

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2019-73675

(P2019-73675A)

(43) 公開日 令和1年5月16日(2019.5.16)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C09K 19/56 (2006.01)	C O 9 K 19/56	2 H 2 9 0
C09K 19/30 (2006.01)	C O 9 K 19/30	4 H 0 2 7
C09K 19/34 (2006.01)	C O 9 K 19/34	
C09K 19/20 (2006.01)	C O 9 K 19/20	
C09K 19/54 (2006.01)	C O 9 K 19/54 Z	
審査請求 未請求 請求項の数 27 O L (全 109 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号	特願2018-75443 (P2018-75443)	(71) 出願人	311002067
(22) 出願日	平成30年4月10日 (2018.4.10)		J N C株式会社
(31) 優先権主張番号	特願2017-198676 (P2017-198676)		東京都千代田区大手町二丁目2番1号
(32) 優先日	平成29年10月12日 (2017.10.12)	(71) 出願人	596032100
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)		J N C石油化学株式会社
			東京都千代田区大手町二丁目2番1号
		(72) 発明者	齋藤 将之
			千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C
			石油化学株式会社 市原研究所内
		(72) 発明者	牛玖 清華
			千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C
			石油化学株式会社 市原研究所内
		Fターム(参考)	2H290 AA15 AA33 AA72 BD02 BD04
			BF54 CA46 DA01 DA03
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 液晶組成物および液晶表示素子

(57) 【要約】

【課題】 重合体の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能な液晶組成物、この組成物を含有する液晶表示素子を提供する。

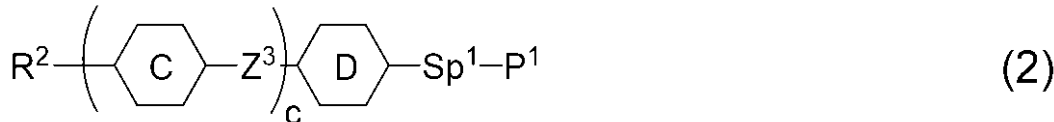
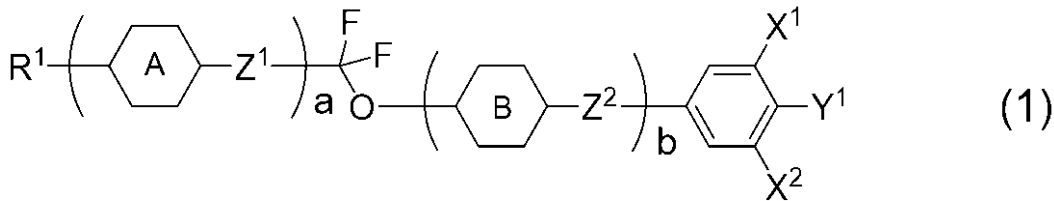
【解決手段】 第一成分として正に大きな誘電率異方性を有する特定の液晶性化合物および第一添加物として重合性基を有する極性化合物を含有するネマチック液晶組成物であり、この組成物は、第二成分として高い上限温度または小さな粘度を有する特定の液晶性化合物、第三成分として正の誘電率異方性を有する特定の液晶性化合物、第四成分として負の誘電率異方性を有する特定の液晶性化合物、および第二添加物として重合性化合物を含有してもよく、そしてこの組成物を含有する液晶表示素子である。

【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

第一成分として式（１）で表される化合物から選択された少なくとも１つの化合物、および第一添加物として式（２）で表される極性化合物から選択された少なくとも１つの化合物を含有する液晶組成物。



式（１）および式（２）において、 R^1 は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルであり； R^2 は、炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも１つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；環Ａおよび環Ｂは、１，４-シクロヘキシレン、１，４-フェニレン、２-フルオロ-１，４-フェニレン、２，３-ジフルオロ-１，４-フェニレン、２，６-ジフルオロ-１，４-フェニレン、ピリミジン-２，５-ジイル、１，３-ジオキサ-２，５-ジイル、またはテトラヒドロピラン-２，５-ジイルであり；環Ｃおよび環Ｄは、１，４-シクロヘキシレン、１，４-シクロヘキセニレン、１，４-フェニレン、ナフタレン-２，６-ジイル、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-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-３，１，７-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-３，１，７-ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； Z^1 および Z^2 は、単結合、エチレン、ビニレン、メチレンオキシ、カルボニルオキシ、またはジフルオロメチレンオキシであり； Z^3 は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも１つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； X^1 および X^2 は、水素またはフッ素であり； Y^1 は、フッ素、塩素、少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から１２のアルキル、少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から１２のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数２から１２のアルケニルオキシであり；*a*は、１、２、３、または４であり；*b*は、０、１、２、または３であり、そして*a*および*b*の和は４以下であり；*c*は、０、１、２、３、または４であり； Sp^1 は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの $-\text{C}$

10

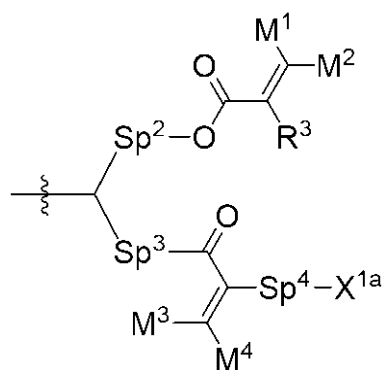
20

30

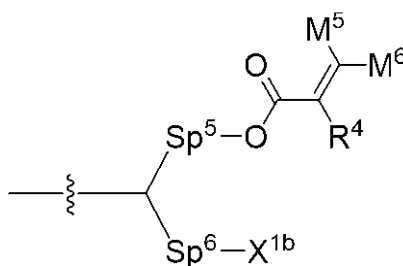
40

50

H_2- は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； P^1 は、式(1a)または式(1b)で表される重合性基であり；



(1a)



(1b)

10

式(1a)および式(1b)において、 Sp^2 、 Sp^3 、 Sp^4 、 Sp^5 、および Sp^6 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； M^1 、 M^2 、 M^3 、 M^4 、 M^5 、および M^6 は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり； R^3 は、水素、 $-Sp^4-X^{1a}$ 、または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； R^4 は、水素または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； X^{1a} および X^{1b} は、 $-OR^5$ 、 $-N(R^5)_2$ 、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^5)_3$ であり、ここで、 R^5 は水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

20

30

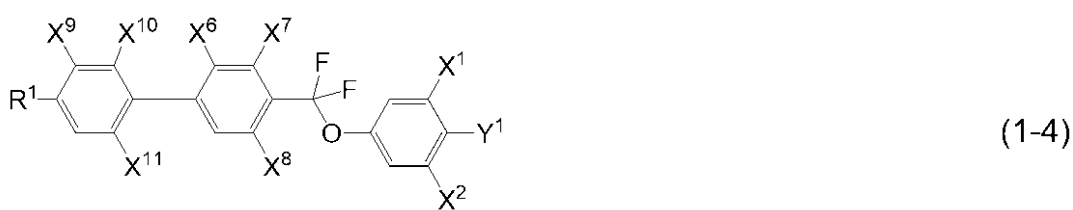
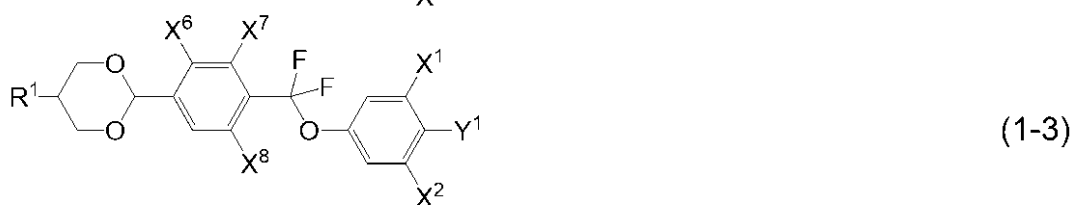
40

【請求項2】

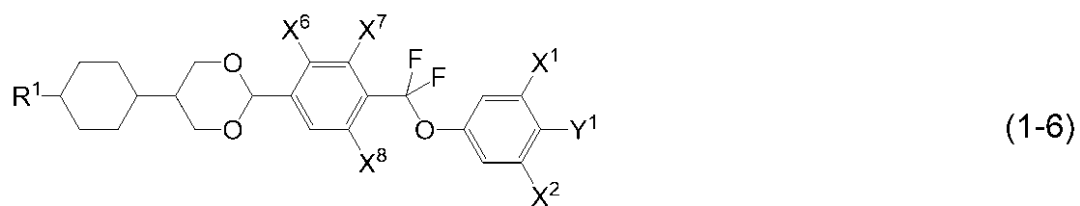
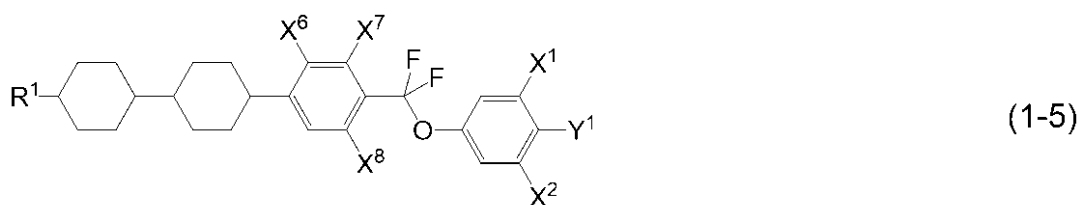
第一成分として式(1-1)から式(1-14)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1に記載の液晶組成物。



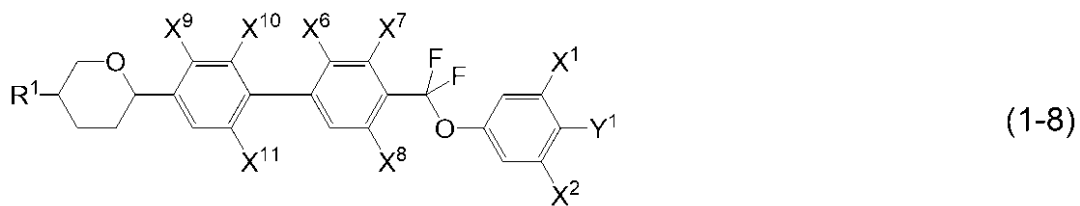
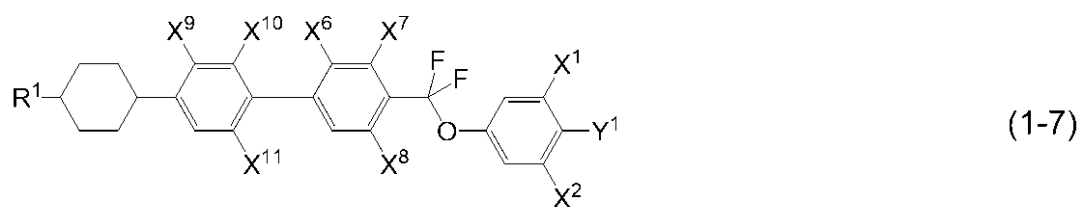
10



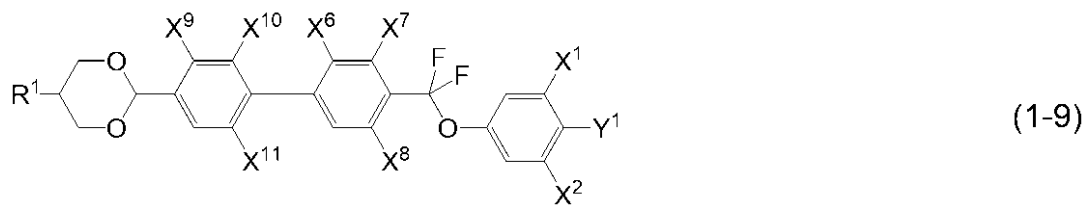
20



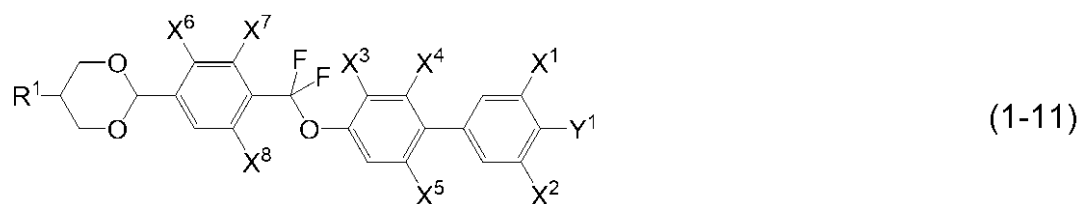
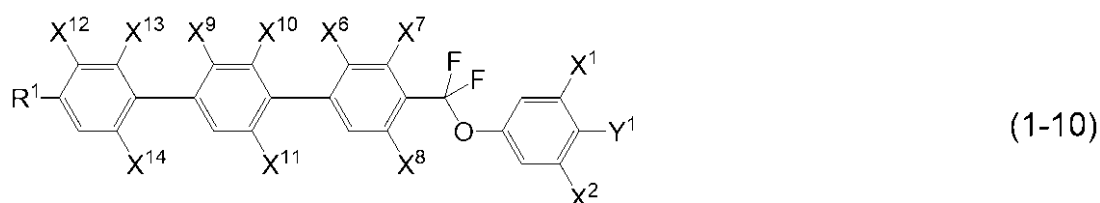
30



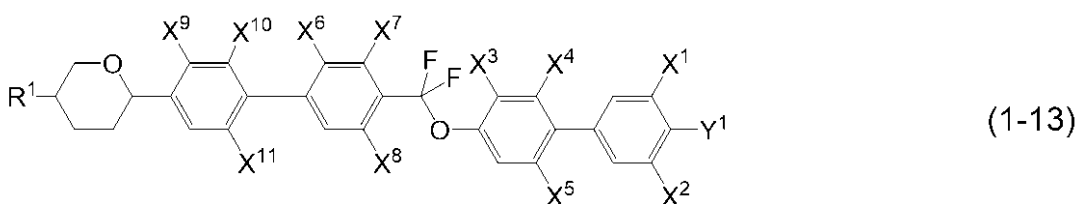
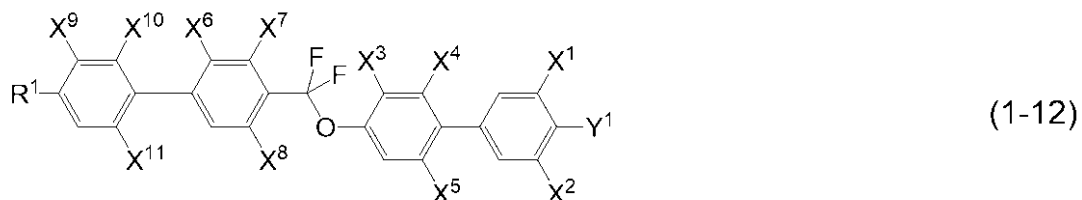
40



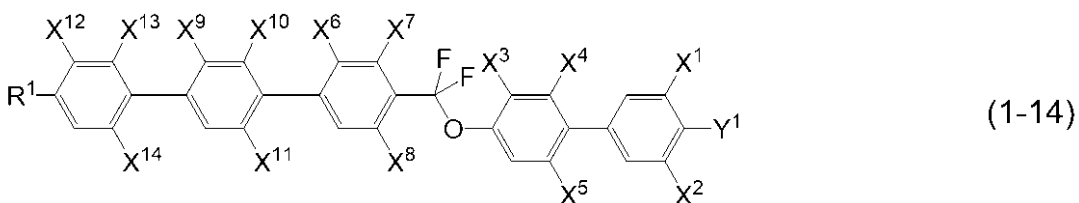
50



10



20



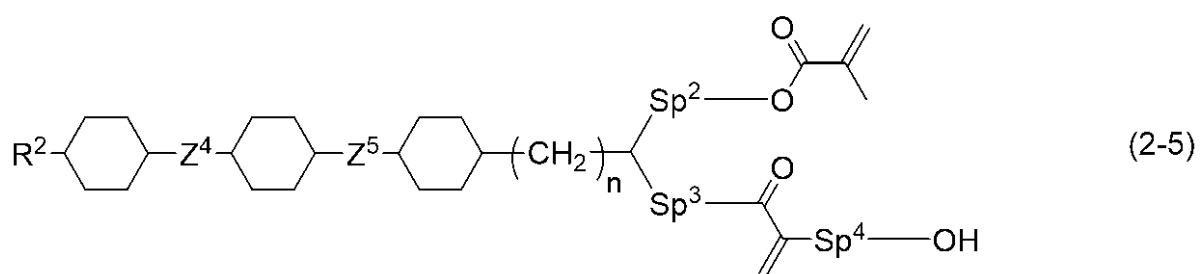
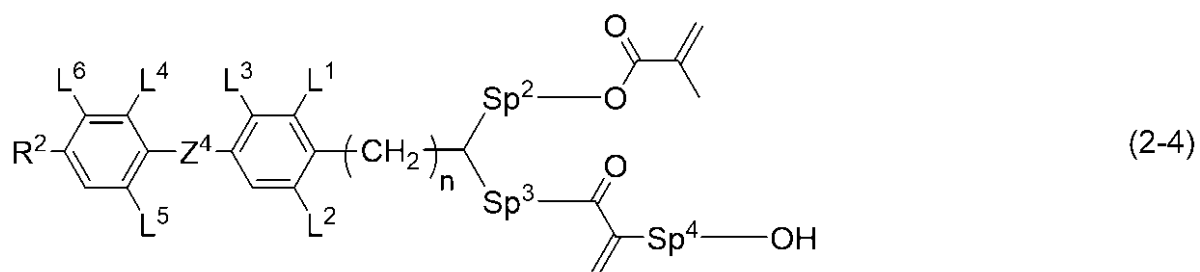
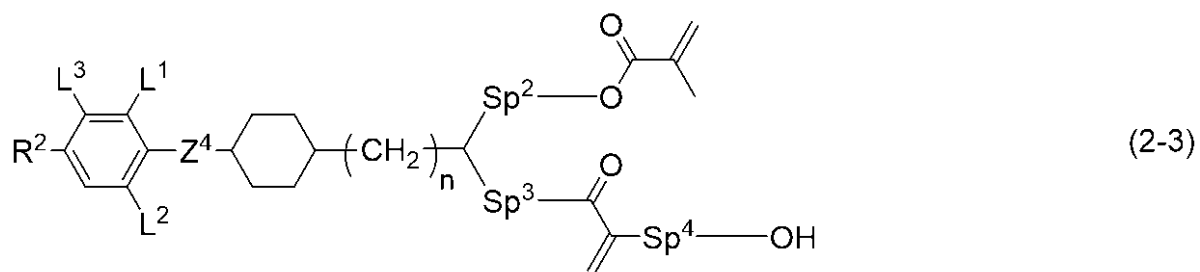
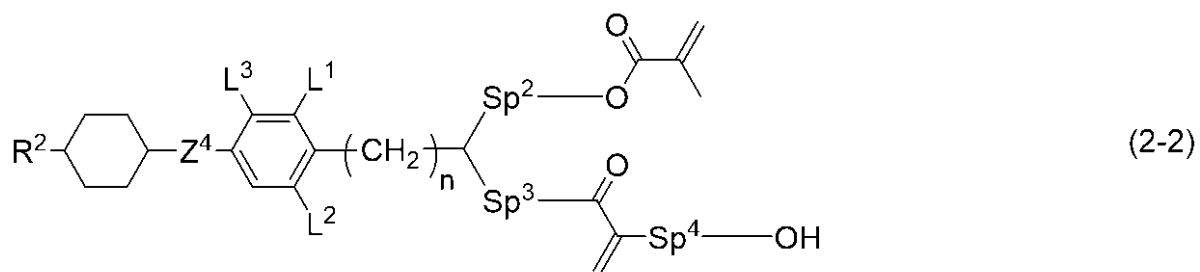
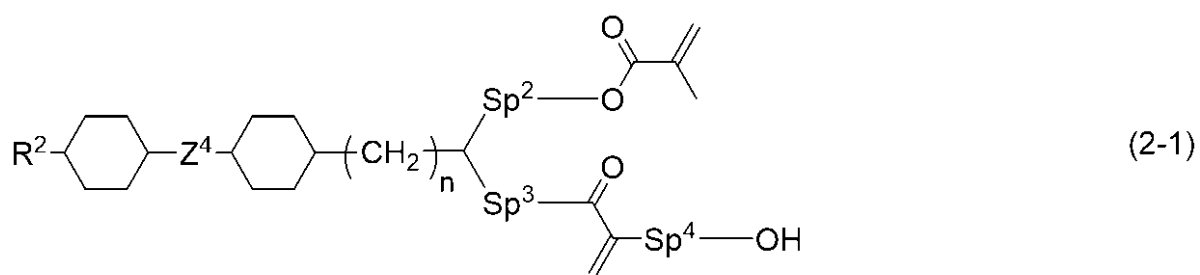
式(1-1)から式(1-14)において、R¹は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；X¹、X²、X³、X⁴、X⁵、X⁶、X⁷、X⁸、X⁹、X¹⁰、X¹¹、X¹²、X¹³、およびX¹⁴は、水素またはフッ素であり；Y¹は、フッ素、塩素、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルオキシである。

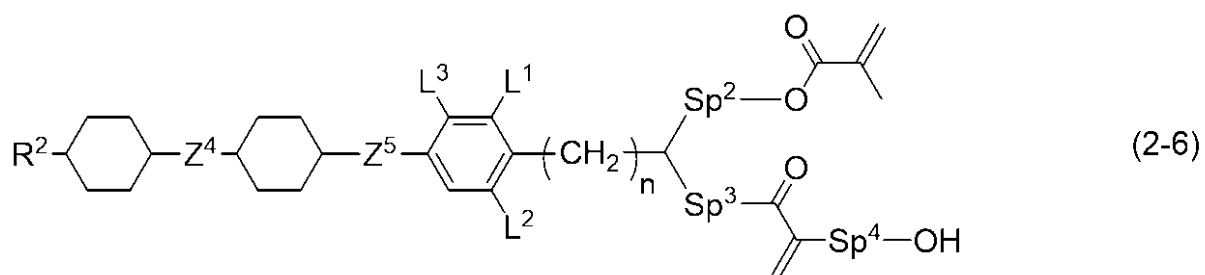
30

【請求項3】

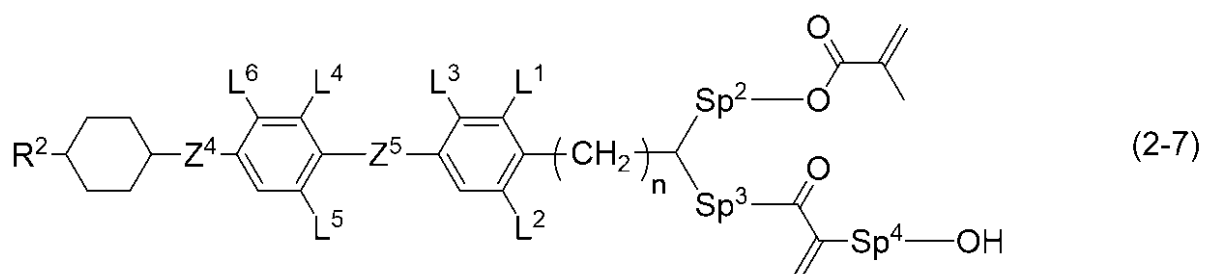
第一添加物として式(2-1)から式(2-57)で表される極性化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1または2に記載の液晶組成物。

