 0 9 K 19/24
G 0 2 F	1/1337	(2006.01)	G 0 2 F 1/1337 5 2 0

(72)発明者 井ノ上 雄一  
埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1  
場内 D I C 株式会社 埼玉工

(72)発明者 木村 正臣  
埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1  
場内 D I C 株式会社 埼玉工

(72)発明者 山本 淳子  
埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1  
場内 D I C 株式会社 埼玉工

(72)発明者 林 正直  
埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1  
場内 D I C 株式会社 埼玉工

(72)発明者 杉山 弘和  
埼玉県北足立郡伊奈町大字小室 4 4 7 2 番地 1  
場内 D I C 株式会社 埼玉工

審査官 井上 恵理

(56)参考文献 国際公開第 2 0 1 5 / 1 2 2 4 5 7 ( W O , A 1 )  
国際公開第 2 0 1 8 / 1 0 5 7 2 6 ( W O , A 1 )  
国際公開第 2 0 1 5 / 0 1 5 8 0 3 ( W O , A 1 )  
国際公開第 2 0 1 6 / 1 1 7 2 7 1 ( W O , A 1 )  
特開 2 0 1 5 - 1 6 8 8 2 6 ( J P , A )  
国際公開第 2 0 1 7 / 0 4 1 8 9 3 ( W O , A 1 )  
国際公開第 2 0 1 6 / 0 1 5 8 0 3 ( W O , A 1 )  
国際公開第 2 0 1 4 / 0 6 1 7 5 5 ( W O , A 1 )

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)  
C 0 9 K 1 9 / 0 0 - 1 9 / 6 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 )