40

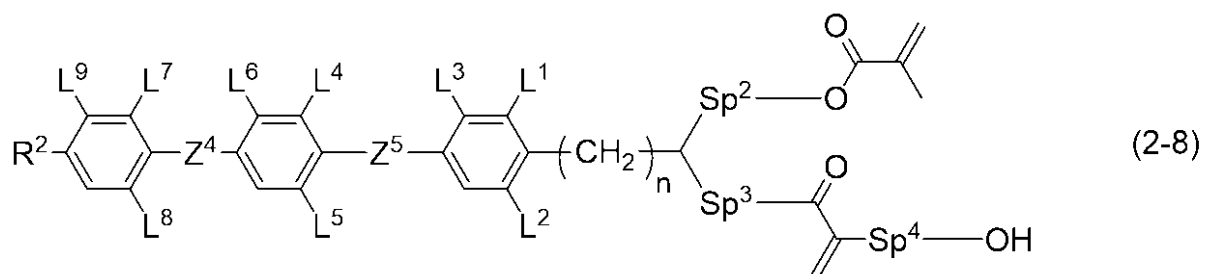




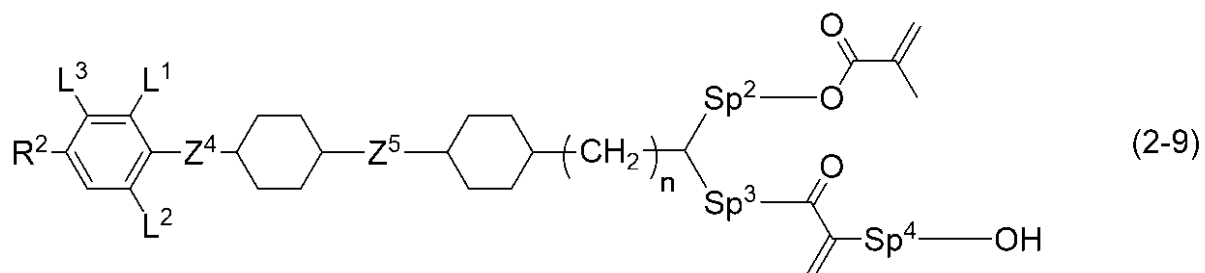
10



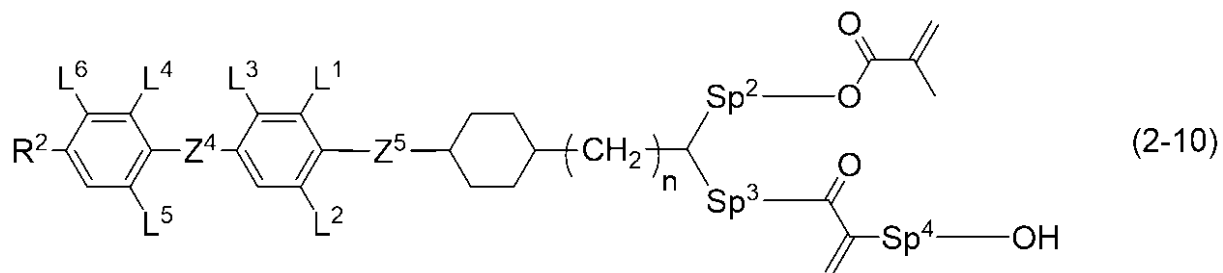
20

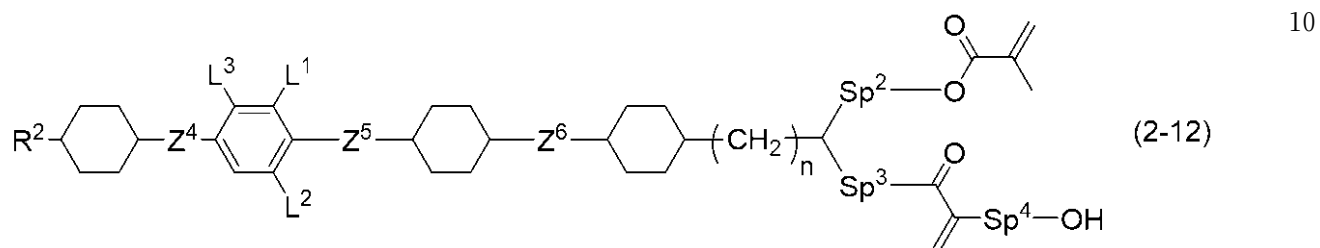
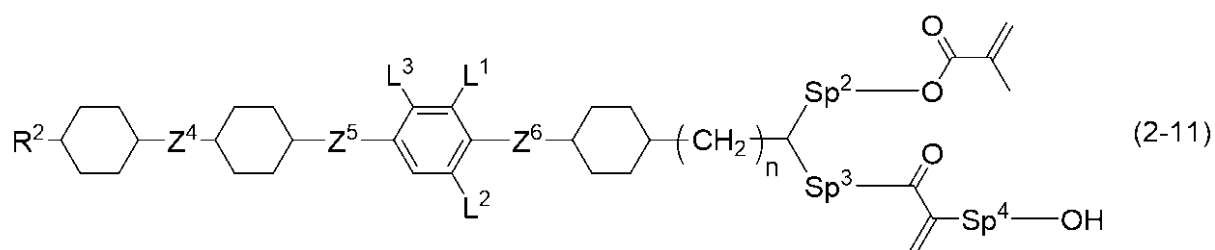


30

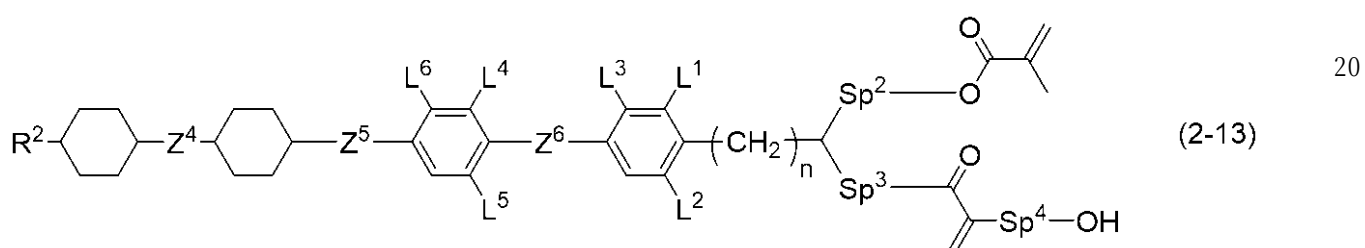


40

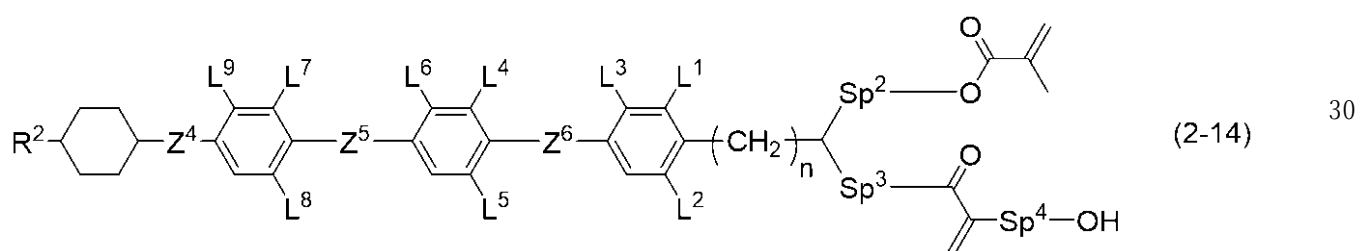




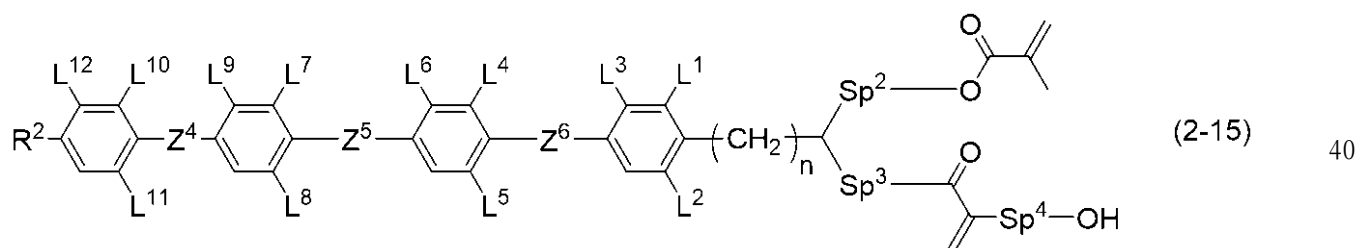
10



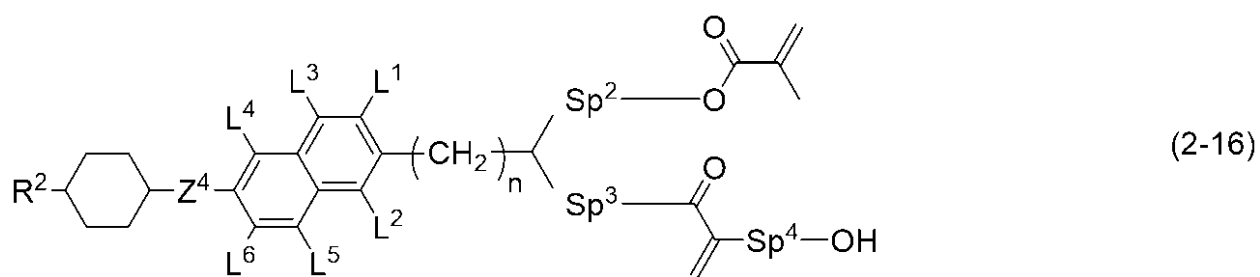
20



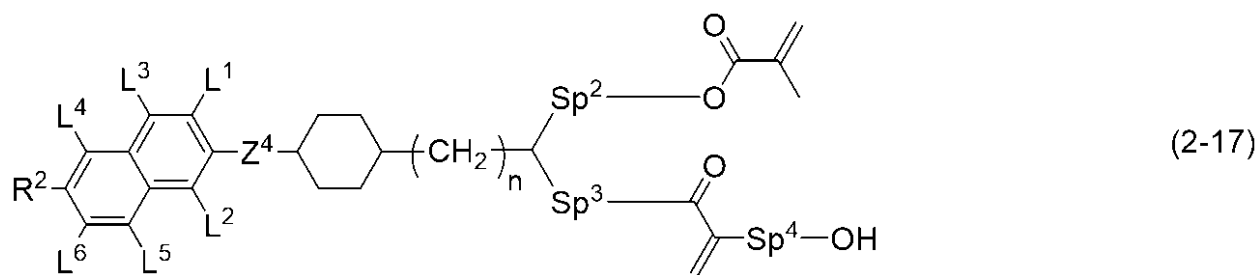
30



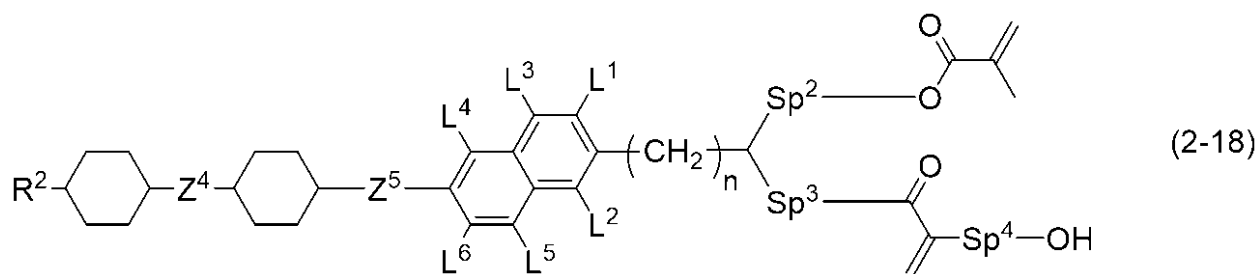
40



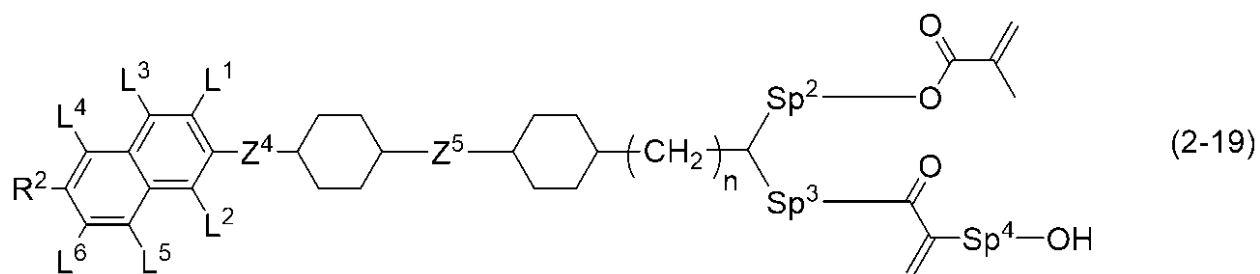
10



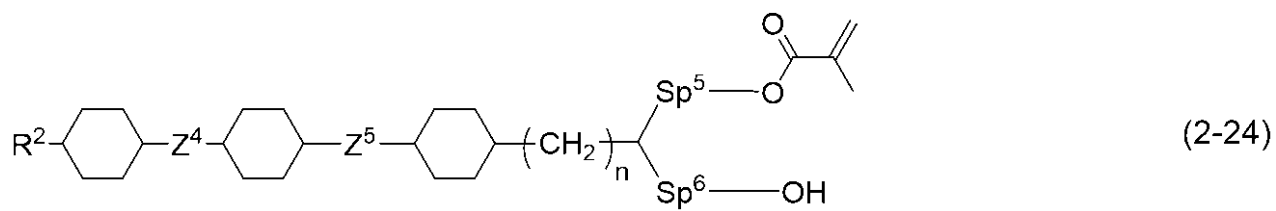
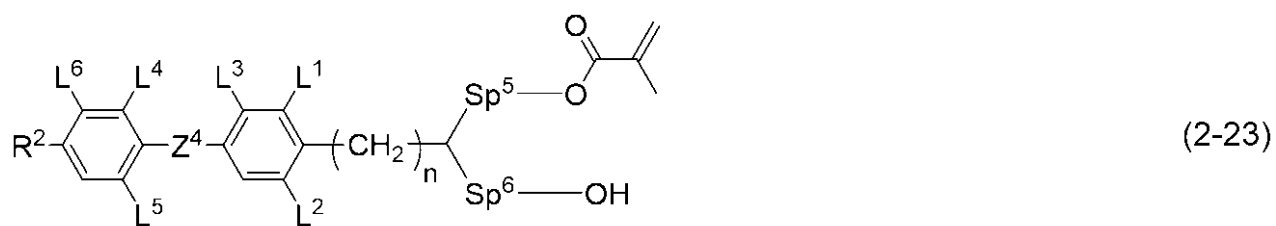
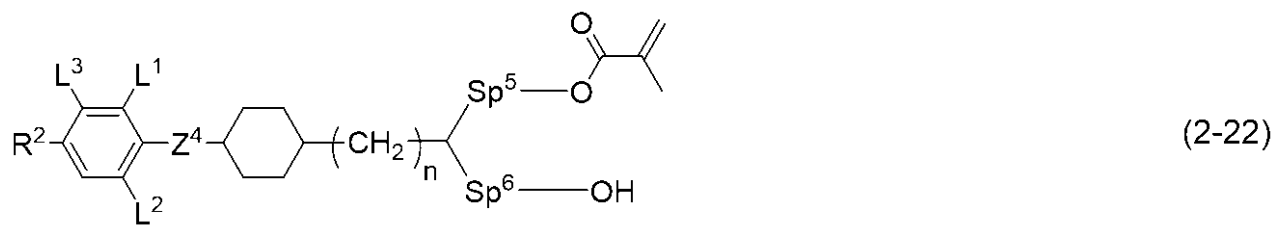
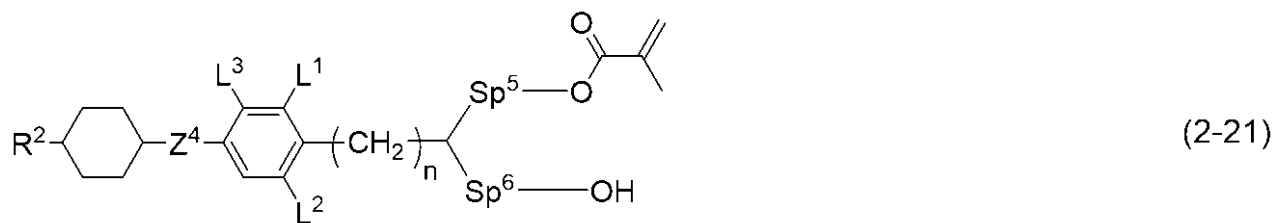
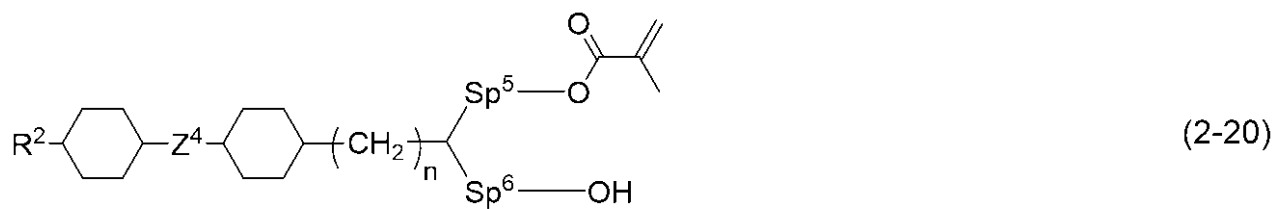
20



30



40

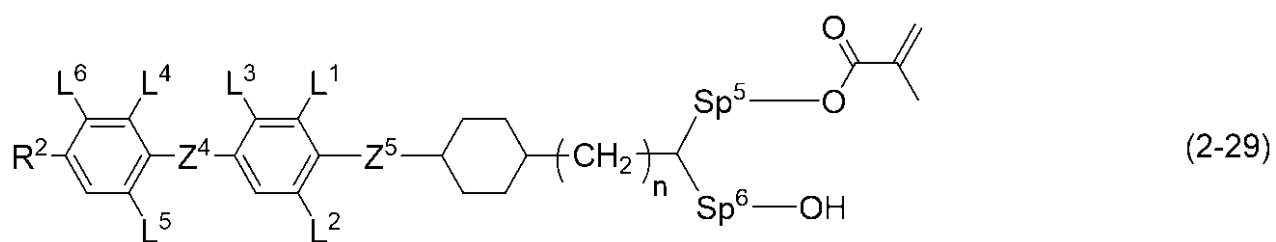
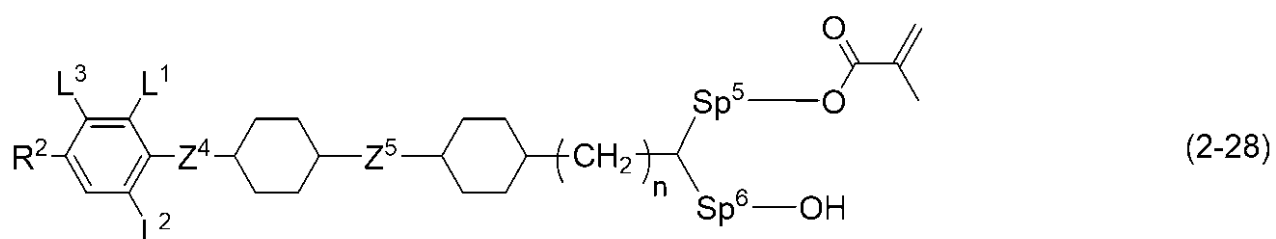
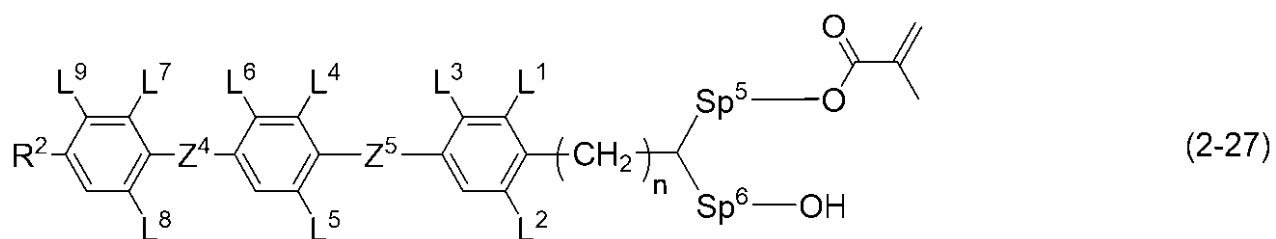
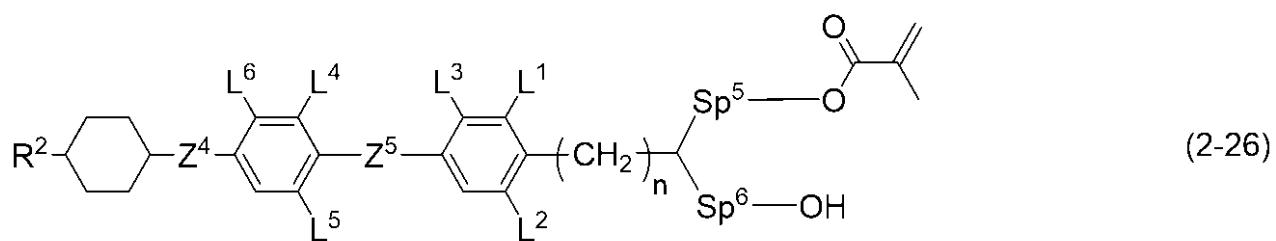
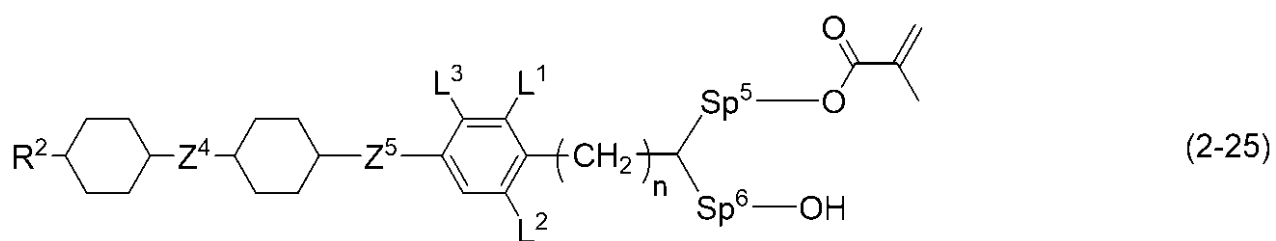


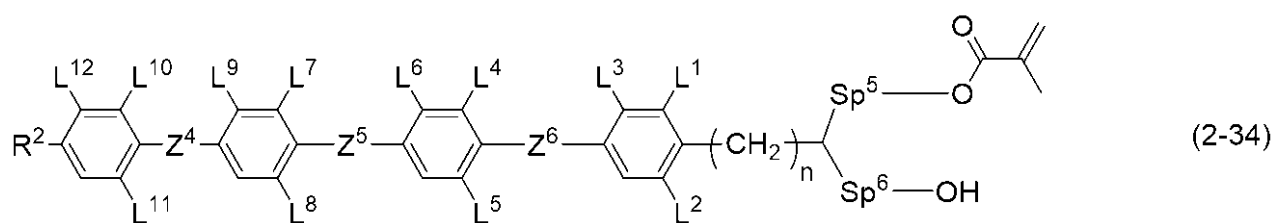
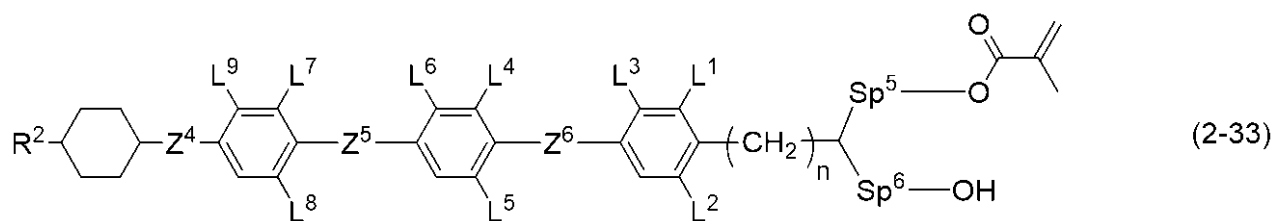
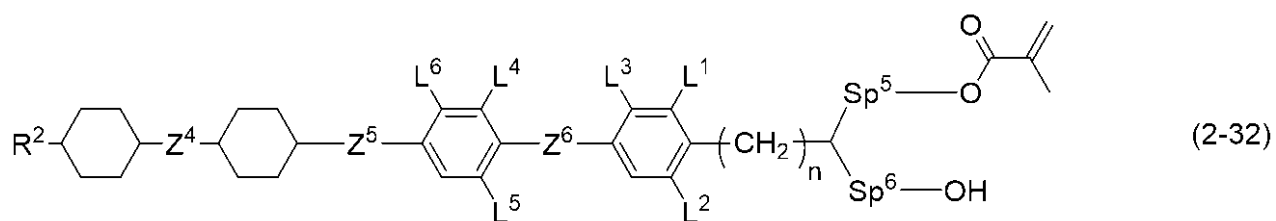
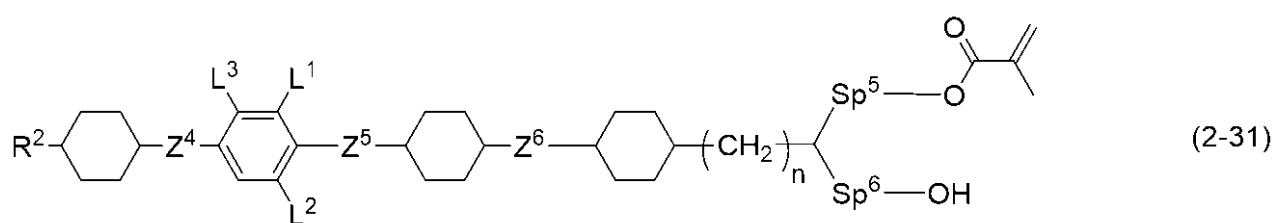
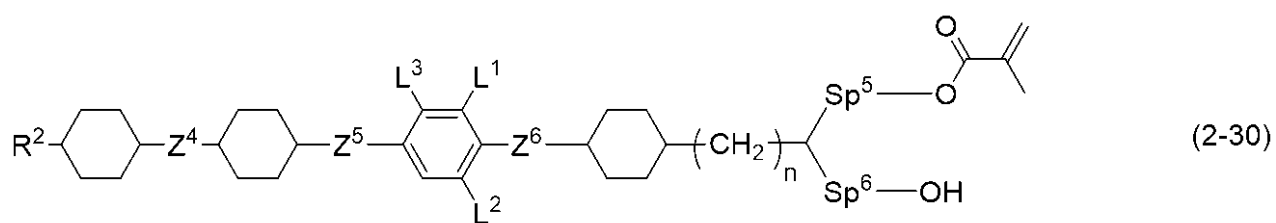
10

20

30

40



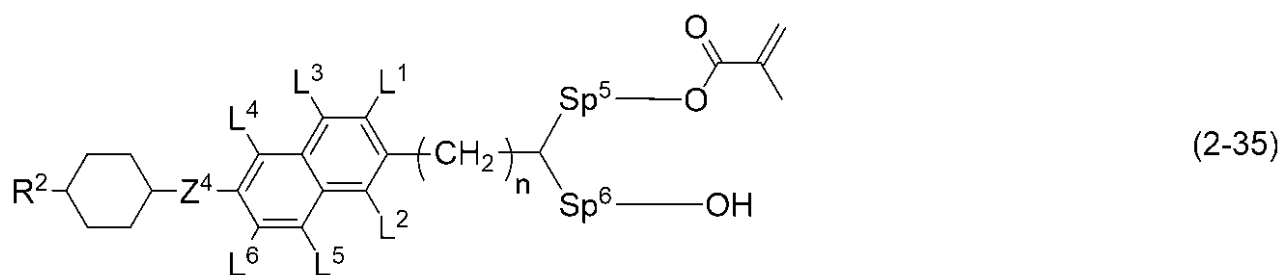


10

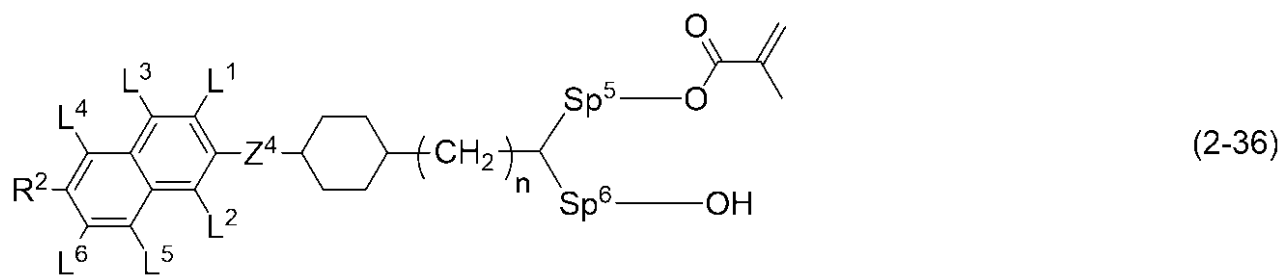
20

30

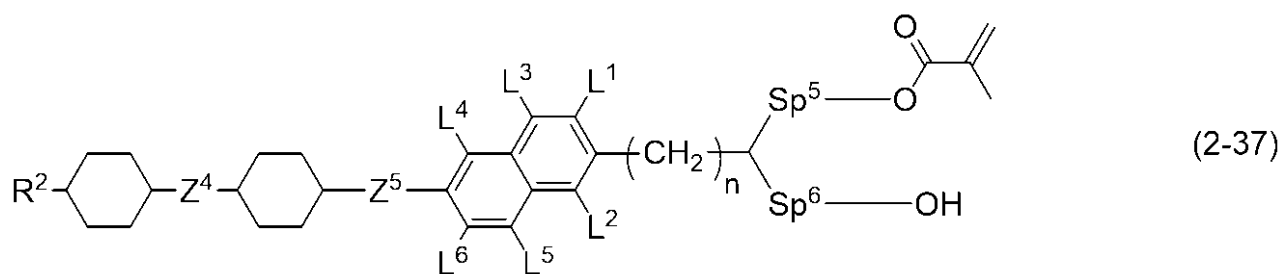
40



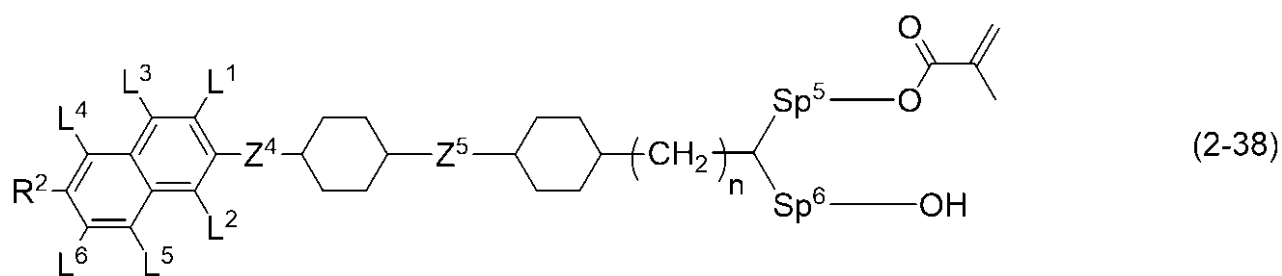
10



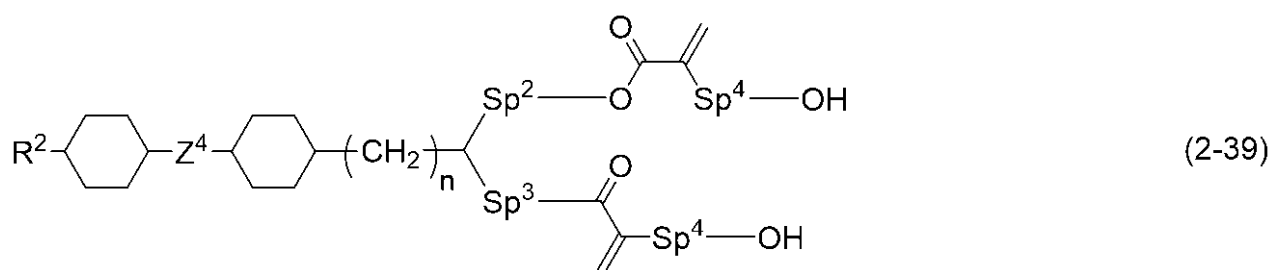
20



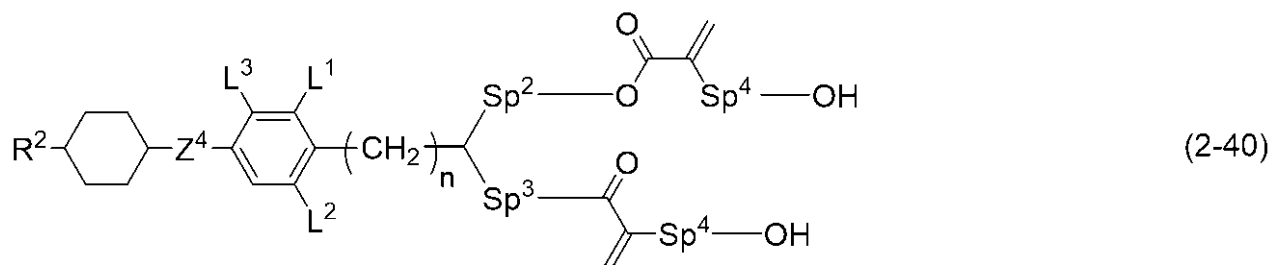
30



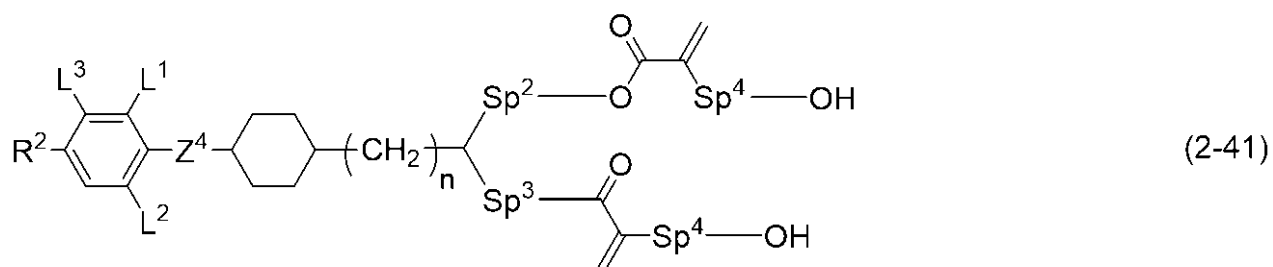
40



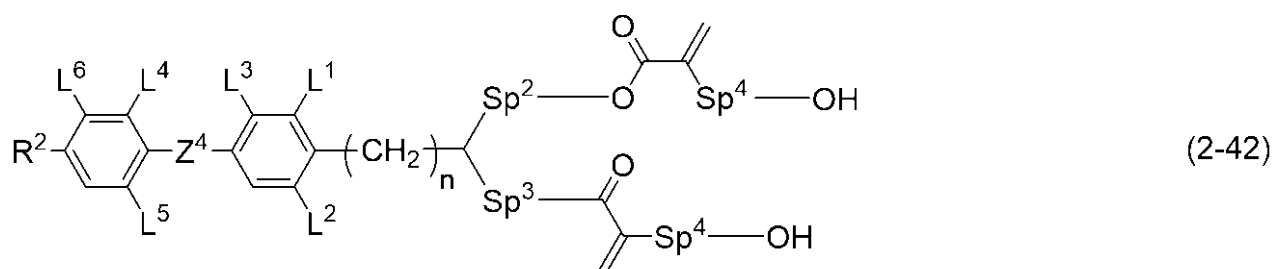
10



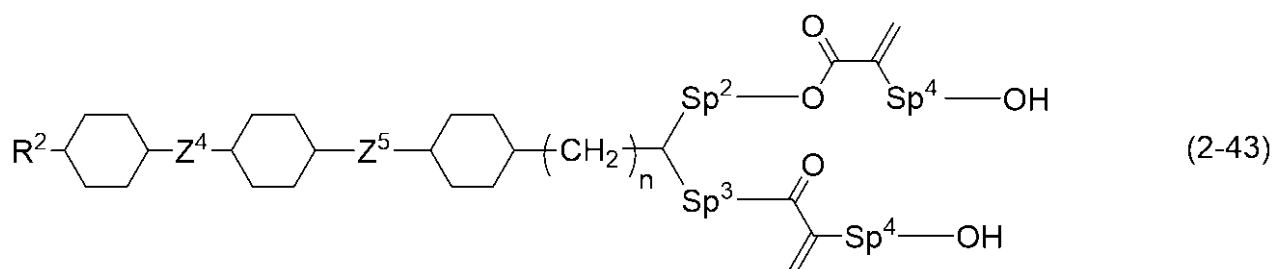
20

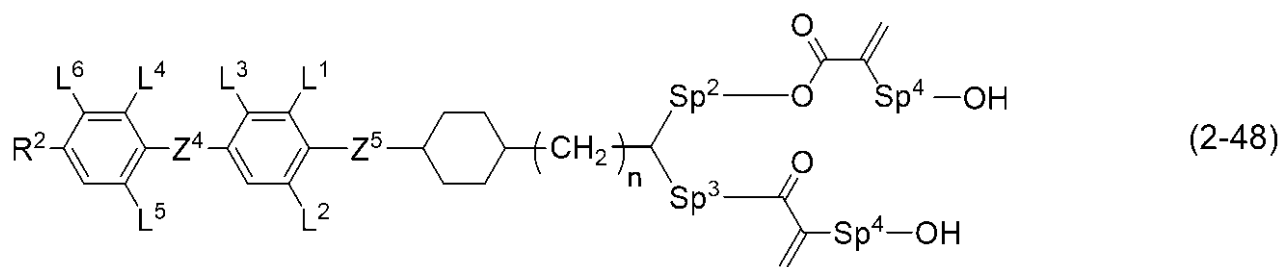
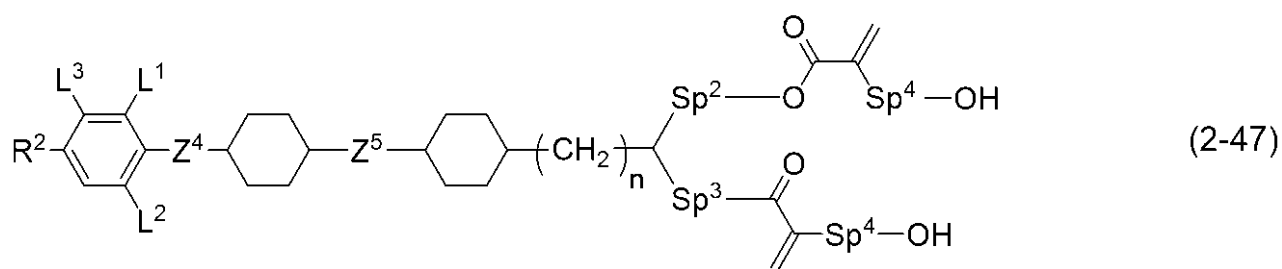
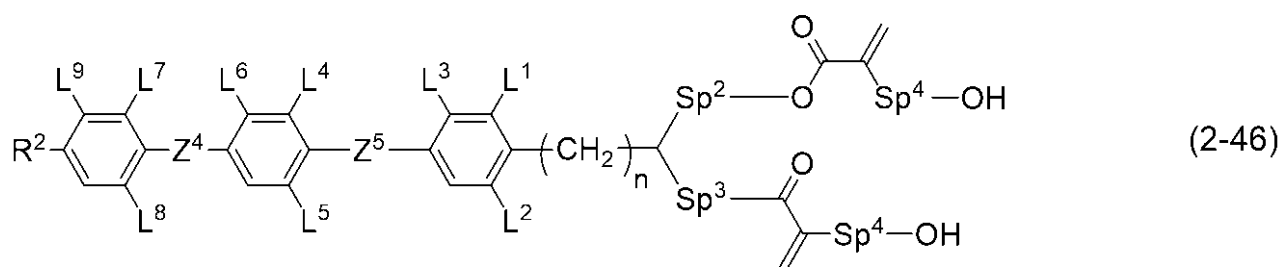
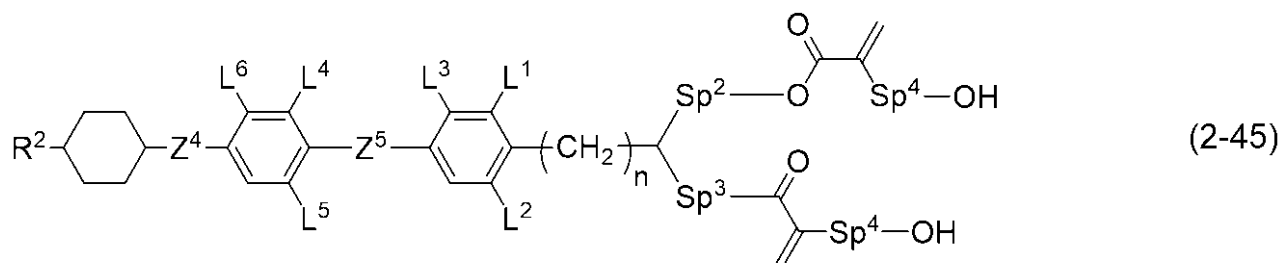
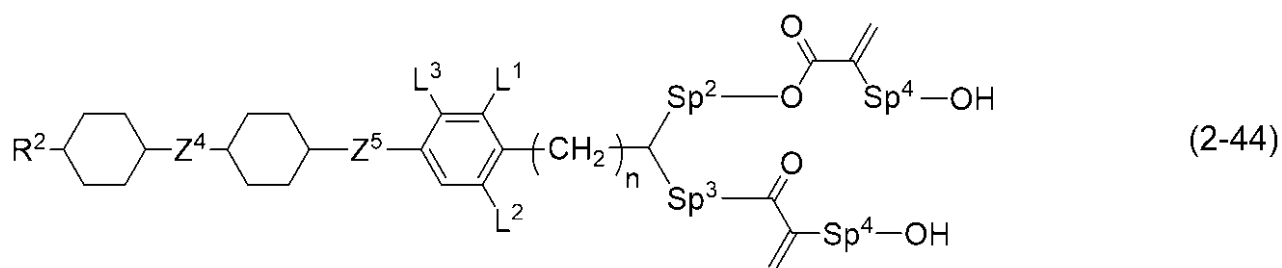


30



40



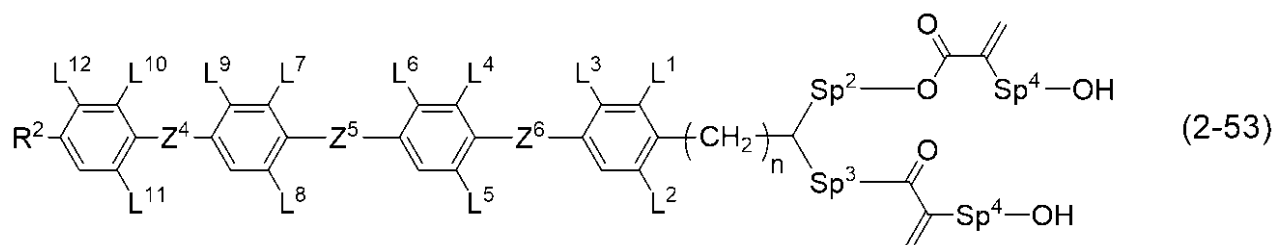
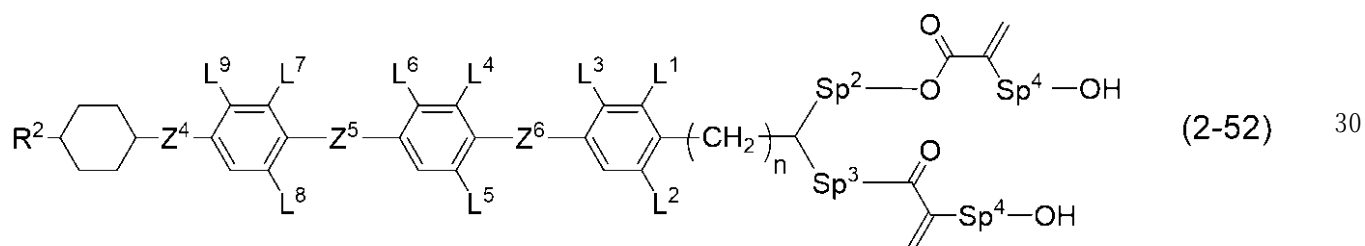
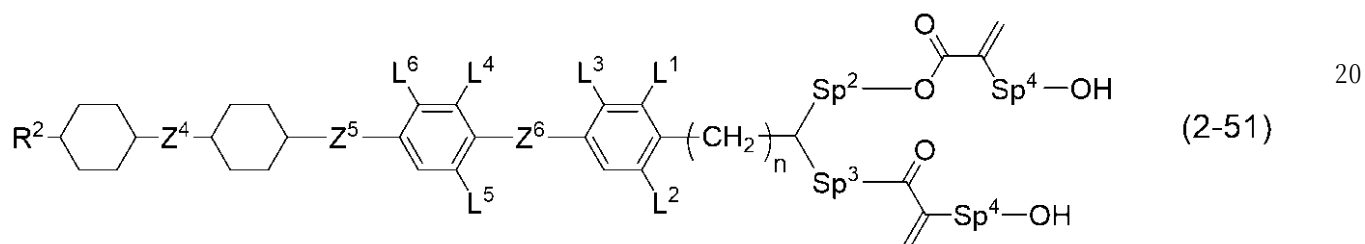
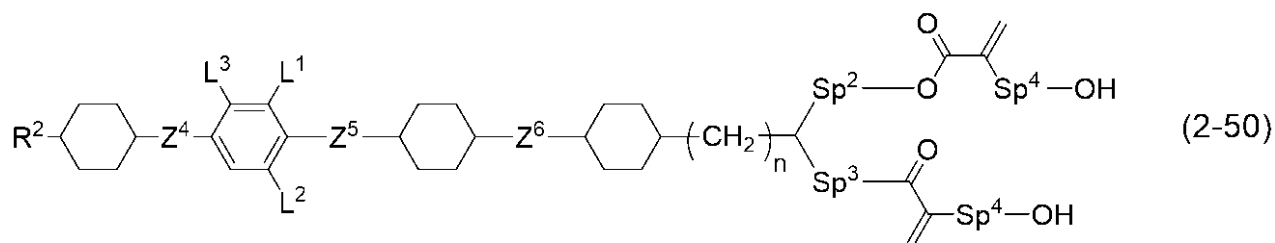
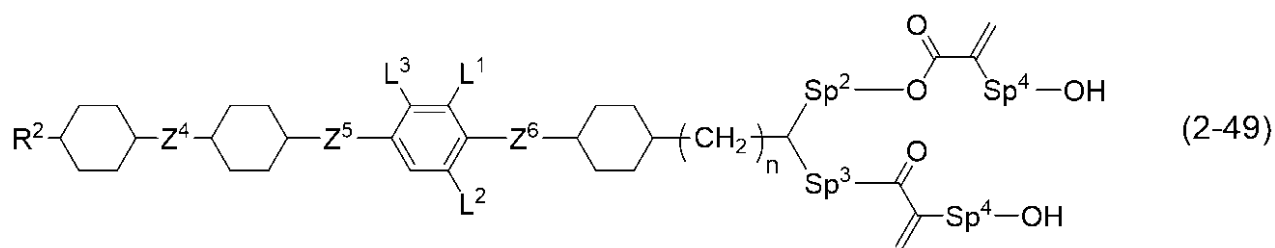


10

20

30

40

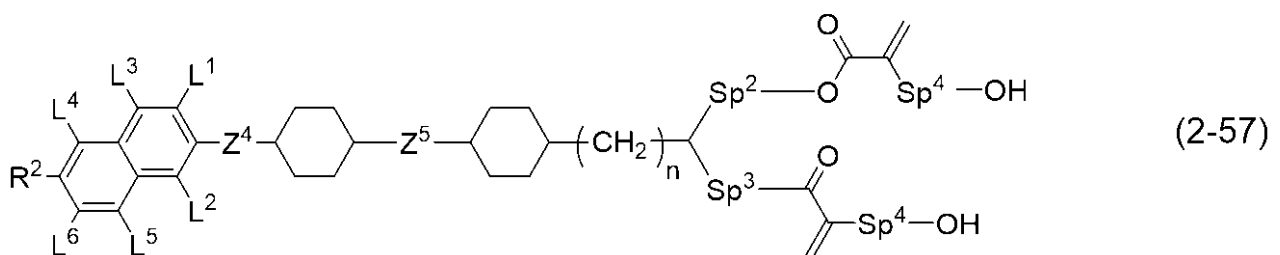
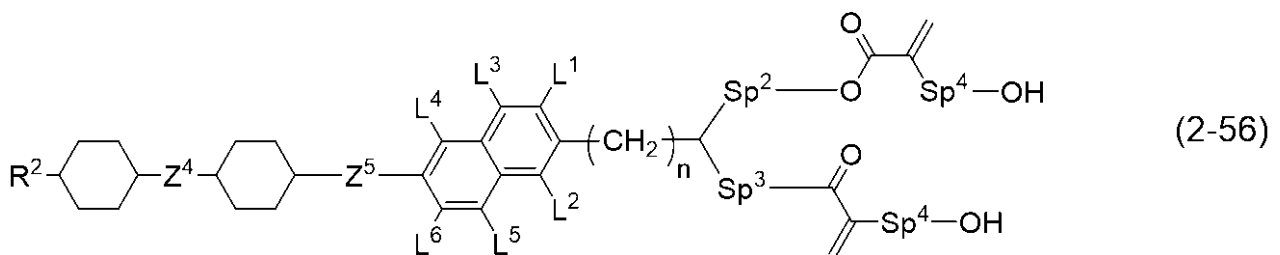
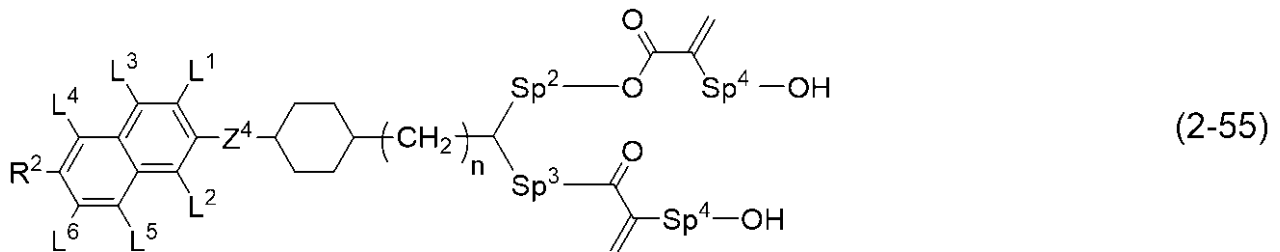
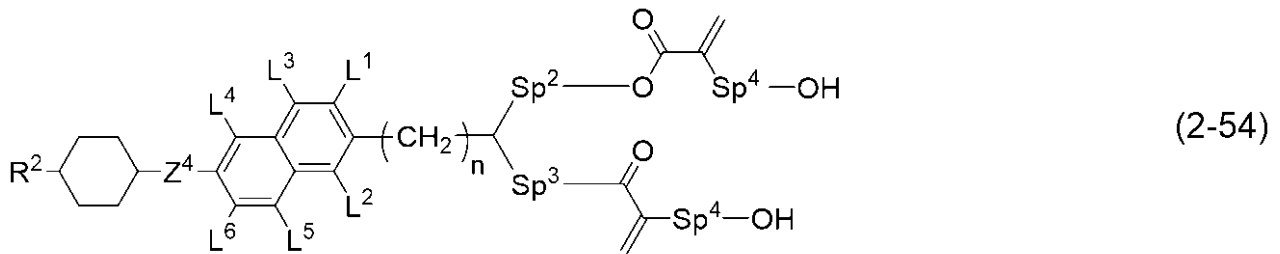


10

20

30

40



式(2-1)から式(2-57)において、 R^2 は、炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； Z^4 、 Z^5 、および Z^6 は、単結合、エチレン、ブチレン、ビニレン、メチレンオキシ、またはジフルオロメチレンオキシであり； Sp^2 、 Sp^3 、 Sp^4 、 Sp^5 、および Sp^6 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、 L^{10} 、 L^{11} 、および L^{12} は、水素、フ

ッ素、メチル、またはエチルであり； n は、0、1、2、3、4、5、または6である。

【請求項4】

第一成分の割合が5質量%から55質量%の範囲である、請求項1から3のいずれか1項に記載の液晶組成物。

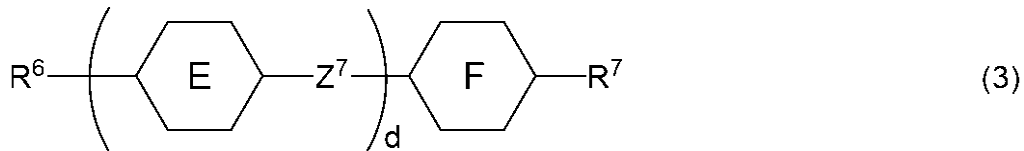
【請求項5】

第一添加物の割合が0.05質量%から10質量%の範囲である、請求項1から4のいずれか1項に記載の液晶組成物。

【請求項6】

第二成分として式(3)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から5のいずれか1項に記載の液晶組成物。

10

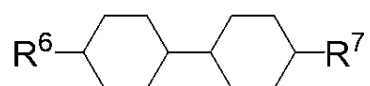


式(3)において、 R^6 および R^7 は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり；環Eおよび環Fは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり； Z^7 は、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり； d は、1、2、または3である。

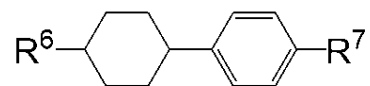
20

【請求項7】

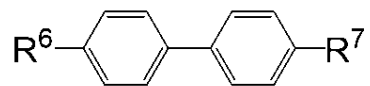
第二成分として式(3-1)から式(3-13)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から6のいずれか1項に記載の液晶組成物。



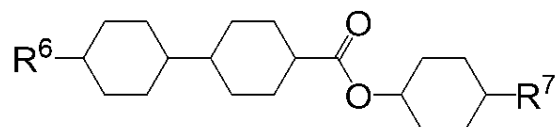
(3-1)



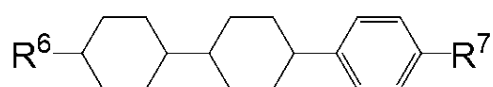
(3-2)



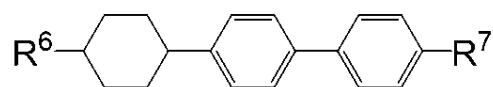
(3-3)



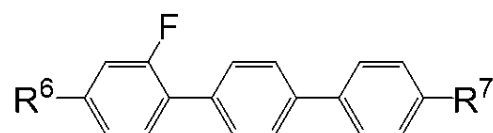
(3-4)



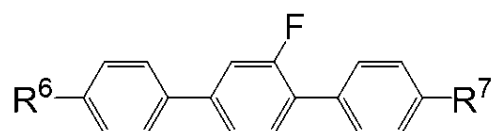
(3-5)



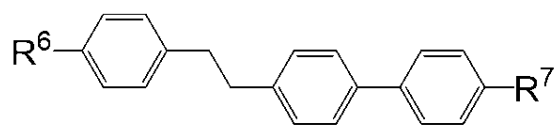
(3-6)



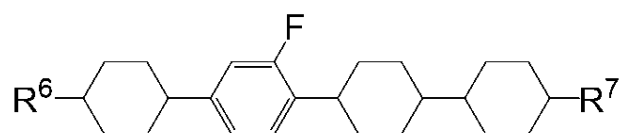
(3-7)



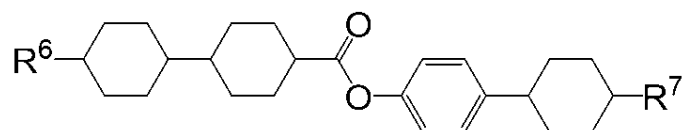
(3-8)



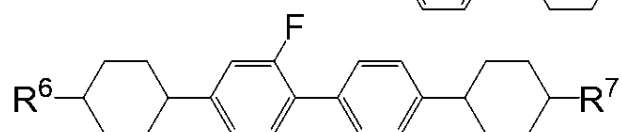
(3-9)



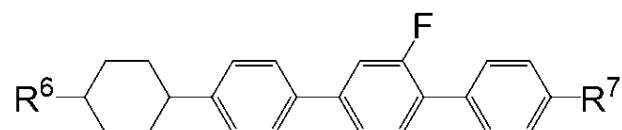
(3-10)



(3-11)



(3-12)



(3-13)

10

20

30

40

50

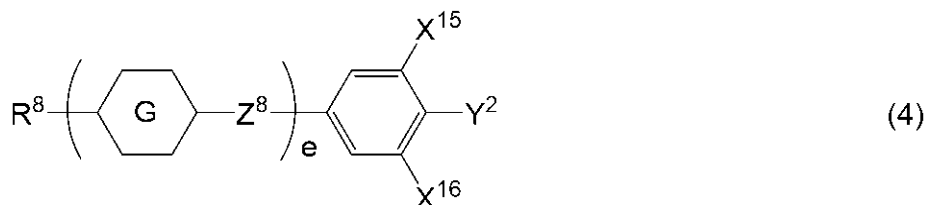
式(3-1)から式(3-13)において、 R^6 および R^7 は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルである。

【請求項8】

第二成分の割合が10質量%から90質量%の範囲である、請求項6または7に記載の液晶組成物。

【請求項9】

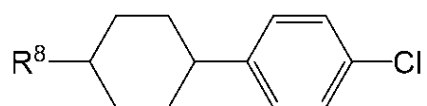
第三成分として式(4)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から8のいずれか1項に記載の液晶組成物。



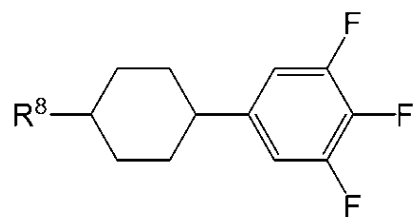
式(4)において、 R^8 は炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；環Gは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2,6-ジフルオロ-1,4-フェニレン、ピリミジン-2,5-ジイル、1,3-ジオキササン-2,5-ジイル、またはテトラヒドロピラン-2,5-ジイルであり； Z^8 は、単結合、エチレン、またはカルボニルオキシであり； X^{15} および X^{16} は、水素またはフッ素であり； Y^2 は、フッ素、塩素、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルオキシであり；eは、1、2、3、または4である。

【請求項10】

第三成分として式(4-1)から式(4-16)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から9のいずれか1項に記載の液晶組成物。

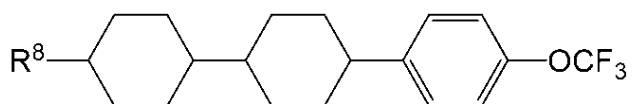


(4-1)

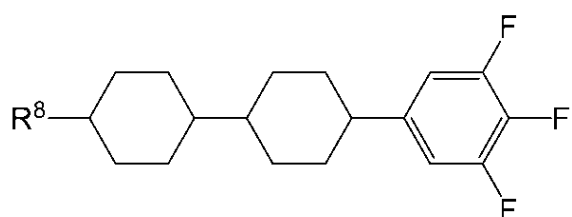


(4-2)

10

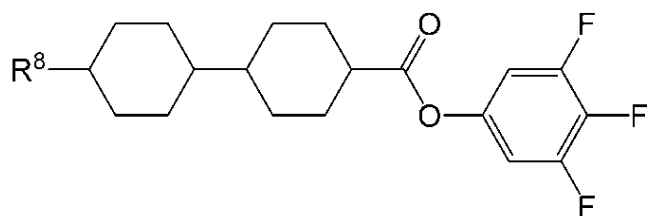


(4-3)



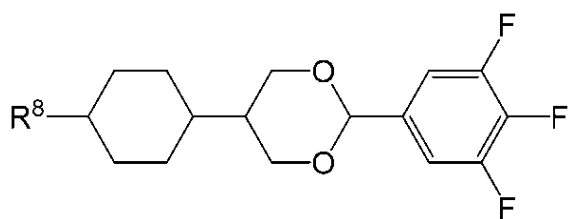
(4-4)

20

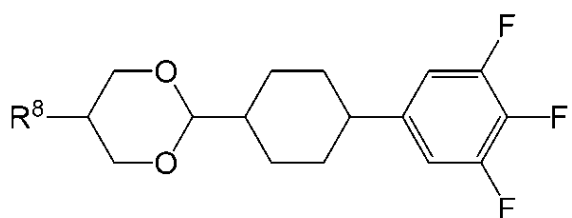


(4-5)

30

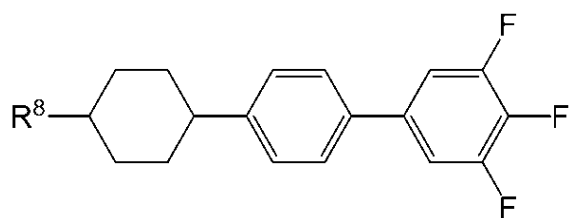


(4-6)



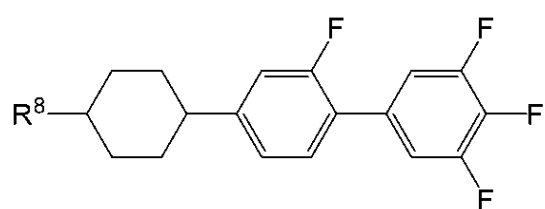
(4-7)

40

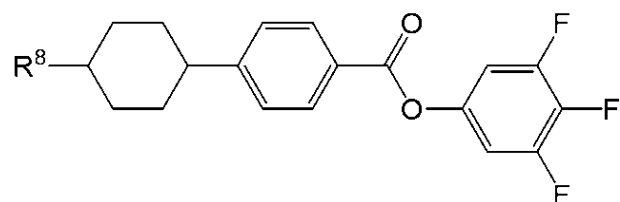


(4-8)

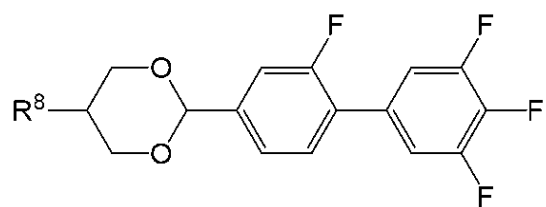
50



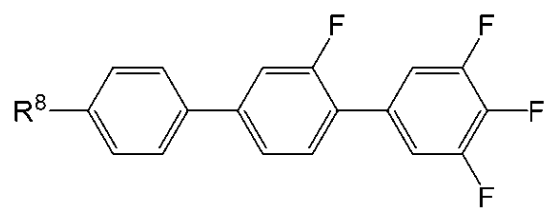
(4-9)



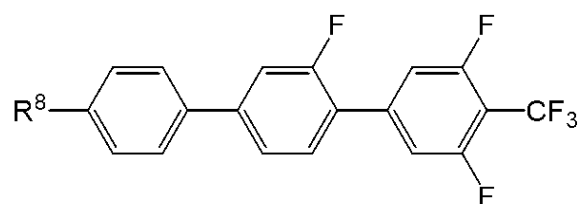
(4-10)



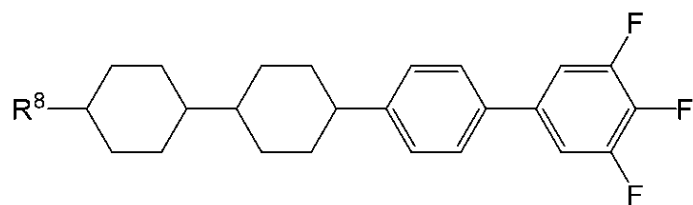
(4-11)



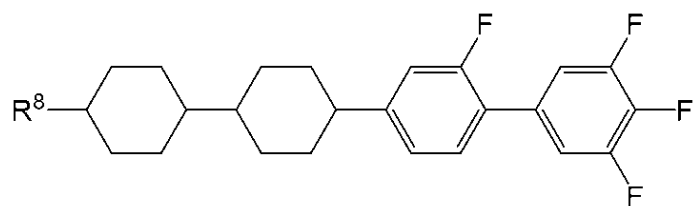
(4-12)



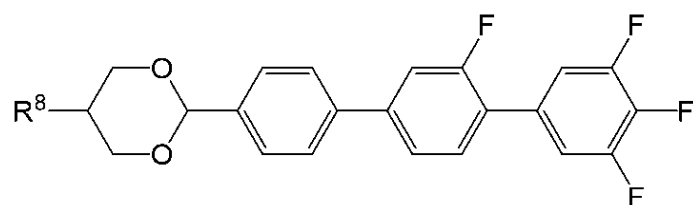
(4-13)



(4-14)



(4-15)



(4-16)

10

20

30

40

50

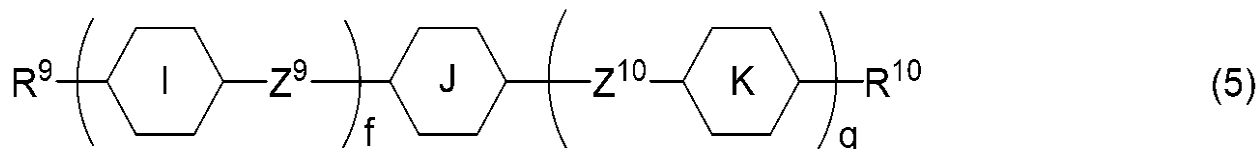
式(4-1)から式(4-16)において、 R^8 は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

【請求項11】

第三成分の割合が5質量%から50質量%の範囲である、請求項9または10に記載の液晶組成物。

【請求項12】

第四成分として式(5)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から11のいずれか1項に記載の液晶組成物。



10

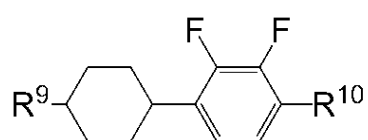
式(5)において、 R^9 および R^{10} は、水素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシであり；環Iおよび環Kは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたナフタレン-2,6-ジイル、クロマン-2,6-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたクロマン-2,6-ジイルであり；環Jは、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2-クロロ-3-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-5-メチル-1,4-フェニレン、3,4,5-トリフルオロナフタレン-2,6-ジイル、7,8-ジフルオロクロマン-2,6-ジイル、3,4,5,6-テトラフルオロフルオレン-2,7-ジイル、4,6-ジフルオロジベンゾフラン-3,7-ジイル、または1,1,6,7-テトラフルオロインダン-2,5-ジイルであり； Z^9 および Z^{10} は、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり；fは、1、2、または3であり、gは、0または1であり、そしてfとgとの和は3以下である。

20

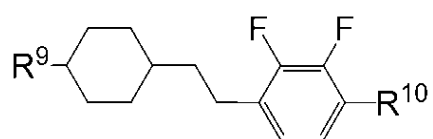
【請求項13】

第四成分として式(5-1)から式(5-33)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から12のいずれか1項に記載の液晶組成物。

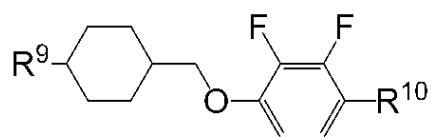
30



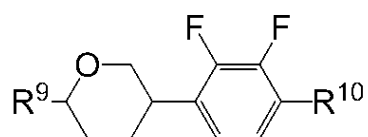
(5-1)



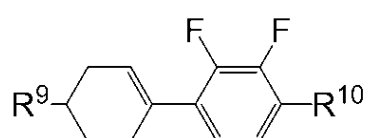
(5-2)



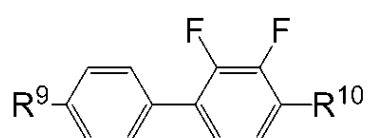
(5-3)



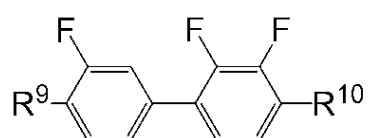
(5-4)



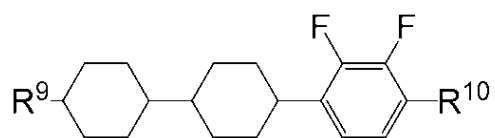
(5-5)



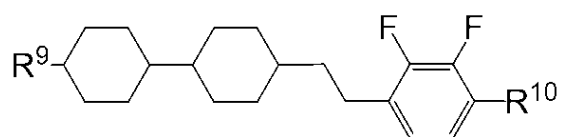
(5-6)



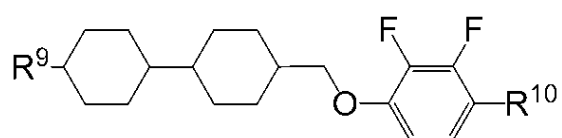
(5-7)



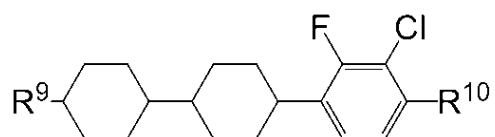
(5-8)



(5-9)



(5-10)



(5-11)

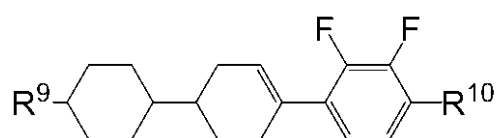
10

20

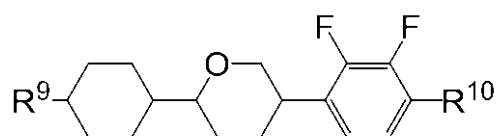
30

40

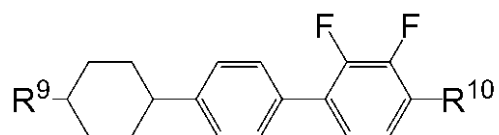
50



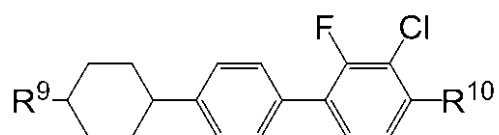
(5-12)



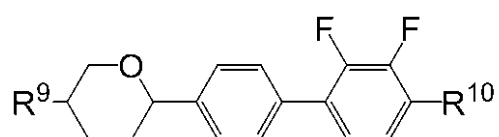
(5-13)



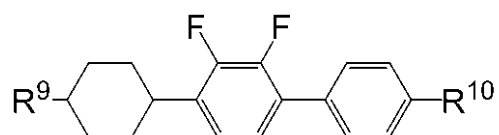
(5-14)



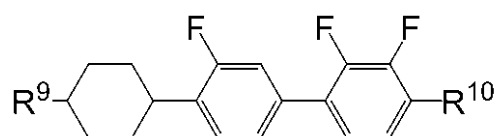
(5-15)



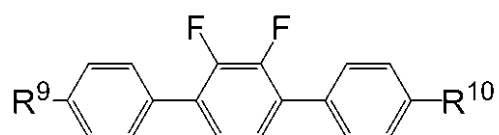
(5-16)



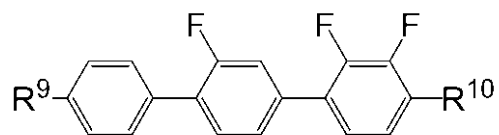
(5-17)



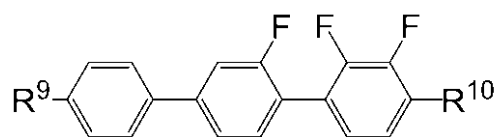
(5-18)



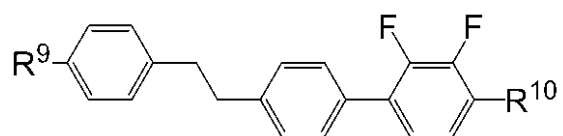
(5-19)



(5-20)



(5-21)



(5-22)

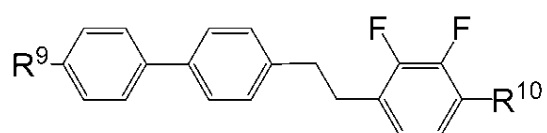
10

20

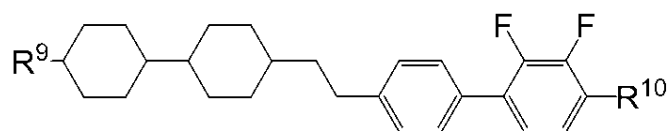
30

40

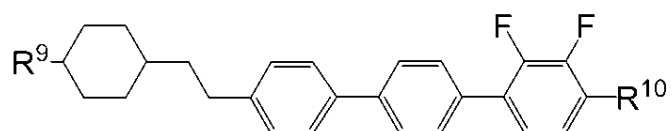
50



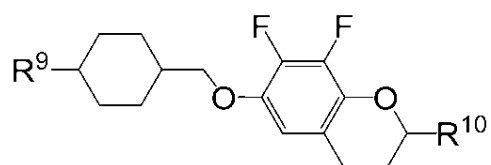
(5-23)



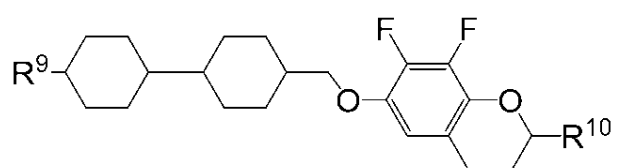
(5-24)



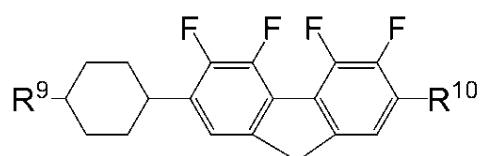
(5-25)



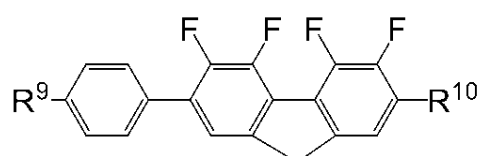
(5-26)



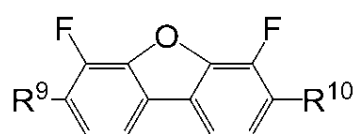
(5-27)



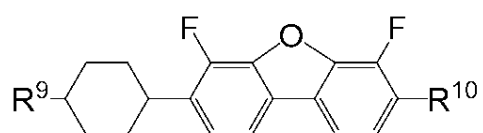
(5-28)



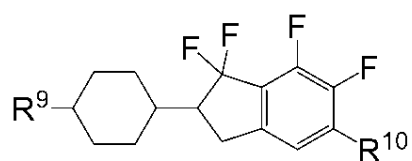
(5-29)



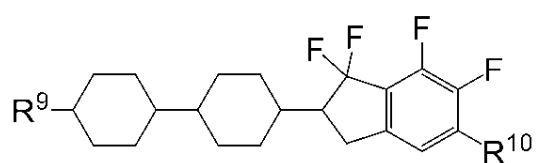
(5-30)



(5-31)



(5-32)



(5-33)

10

20

30

40

50

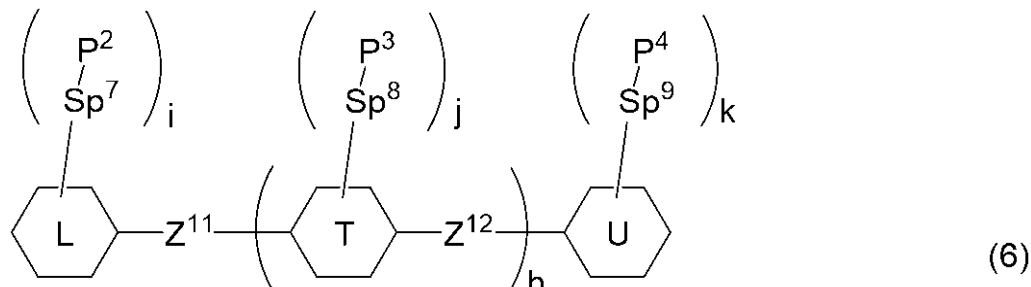
式(5-1)から式(5-33)において、 R^9 および R^{10} は、水素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシである。

【請求項14】

第四成分の割合が3質量%から40質量%の範囲である、請求項12または13に記載の液晶組成物。

【請求項15】

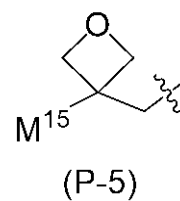
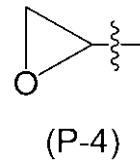
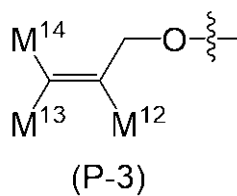
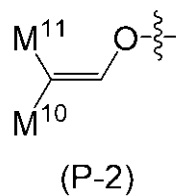
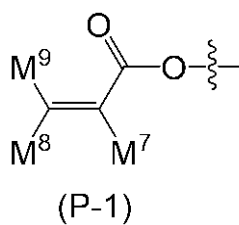
第二添加物として式(6)で表される重合性化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(6)において、環Lおよび環Uは、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1,3-ジオキササン-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；環Tは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキササン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく； Z^{11} および Z^{12} は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ 、 $-C(CH_3)=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)-$ 、または $-C(CH_3)=C(CH_3)-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； P^2 、 P^3 、および P^4 は、請求項1に記載の式(1a)および(1b)で表される重合性基とは異なる重合性基であり； Sp^7 、 Sp^8 、および Sp^9 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；hは0、1、または2であり；i、j、およびkは、0、1、2、3、または4であり、そしてi、j、およびkの和は、1以上である。

【請求項16】

式(6)において、 P^2 、 P^3 、および P^4 が式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基から選択された基である、請求項15に記載の液晶組成物。

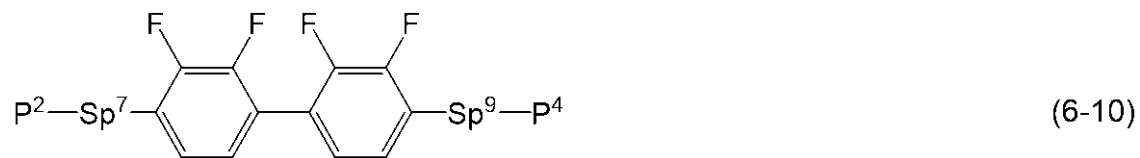
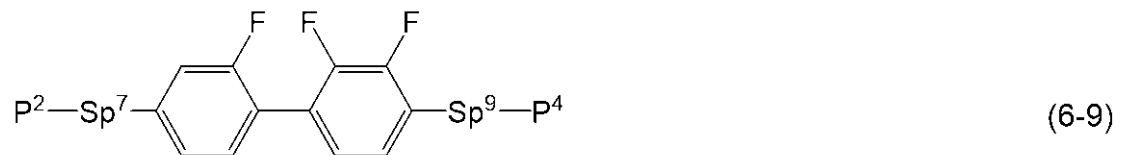
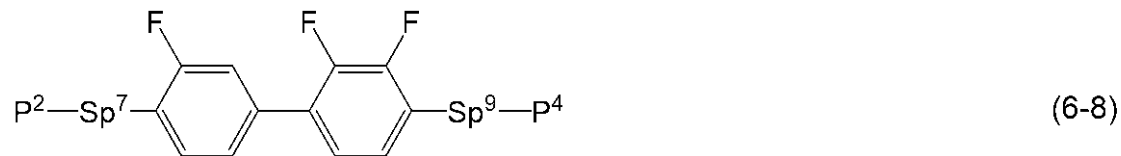
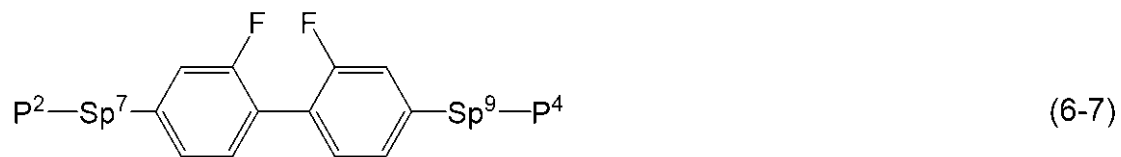
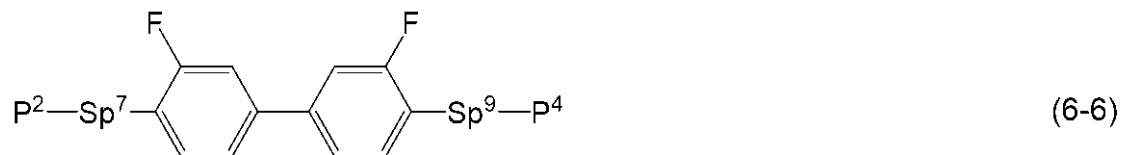
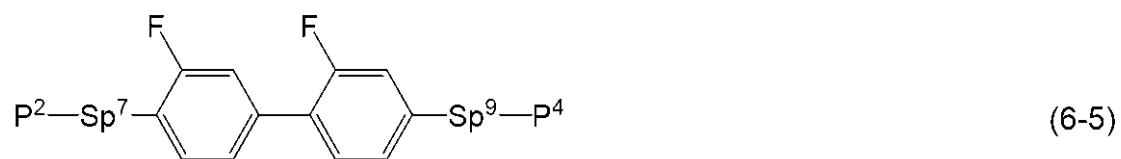
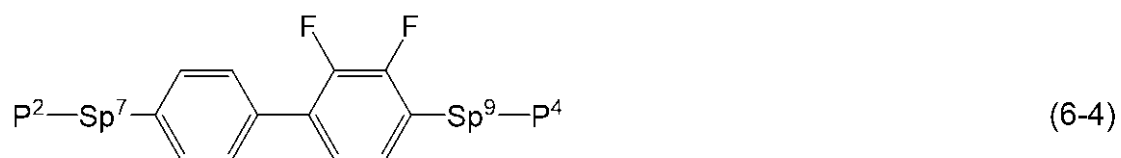
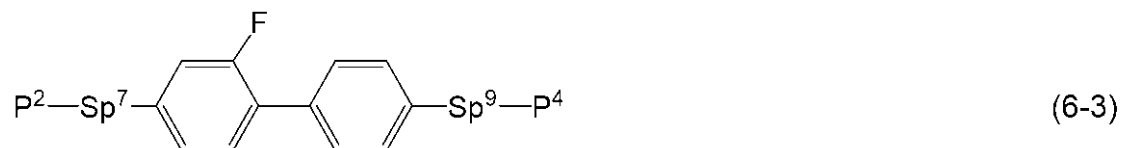
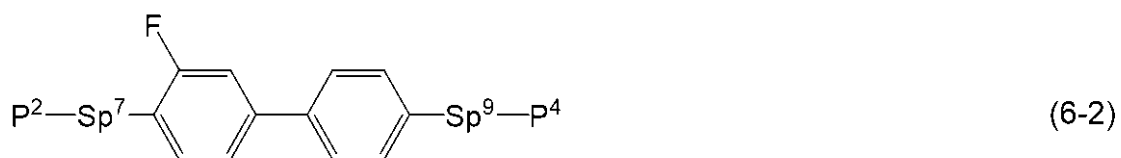
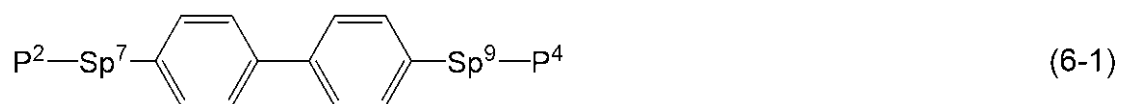


式 (P-1) から式 (P-5) において、 M^7 、 M^8 、 M^9 、 M^{10} 、 M^{11} 、 M^{12} 、 M^{13} 、 M^{14} 、および M^{15} は、水素、フッ素、炭素数 1 から 5 のアルキル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 1 から 5 のアルキルである。

10

【請求項 17】

第二添加物として式 (6-1) から式 (6-28) で表される重合性化合物から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する、請求項 1 から 16 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

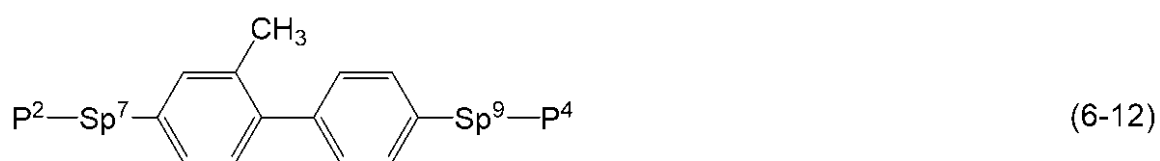
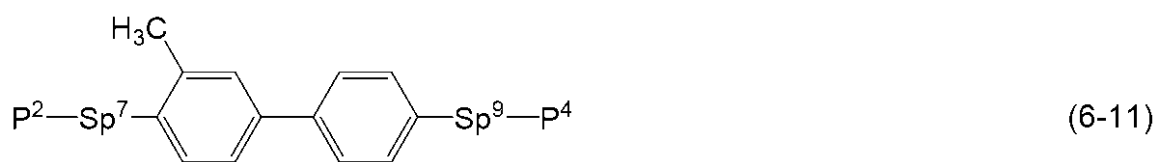


10

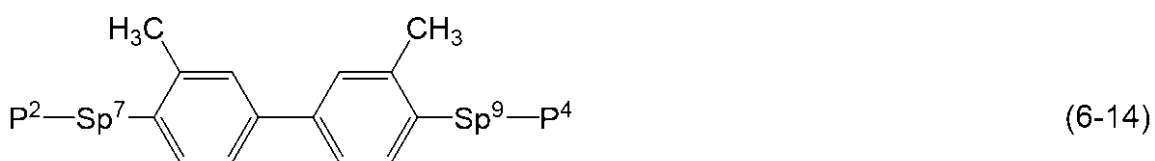
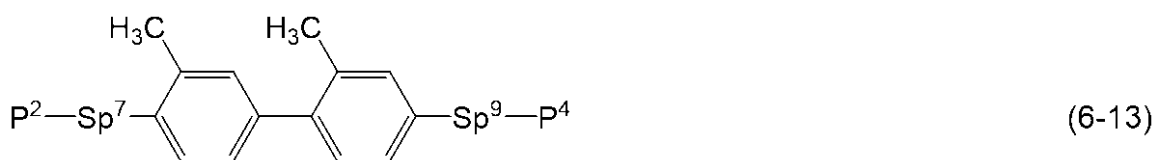
20

30

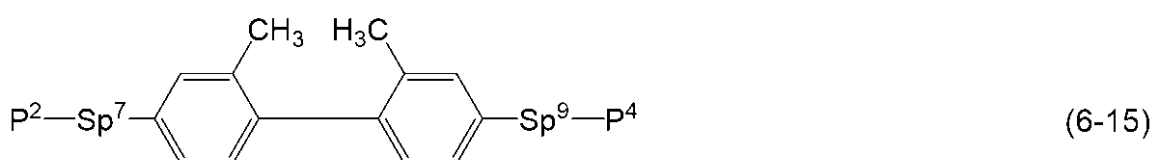
40



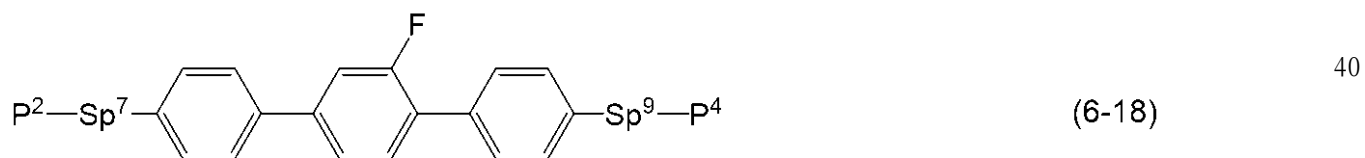
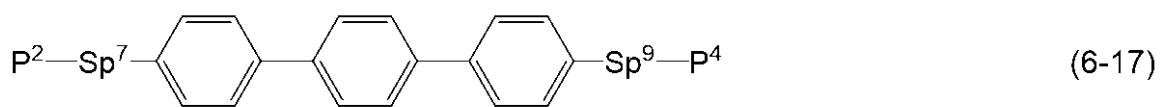
10



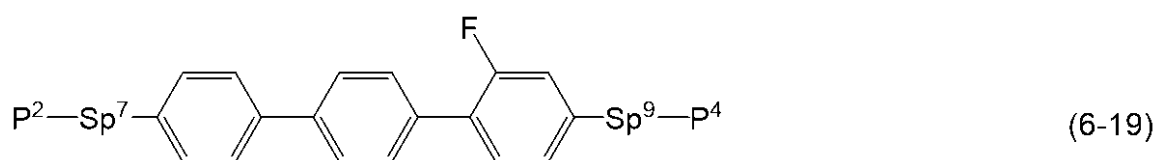
20

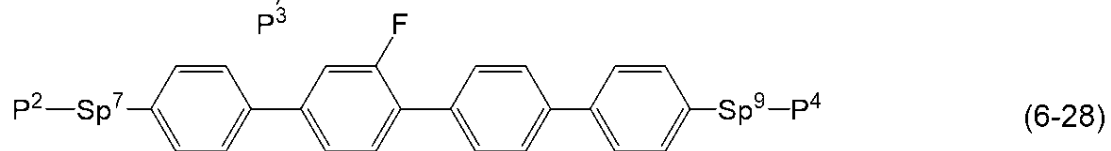
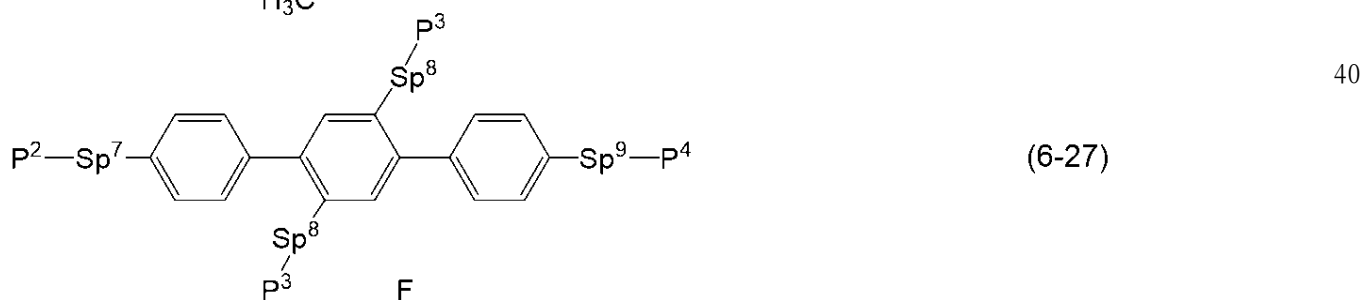
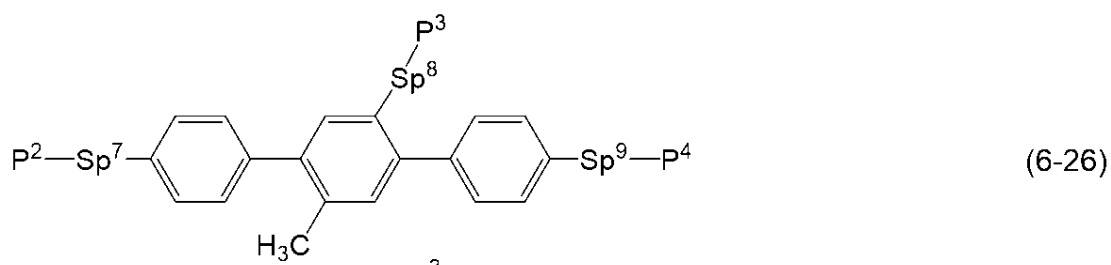
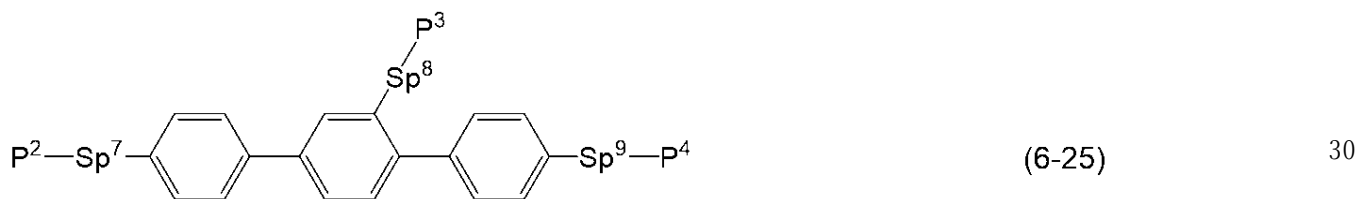
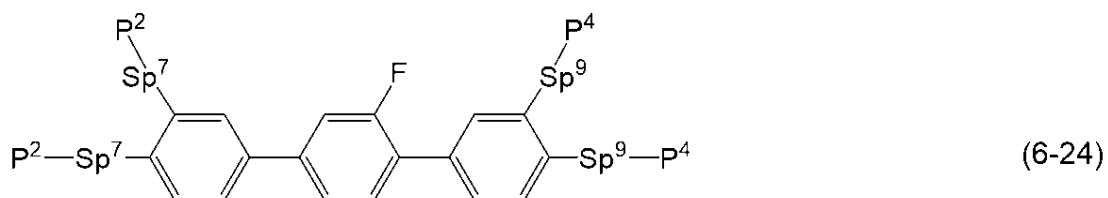
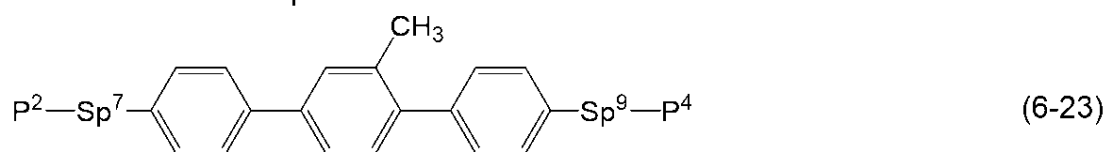
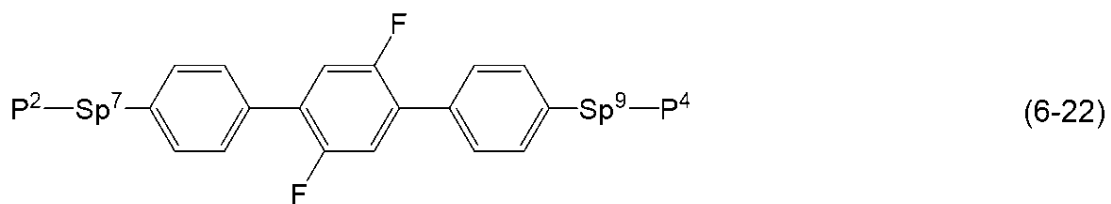
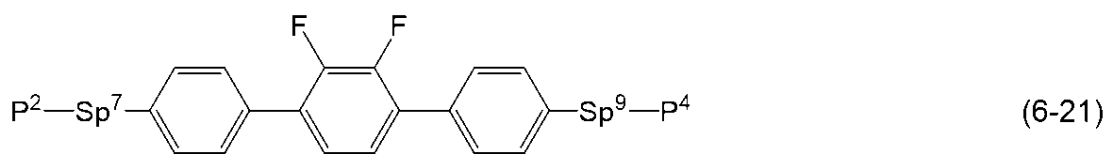
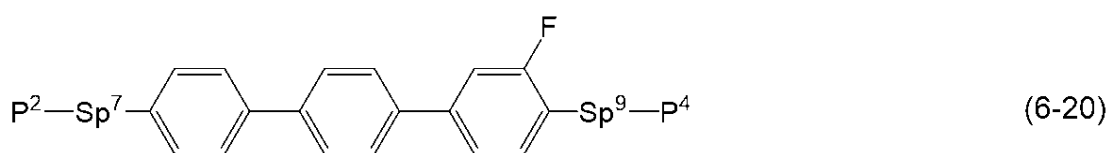


30



40





10

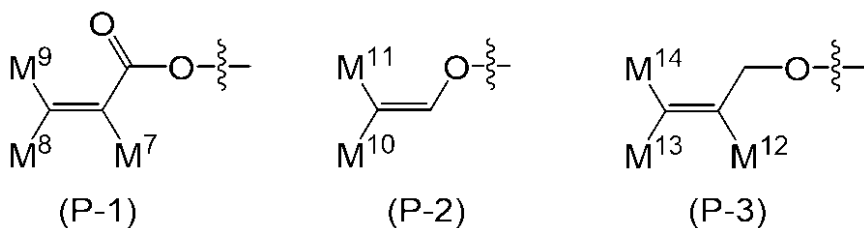
20

30

40

50

式(6-1)から式(6-28)において、 P^2 、 P^3 、および P^4 は、式(P-1)から式(P-3)で表される重合性基から選択された基であり、



10

ここで、 M^7 、 M^8 、 M^9 、 M^{10} 、 M^{11} 、 M^{12} 、 M^{13} 、および M^{14} は、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり； Sp^7 、 Sp^8 、および Sp^9 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【請求項18】

第二添加物の割合が0.03質量%から10質量%の範囲である、請求項15から17のいずれか1項に記載の液晶組成物。

20

【請求項19】

請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【請求項20】

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

【請求項21】

請求項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物が重合された、高分子支持配向型の液晶表示素子。

30

【請求項22】

請求項15から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物および第二添加物が重合された、高分子支持配向型の液晶表示素子。

【請求項23】

請求項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物が重合された、配向膜を有しない液晶表示素子。

【請求項24】

請求項15から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物および第二添加物が重合された、配向膜を有しない液晶表示素子。

【請求項25】

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

40

【請求項26】

請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、高分子支持配向型の液晶表示素子における使用。

【請求項27】

請求項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、配向膜を有しない液晶表示素子における使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

50

本発明は、誘電率異方性が正の液晶組成物、この組成物を含有する液晶表示素子などに関する。特に、重合性基を有する極性化合物（またはこの重合体）を含有し、この化合物の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能な液晶組成物、および液晶表示素子に関する。

【背景技術】

【0002】

液晶表示素子において、液晶分子の動作モードに基づいた分類は、P C (phase change)、T N (twisted nematic)、S T N (super twisted nematic)、E C B (electrically controlled birefringence)、O C B (optically compensated bend)、I P S (in-plane switching)、V A (vertical alignment)、F F S (fringe field switching)、F P A (field-induced photo-reactive alignment)などのモードである。素子の駆動方式に基づいた分類は、P M (passive matrix)とA M (active matrix)である。P Mは、スタティック (static)、マルチプレックス (multiplex)などに分類され、A Mは、T F T (thin film transistor)、M I M (metal insulator metal)などに分類される。T F Tの分類は非晶質シリコン (amorphous silicon) および多結晶シリコン (polycrystal silicon) である。後者は製造工程によって高温型と低温型とに分類される。光源に基づいた分類は、自然光を利用する反射型、バックライトを利用する透過型、そして自然光とバックライトの両方を利用する半透過型である。

【0003】

液晶表示素子はネマチック相を有する液晶組成物を含有する。この組成物は適切な特性を有する。この組成物の特性を向上させることによって、良好な特性を有するA M素子を得ることができる。これらの特性における関連を下記の表1にまとめる。組成物の特性を市販されているA M素子に基づいてさらに説明する。ネマチック相の温度範囲は、素子の使用できる温度範囲に関連する。ネマチック相の好ましい上限温度は約70℃以上であり、そしてネマチック相の好ましい下限温度は約-10℃以下である。組成物の粘度は素子の応答時間に関連する。素子で動画を表示するためには短い応答時間が好ましい。1ミリ秒でもより短い応答時間が望ましい。したがって、組成物における小さな粘度が好ましい。低い温度における小さな粘度はより好ましい。組成物の弾性定数は素子のコントラストに関連する。素子においてコントラストを上げるためには、組成物における大きな弾性定数がより好ましい。

【0004】

表1. 組成物の特性とAM素子の特性

No	組成物の特性	AM素子の特性
1	ネマチック相の温度範囲が広い	使用できる温度範囲が広い
2	粘度が小さい	応答時間が短い
3	光学異方性が適切である	コントラスト比が大きい
4	正または負に誘電率異方性が大きい	しきい値電圧が低く、消費電力が小さい コントラスト比が大きい
5	比抵抗が大きい	電圧保持率が大きく、コントラスト比が大きい
6	紫外線および熱に安定である	寿命が長い
7	弾性定数が大きい	コントラスト比が大きい、応答時間が短い

【0005】

組成物の光学異方性は、素子のコントラスト比に関連する。素子のモードに応じて、大きな光学異方性または小さな光学異方性、すなわち適切な光学異方性が必要である。組成物の光学異方性 (Δn) と素子のセルギャップ (d) との積 ($\Delta n \times d$) は、コントラスト比を最大にするように設計される。積の適切な値は動作モードの種類に依存する。この

値は、VAモードの素子では約0.30 μmから約0.40 μmの範囲であり、IPSモードまたはFFSモードの素子では約0.20 μmから約0.30 μmの範囲である。これらの場合、小さなセルギャップの素子には大きな光学異方性を有する組成物が好ましい。組成物における大きな誘電率異方性は、素子における低いしきい値電圧、小さな消費電力と大きなコントラスト比に寄与する。したがって、大きな誘電率異方性が好ましい。組成物における大きな比抵抗は、素子における大きな電圧保持率と大きなコントラスト比とに寄与する。したがって、初期段階において大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。長時間使用したあと、大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。紫外線や熱に対する組成物の安定性は、素子の寿命に関連する。この安定性が高いとき、素子の寿命は長い。このような特性は、液晶モニター、液晶テレビなどに用いるAM素子に好ましい。

10

【0006】

汎用の液晶表示素子において、液晶分子の垂直配向は、特定のポリイミド配向膜によって達成される。高分子支持配向(PSA; polymer sustained alignment)型の液晶表示素子では、配向膜に重合体を組み合わせる。まず、少量の重合性化合物を添加した組成物を素子に注入する。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。重合性化合物は重合して、組成物中に重合体の網目構造を生成する。この組成物では、重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。重合体のこのような効果は、TN、ECB、OCB、IPS、VA、FFS、FPAのようなモードを有する素子に期待できる。

【0007】

一方、配向膜を有しない液晶表示素子では、重合体および極性化合物を含有する液晶組成物が用いられる。まず、少量の重合性化合物および少量の極性化合物を添加した組成物を素子に注入する。ここで、極性化合物は素子の基板表面に吸着され、配列する。この配列にしたがって液晶分子が配向される。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。ここで、重合性化合物が重合し、液晶分子の配向を安定化させる。この組成物では、重合体および極性化合物によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。さらに、配向膜を有しない素子では、配向膜を形成する工程が不要である。配向膜がないので、配向膜と組成物との相互作用によって、素子の電気抵抗が低下することはない。重合体と極性化合物の組合せによるこのような効果は、TN、ECB、OCB、IPS、VA、FFS、FPAのようなモードを有する素子に期待できる。

20

30

【0008】

TNモードを有するAM素子においては正の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。VAモードを有するAM素子においては負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。IPSモードまたはFFSモードを有するAM素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。高分子支持配向型のAM素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。配向膜を有しない素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。正の誘電率異方性を有する組成物は次の特許文献1から4などに開示されている。本発明では、重合性基を有する極性化合物(またはこの重合体)を液晶性化合物と組合せ、この組成物を、配向膜を有しない液晶表示素子に用いた。

40

【先行技術文献】

【特許文献】

【0009】

【特許文献1】特表2013-541028号公報

【特許文献2】特表2013-543526号公報

【特許文献3】特表2014-513150号公報

【特許文献4】国際公開2014-94959号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

50

【0010】

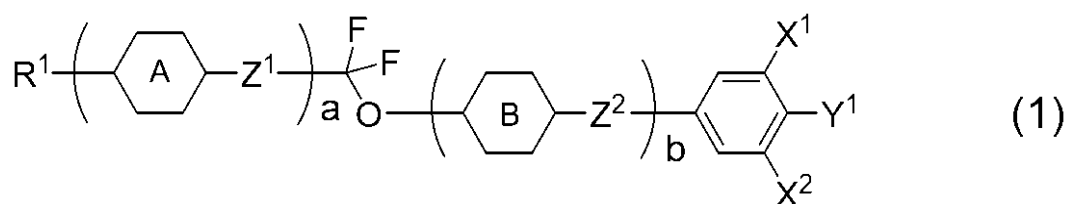
本発明の課題は、重合性基を有する極性化合物（またはこの重合体）を含有する液晶組成物を提供することであり、ここで、極性化合物は液晶性化合物との高い相溶性を有する。別の課題は、この極性化合物から生じた重合体の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能な液晶組成物を提供することである。別の課題は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数のような特性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を提供することである。別の課題は、これらの特性の少なくとも2つのあいだで適切なバランスを有する液晶組成物を提供することである。別の課題は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。別の課題は、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するAM素子を提供することである。

10

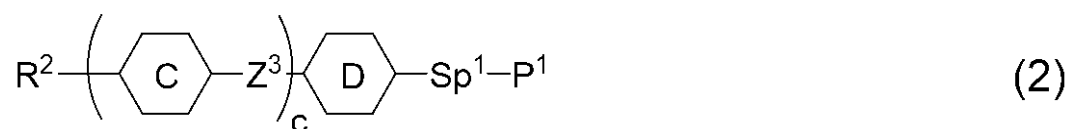
【課題を解決するための手段】

【0011】

本発明は、第一成分として式（1）で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物、および第一添加物として式（2）で表される極性化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する液晶組成物、およびこの組成物を含有する液晶表示素子である。



20



ここで、 R^1 などの記号の定義は、後述の項1を参照のこと。

30

【発明の効果】

【0012】

本発明の長所は、重合性基を有する極性化合物（またはこの重合体）を含有する液晶組成物を提供することであり、ここで、極性化合物は液晶性化合物との高い相溶性を有する。別の長所は、この極性化合物から生じた重合体の作用によって液晶分子の垂直配向が達成可能な液晶組成物を提供することである。別の長所は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数のような特性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を提供することである。別の長所は、これらの特性の少なくとも2つのあいだで適切なバランスを有する液晶組成物を提供することである。別の長所は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。別の長所は、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するAM素子を提供することである。

40

【発明を実施するための形態】

【0013】

この明細書における用語の使い方は次のとおりである。「液晶組成物」および「液晶表示素子」の用語をそれぞれ「組成物」および「素子」と略すことがある。「液晶表示素子」は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。「液晶性化合物」は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物および液晶相を有しないが、ネマチック相の温度範囲、粘度、誘電率異方性のような特性を調節する目的で組成物に混合さ

50

れる化合物の総称である。この化合物は、例えば1, 4-シクロヘキシレンや1, 4-フェニレンのような六員環を有し、その分子（液晶分子）は棒状（rod like）である。「重合性化合物」は、組成物中に重合体を生成させるために添加する化合物である。アルケニルを有する液晶性化合物は、その意味では重合性ではない。

【0014】

液晶組成物は、複数の液晶性化合物を混合することによって調製される。この液晶組成物に、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、消光剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物のような添加物が必要に応じて添加される。液晶性化合物の割合は、添加物を添加した場合であっても、添加物を含まない液晶組成物の質量に基づいた質量百分率（質量%）で表される。添加物の割合は、添加物を含まない液晶組成物の質量に基づいた質量百分率（質量%）で表される。すなわち、液晶性化合物や添加物の割合は、液晶性化合物の全質量に基づいて算出される。質量百万分率（ppm）が用いられることがある。重合開始剤および重合禁止剤の割合は、例外的に重合性化合物の質量に基づいて表される。

10

【0015】

「ネマチック相の上限温度」を「上限温度」と略すことがある。「ネマチック相の下限温度」を「下限温度」と略すことがある。「比抵抗が大きい」は、組成物が初期段階において大きな比抵抗を有し、そして長時間使用したあと大きな比抵抗を有することを意味する。「電圧保持率が大きい」は、素子が初期段階において室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有し、そして長時間使用したあと室温だけでなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有することを意味する。組成物や素子の特性が経時変化試験によって検討されることがある。「誘電率異方性を上げる」の表現は、誘電率異方性が正である組成物のときは、その値が正に増加することを意味し、誘電率異方性が負である組成物のときは、その値が負に増加することを意味する。

20

【0016】

式（1）で表される化合物を「化合物（1）」と略すことがある。式（1）で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を「化合物（1）」と略すことがある。「化合物（1）」は、式（1）で表される1つの化合物、2つの化合物の混合物または3つ以上の化合物の混合物を意味する。「式（1）および式（2）で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物」の表現は、化合物（1）および化合物（2）の群から選択された少なくとも1つの化合物を意味する。「少なくとも1つの‘A’」の表現は、‘A’の数は任意であることを意味する。「少なくとも1つの‘A’は、‘B’で置き換えられてもよい」の表現は、‘A’の数が1つのとき、‘A’の位置は任意であり、‘A’の数が2つ以上のときも、それらの位置は制限なく選択できる。このルールは、「少なくとも1つの‘A’が、‘B’で置き換えられた」の表現にも適用される。

30

【0017】

「少なくとも1つの-CH₂-は-O-で置き換えられてもよい」のような表現が使われることがある。この場合、-CH₂-CH₂-CH₂-は、隣接しない-CH₂-が-O-で置き換えられることによって-O-CH₂-O-に変換されてもよい。しかしながら、隣接した-CH₂-が-O-で置き換えられることはない。この置き換えでは不安定な-O-O-CH₂-（ペルオキシド）が生成するからである。すなわち、この表現は、「1つの-CH₂-は-O-で置き換えられてもよい」と「少なくとも2つの隣接しない-CH₂-は-O-で置き換えられてもよい」の両方とを意味する。

40

【0018】

成分化合物の化学式において、末端基R¹の記号を複数の化合物に用いる。これらの化合物において、任意の2つのR¹が表す2つの基は同一であってもよく、または異なってもよい。例えば、化合物（1-1）のR¹がエチルであり、化合物（1-2）のR¹がエチルであるケースがある。化合物（1-1）のR¹がエチルであり、化合物（1-2）のR¹がプロピルであるケースもある。このルールは、他の記号にも適用される。式（1）において、添え字‘a’が2のとき、2つの環Aが存在する。この化合物において、2つ

50

の環 A が表す 2 つの環は、同一であってもよく、または異なってもよい。このルールは、添え字 ‘ a ’ が 2 より大きいとき、任意の 2 つの環 A にも適用される。このルールは、化合物が同一の置換基を有する場合にも適用される。

【 0 0 1 9 】

六角形で囲んだ A、B、C、D などの記号はそれぞれ環 A、環 B、環 C、環 D などの環に対応し、六員環、縮合環などの環を表す。式 (6) において、六角形の一辺を横切る斜線は、環上の任意の水素が $-S p^7 - P^2$ などの基で置き換えられてもよいことを表す。

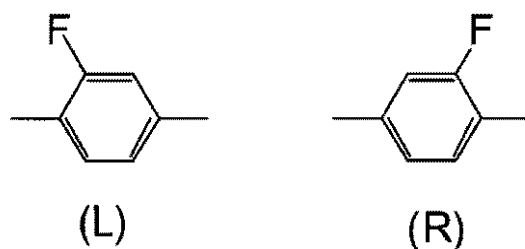
‘ i ’ などの添え字は、置き換えられた基の数を示す。添え字 ‘ i ’ が 0 のとき、そのような置き換えはない。添え字 ‘ i ’ が 2 以上のとき、環 L 上には複数の $-S p^7 - P^2$ が存在する。 $-S p^7 - P^2$ が表す複数の基は、同一であってもよく、または異なってもよい。「環 A および環 B は、X、Y、または Z である」の表現は、環 A および環 B が独立して、X、Y、および Z の群から選択されることを意味する。このルールは、他の記号にも適用される。

10

【 0 0 2 0 】

2-フルオロ-1, 4-フェニレンは、下記の 2 つの二価基を意味する。化学式において、フッ素は左向き (L) であってもよく、右向き (R) であってもよい。このルールは、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイルのような、環から 2 つの水素を除くことによって生成した、左右非対称な二価基にも適用される。このルールは、カルボニルオキシ ($-C O O-$ または $び-O C O-$) のような二価の結合基にも適用される。

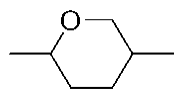
20



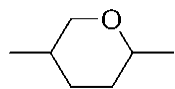
【 0 0 2 1 】

液晶性化合物のアルキルは、直鎖状または分岐状であり、環状アルキルを含まない。直鎖状アルキルは、分岐状アルキルよりも好ましい。これらのことは、アルコキシ、アルケニルなどの末端基についても同様である。1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置は、上限温度を上げるためにシスよりもトランスが好ましい。テトラヒドロピラン-2, 5-ジイルは、

30

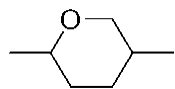


または



40

であり、好ましくは



である。

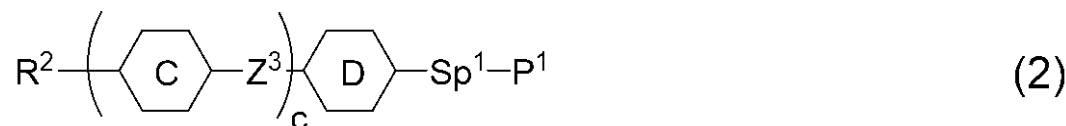
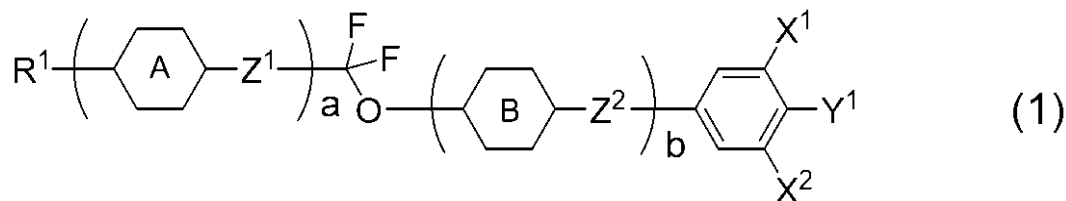
【 0 0 2 2 】

本発明は、下記の項などである。

【 0 0 2 3 】

50

項 1. 第一成分として式 (1) で表される化合物から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第一添加物として式 (2) で表される極性化合物から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する液晶組成物。



式 (1) および式 (2) において、 R^1 は、炭素数 1 から 12 のアルキル、炭素数 1 から 12 のアルコキシ、または炭素数 2 から 12 のアルケニルであり； R^2 は、炭素数 1 から 15 のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；環 A および環 B は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、2, 6-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、またはテトラヒドロピラン-2, 5-ジイルであり；環 C および環 D は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、フルオレン-2, 7-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、アントラセン-2, 6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、または 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素、塩素、炭素数 1 から 12 のアルキル、炭素数 2 から 12 のアルケニル、炭素数 1 から 12 のアルコキシ、または炭素数 2 から 12 のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； Z^1 および Z^2 は、単結合、エチレン、ビニレン、メチレンオキシ、カルボニルオキシ、またはジフルオロメチレンオキシであり； Z^3 は、単結合または炭素数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； X^1 および X^2 は、水素またはフッ素であり； Y^1 は、フッ素、塩素、少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 1 から 12 のアルキル、少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 1 から 12 のアルコキシ、または少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 2 から 12 のアルケニルオキシであり；a は、1、2、3、または 4 であり；b は、0、1、2、または 3 であり、そして a および b の和は 4 以下であり；c は、0、1、2、3、または 4 であり； Sp^1 は、単結合または炭素数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$

10

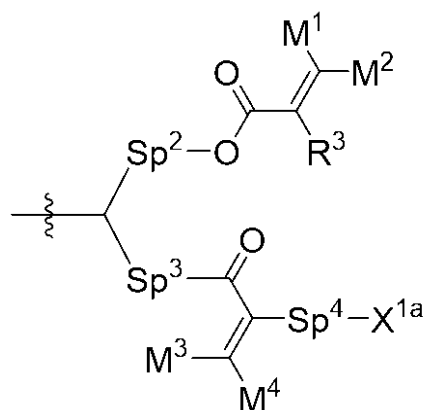
20

30

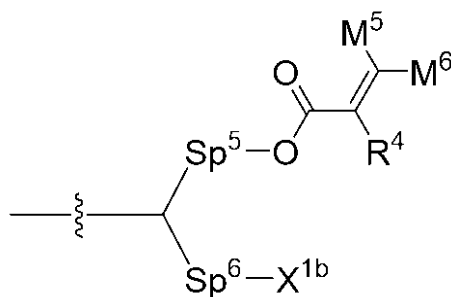
40

50

で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； P^1 は、式(1a)または式(1b)で表される重合性基であり；



(1a)



(1b)

式(1a)および式(1b)において、 Sp^2 、 Sp^3 、 Sp^4 、 Sp^5 、および Sp^6 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； M^1 、 M^2 、 M^3 、 M^4 、 M^5 、および M^6 は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり； R^3 は、水素、 $-Sp^4-X^{1a}$ 、または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； R^4 は、水素または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； X^{1a} および X^{1b} は、 $-OR^5$ 、 $-N(R^5)_2$ 、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^5)_3$ であり、ここで、 R^5 は水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【0024】

項2. 第一成分として式(1-1)から式(1-14)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1に記載の液晶組成物。

10

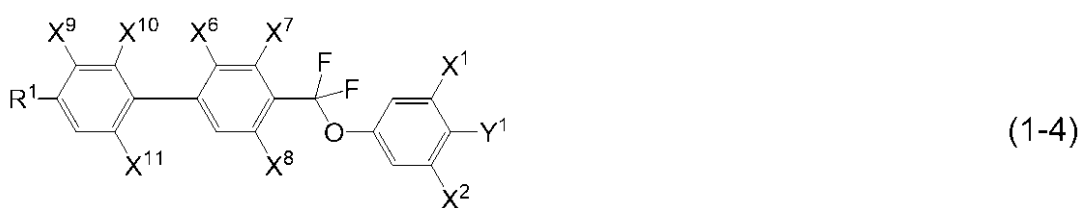
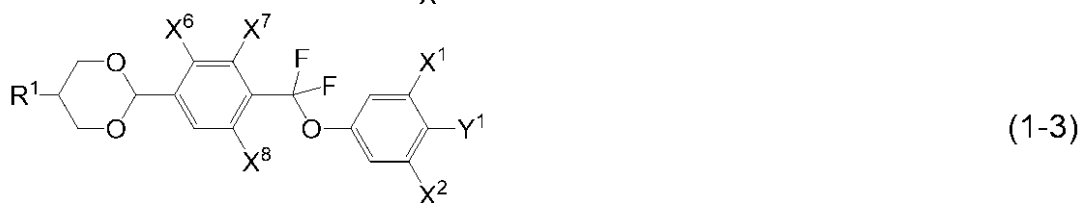
20

30

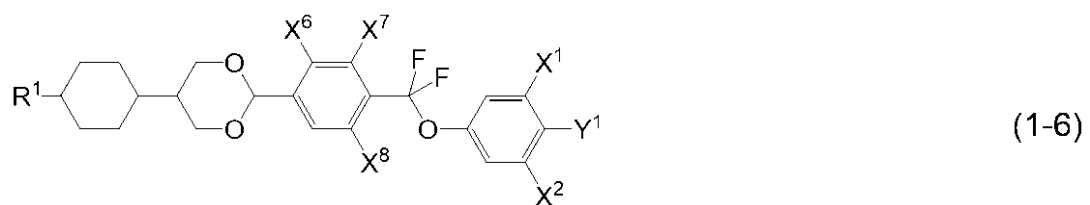
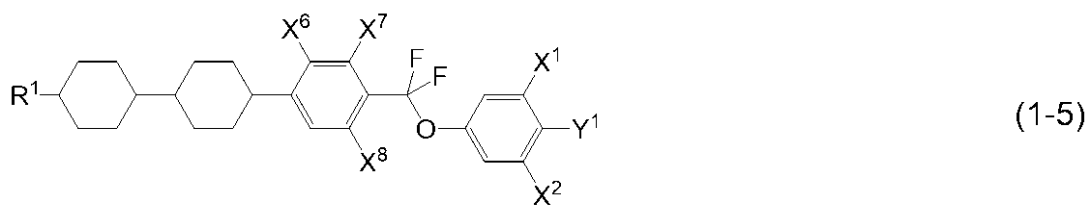
40



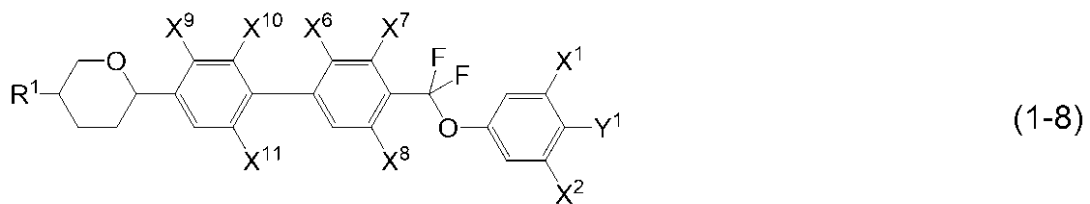
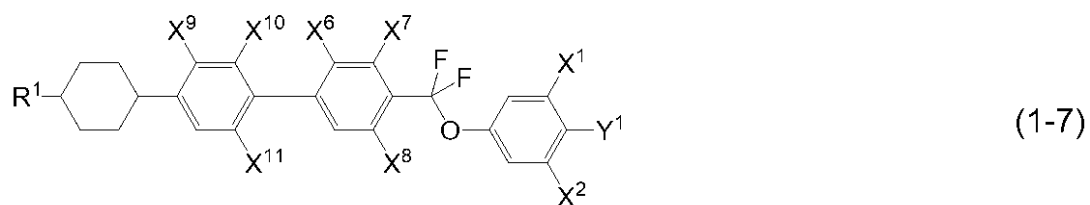
10



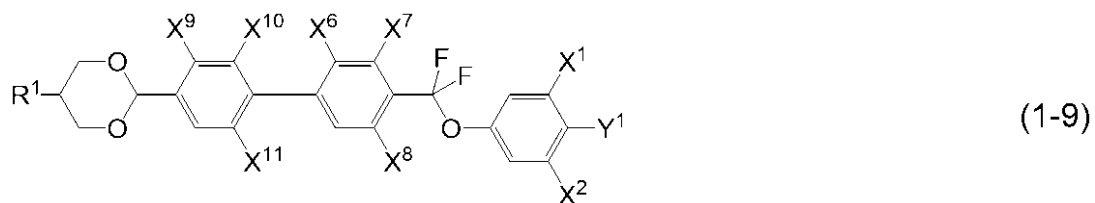
20

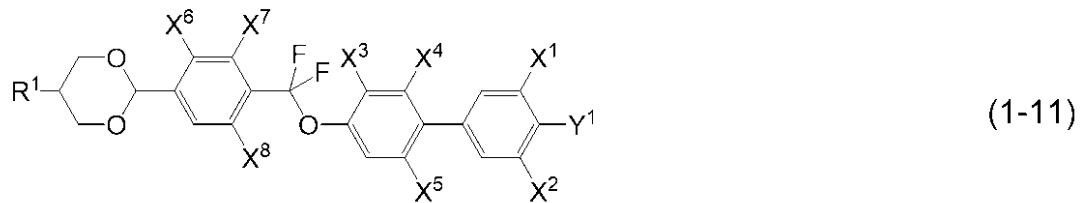
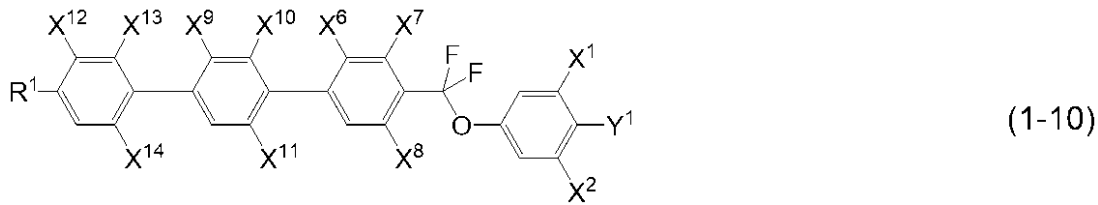


30

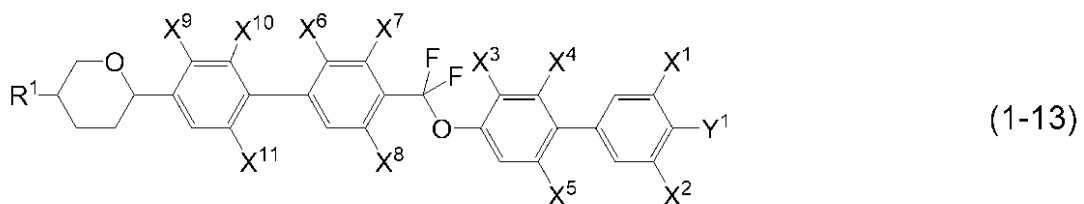
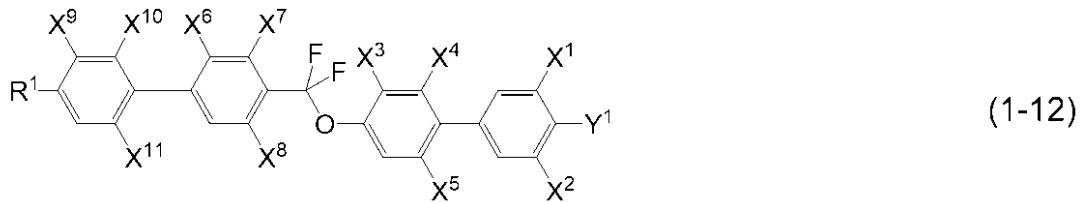


40

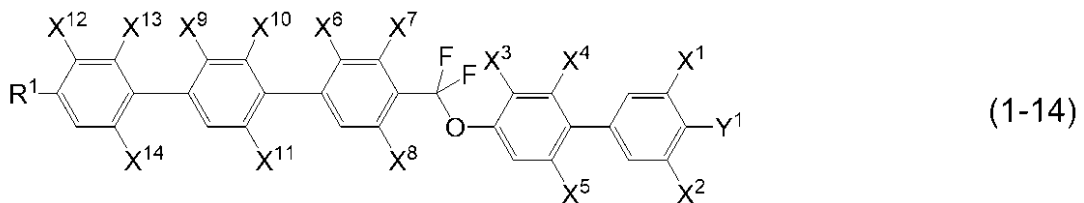




10



20



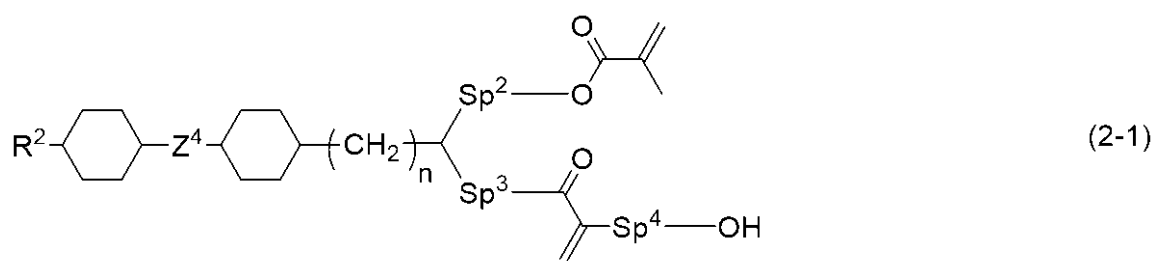
30

式(1-1)から式(1-14)において、R¹は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；X¹、X²、X³、X⁴、X⁵、X⁶、X⁷、X⁸、X⁹、X¹⁰、X¹¹、X¹²、X¹³、およびX¹⁴は、水素またはフッ素であり；Y¹は、フッ素、塩素、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルオキシである。

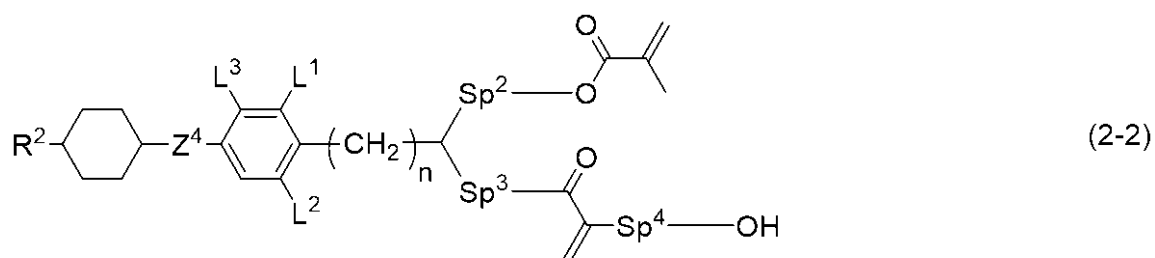
【0025】

項3. 第一添加物として式(2-1)から式(2-57)で表される極性化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1または2に記載の液晶組成物。

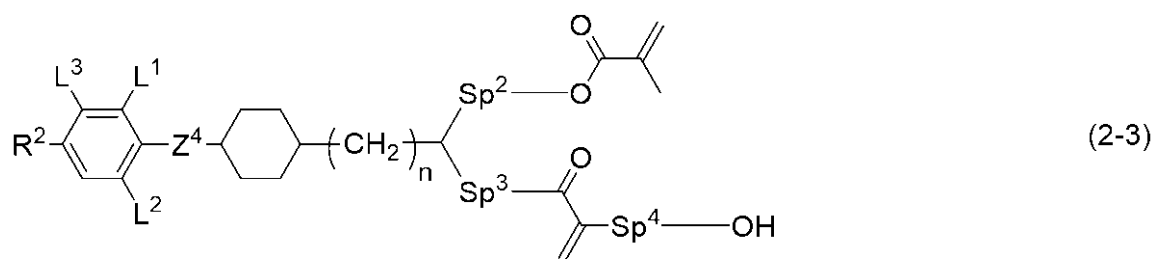
40



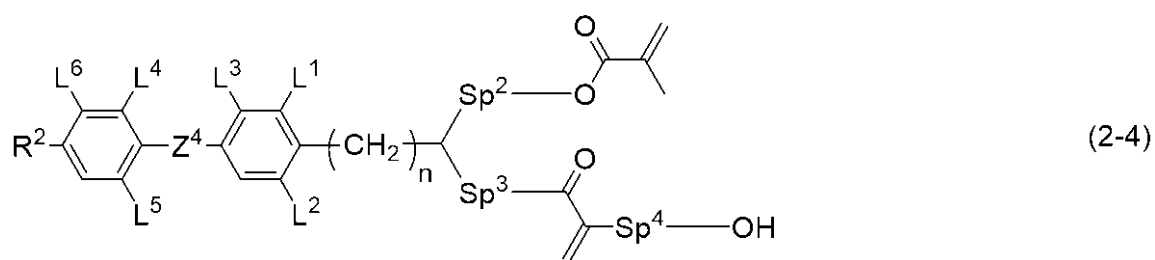
10



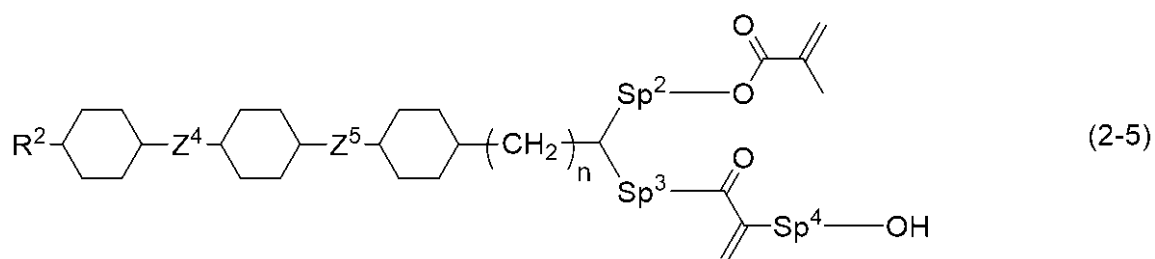
20

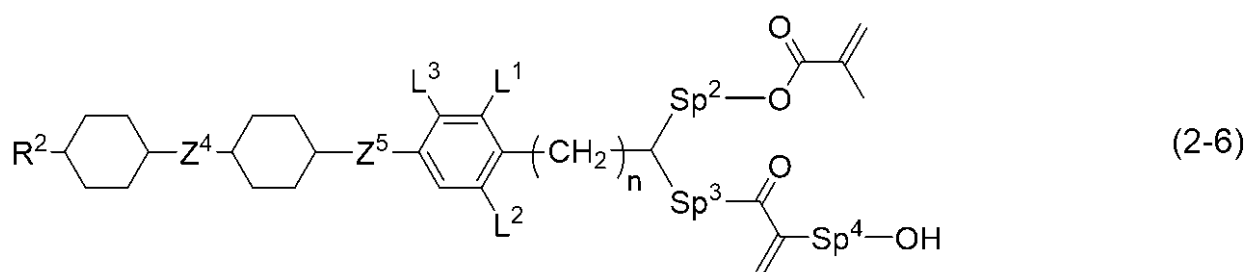


30

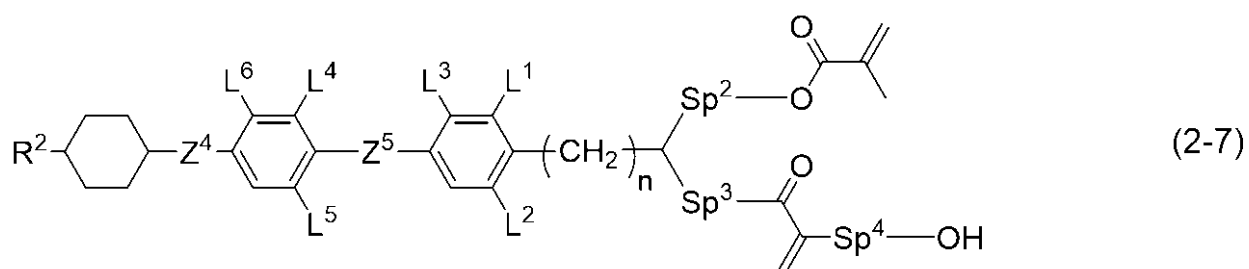


40

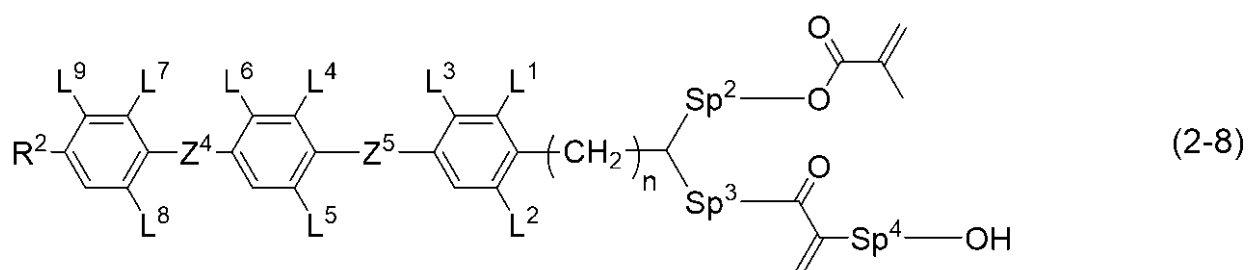




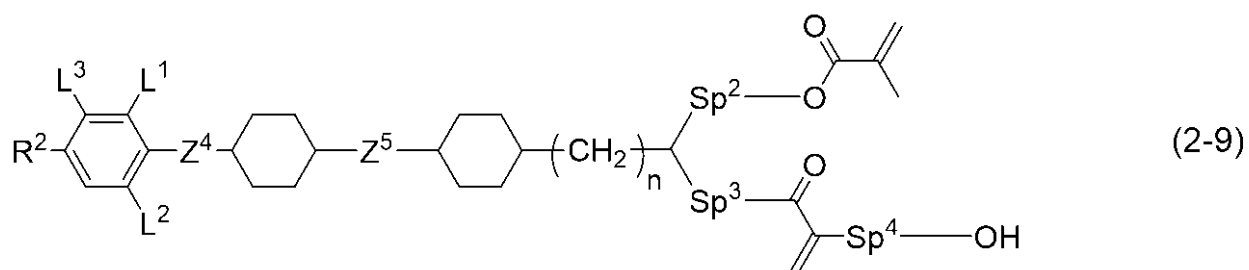
10



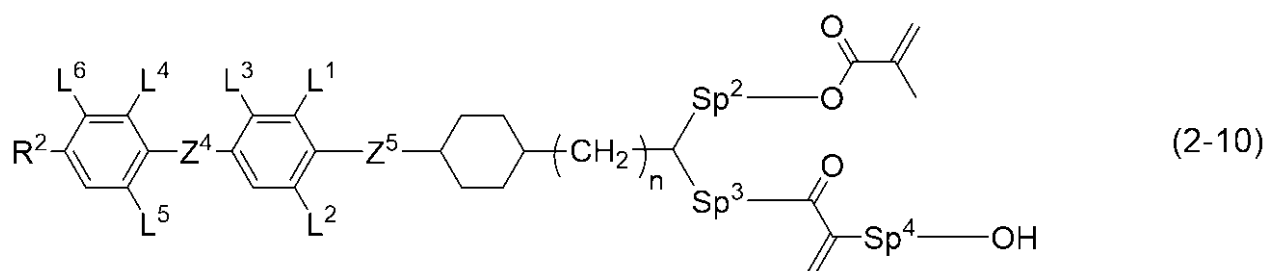
20

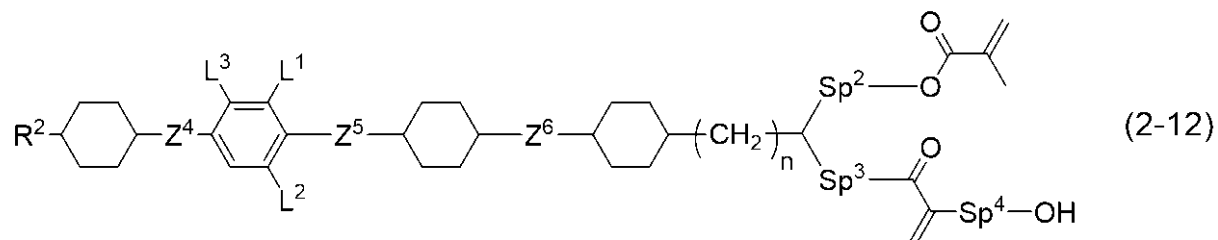
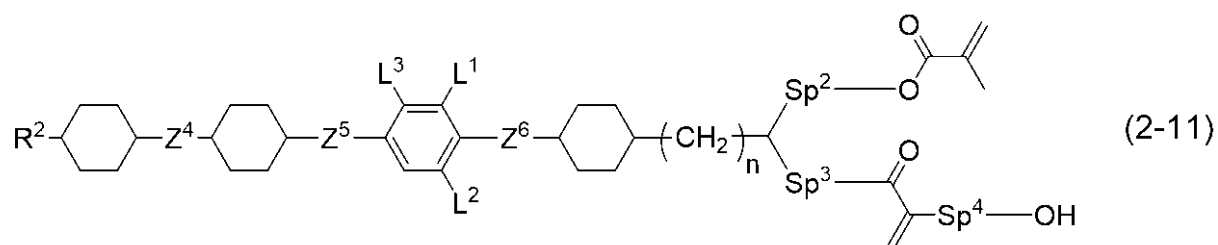


30

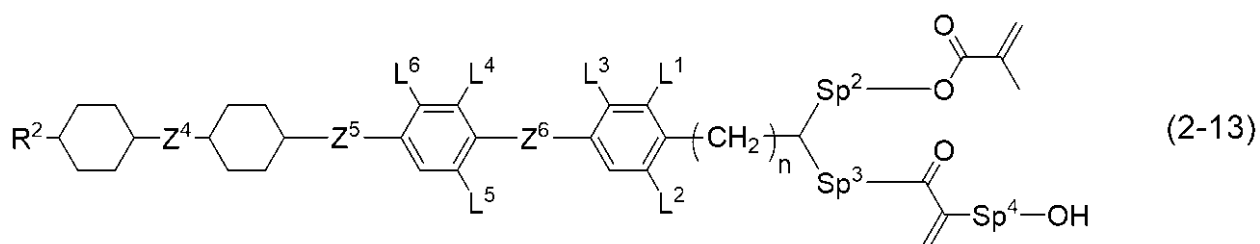


40

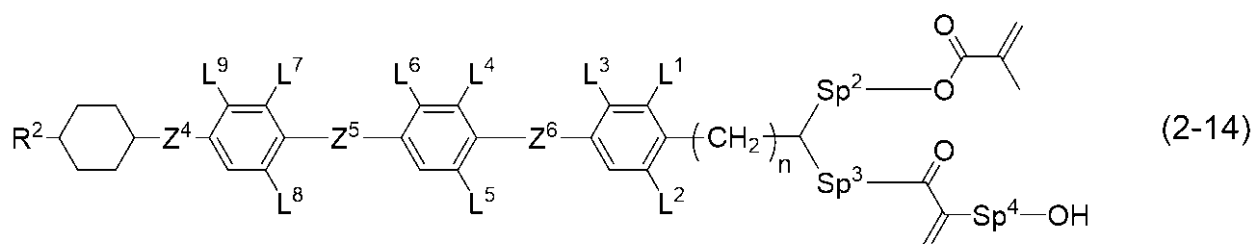




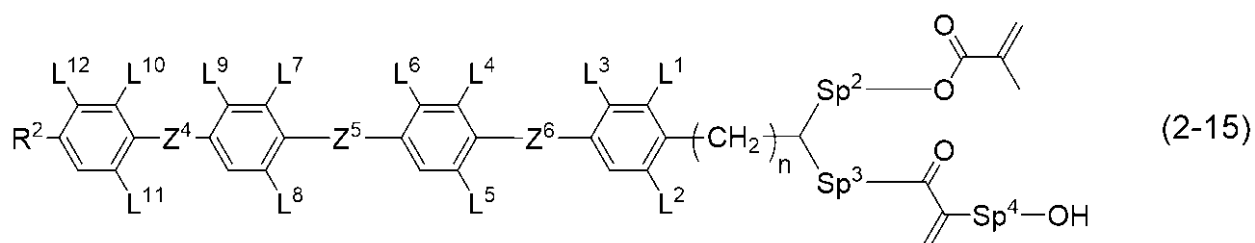
10



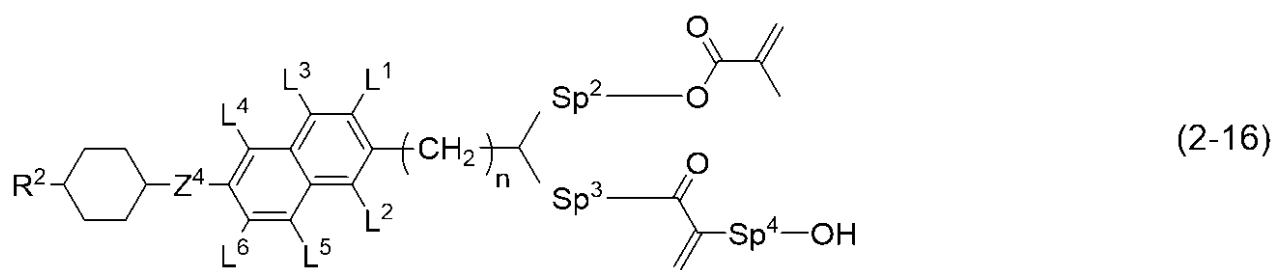
20



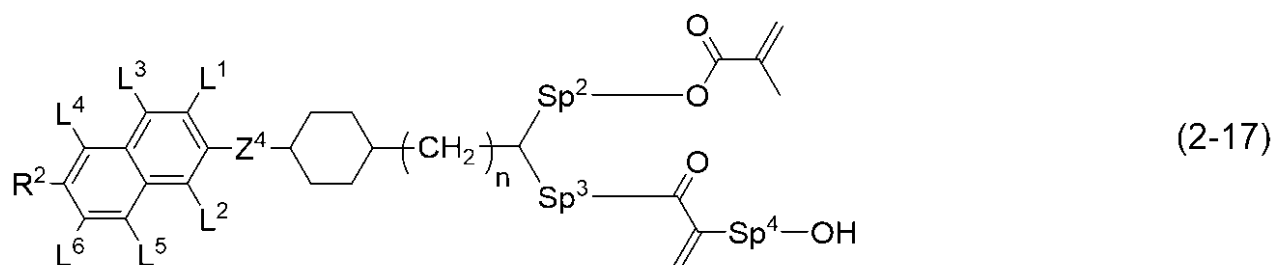
30



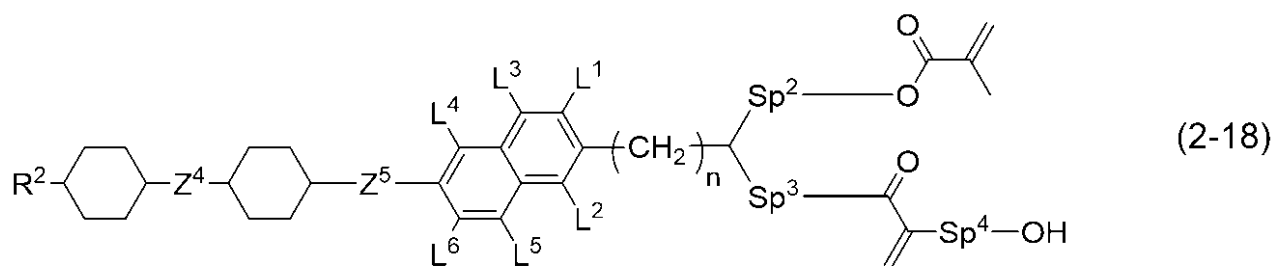
40



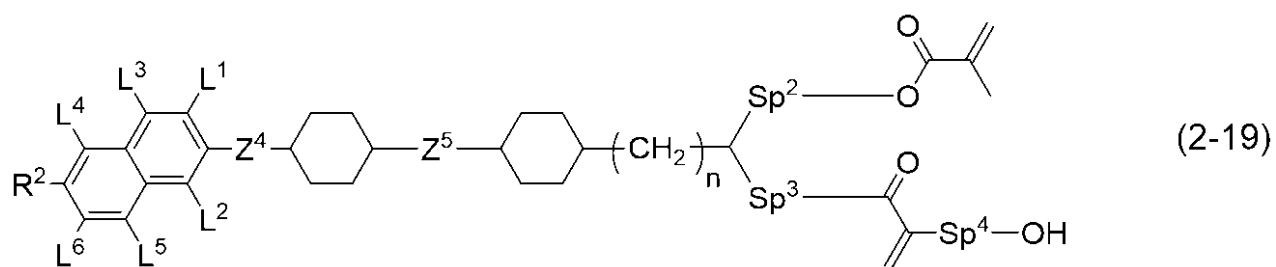
10

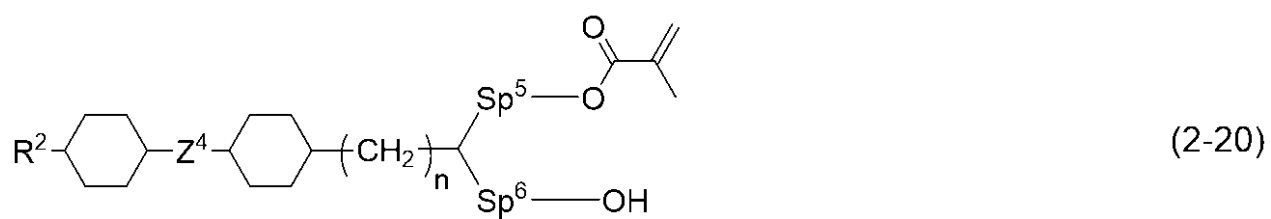


20

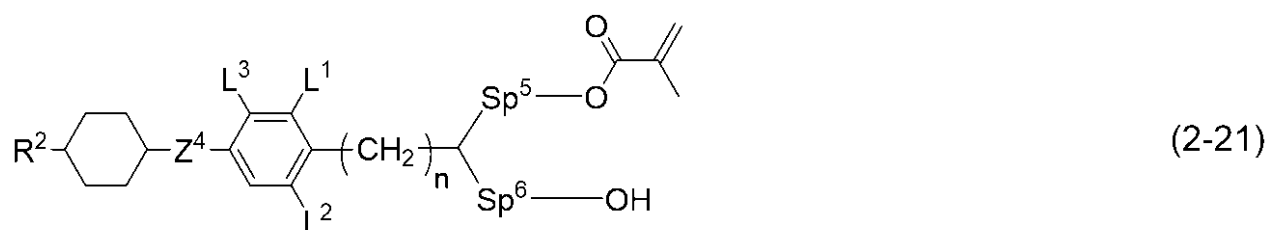


30

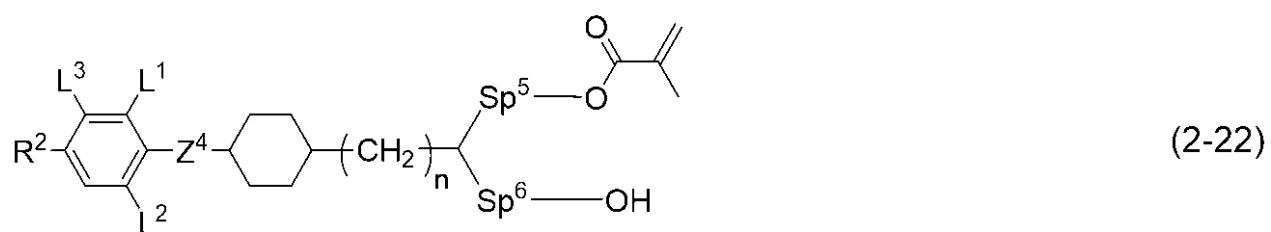




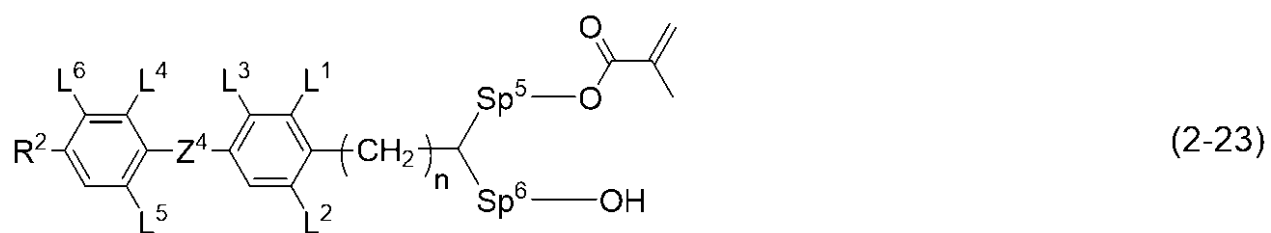
10



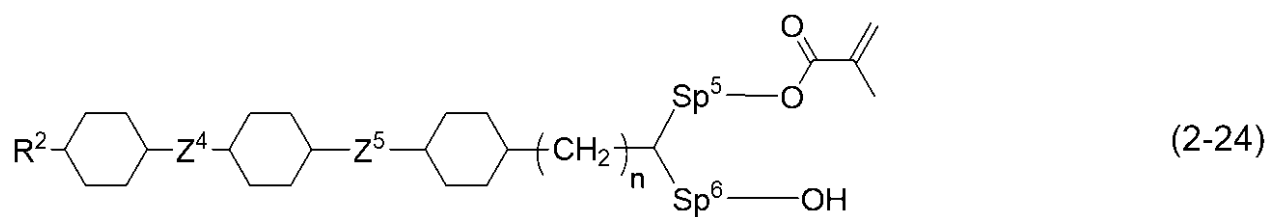
20

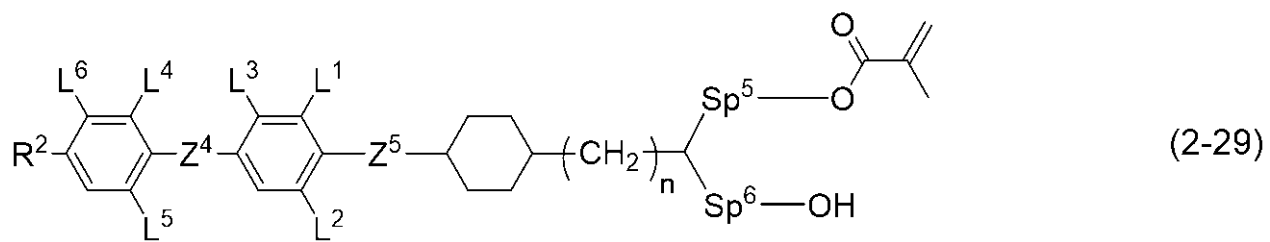
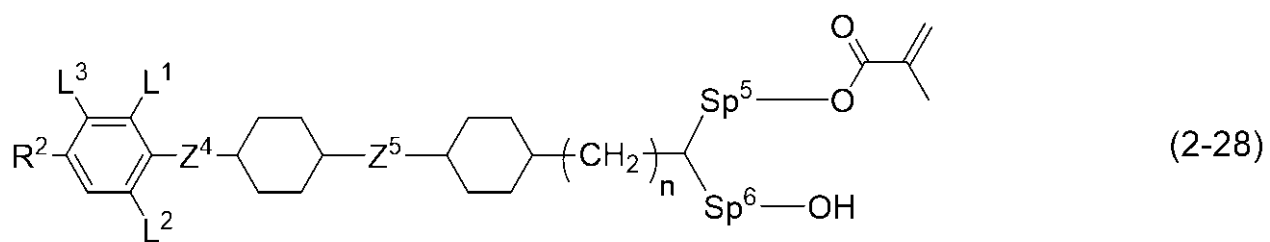
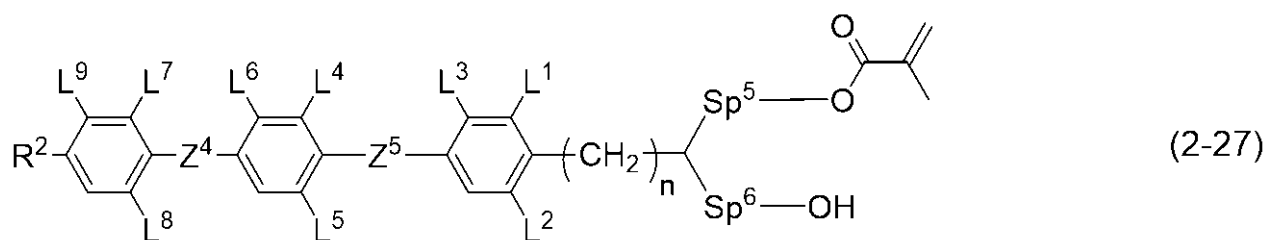
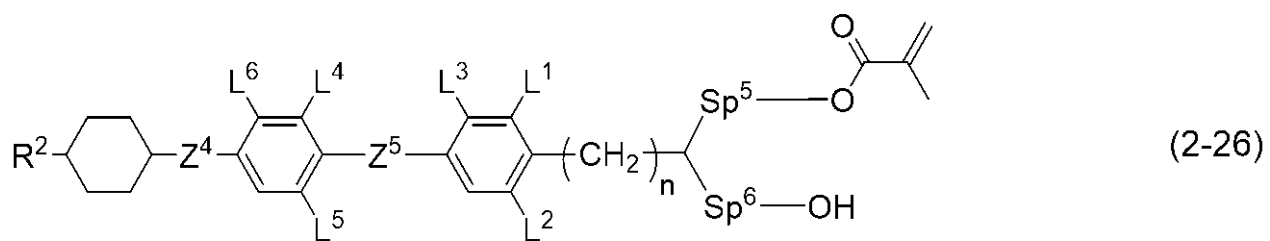
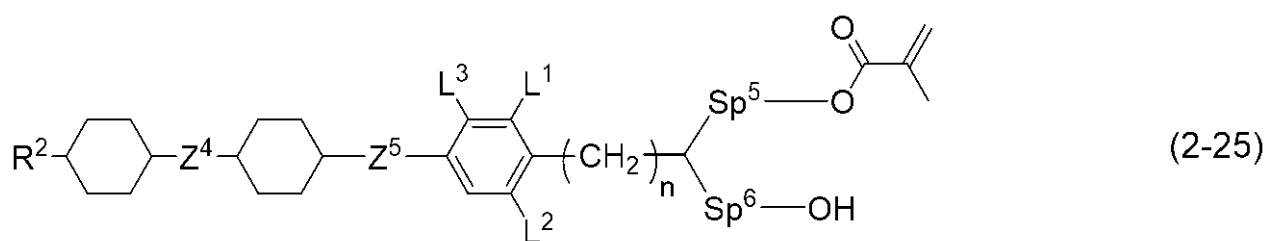


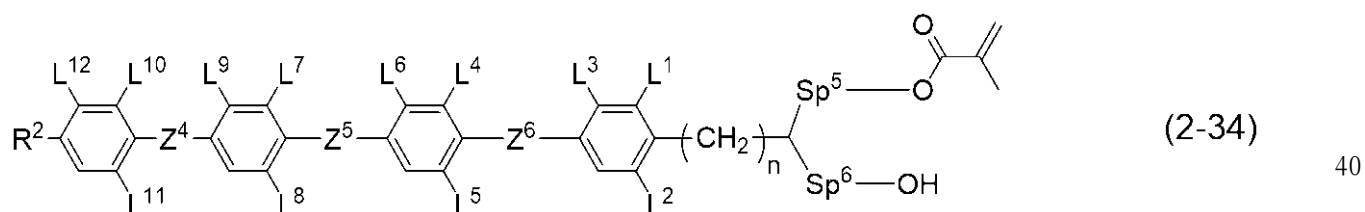
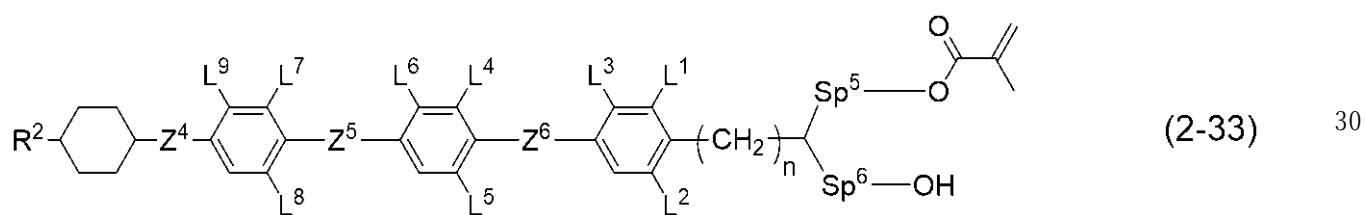
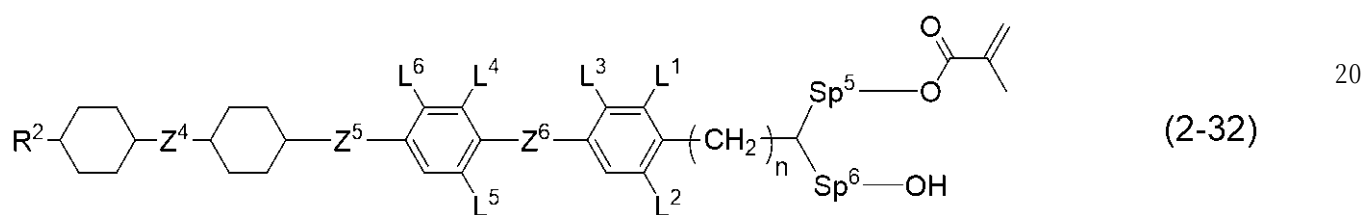
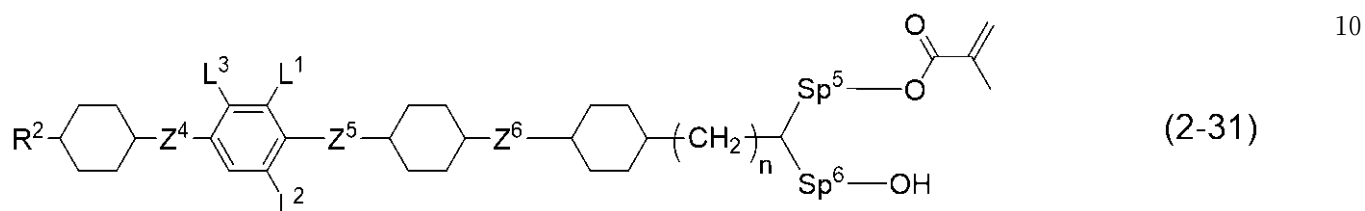
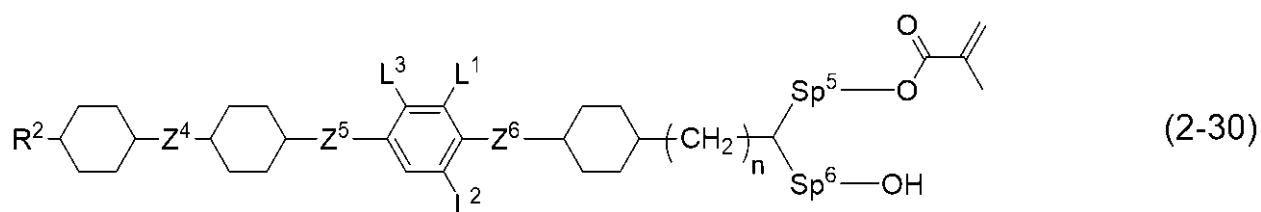
30

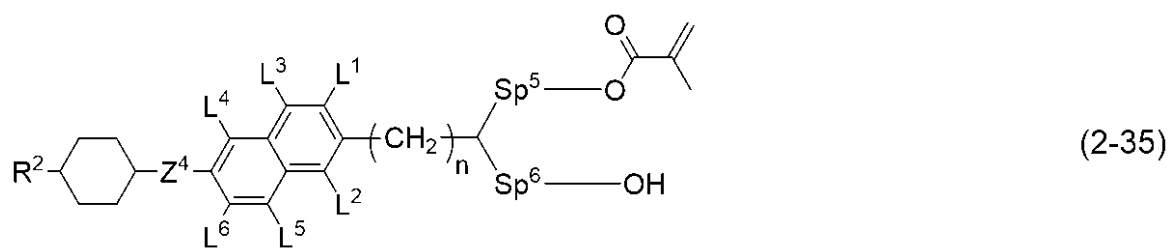


40

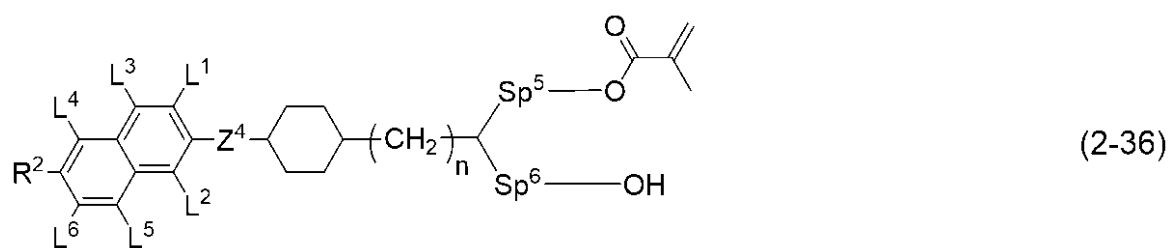




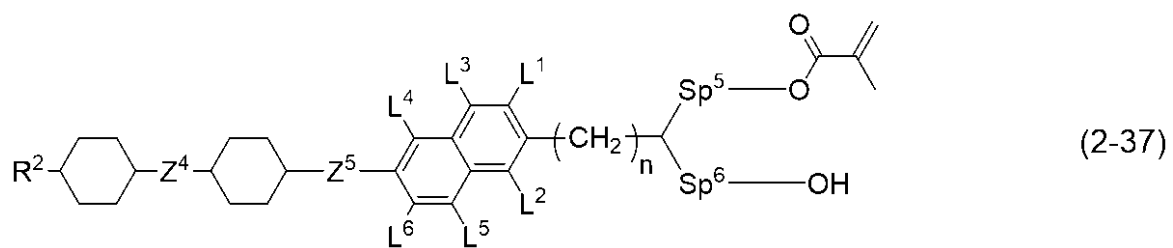




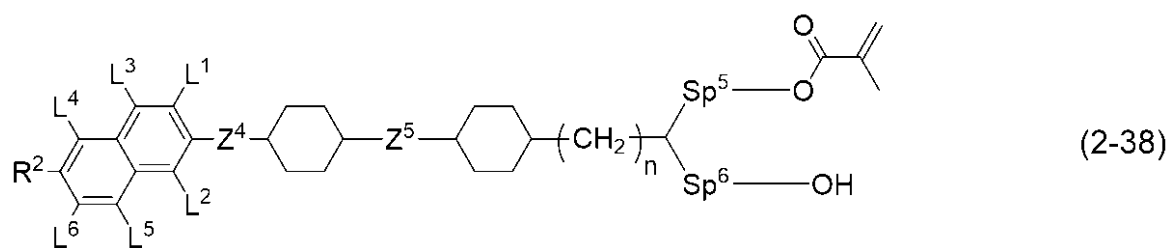
10

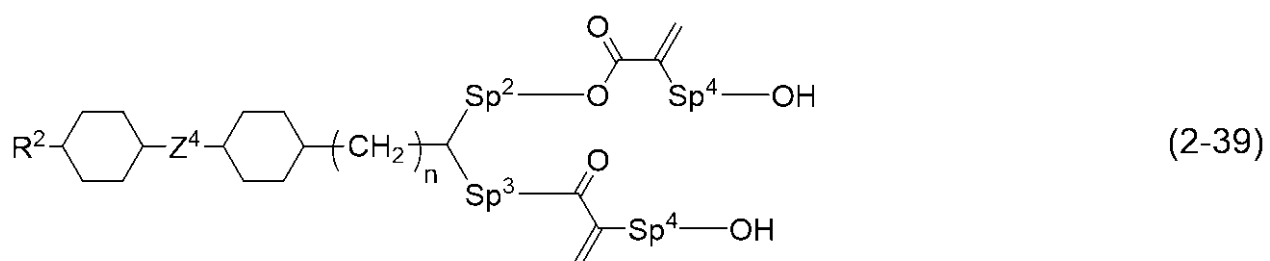


20

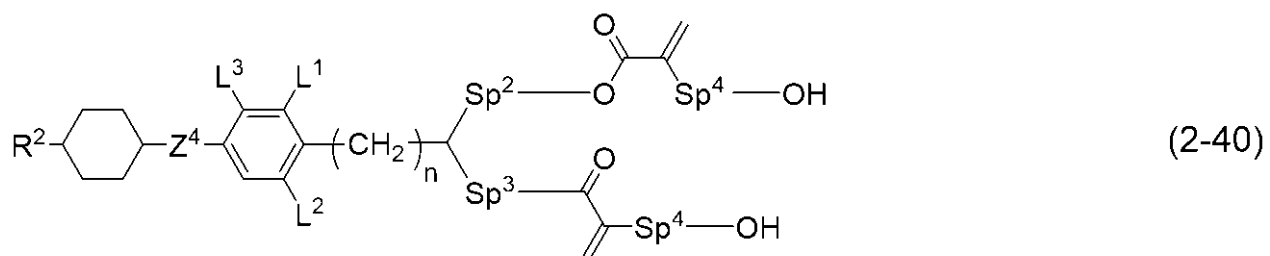


30

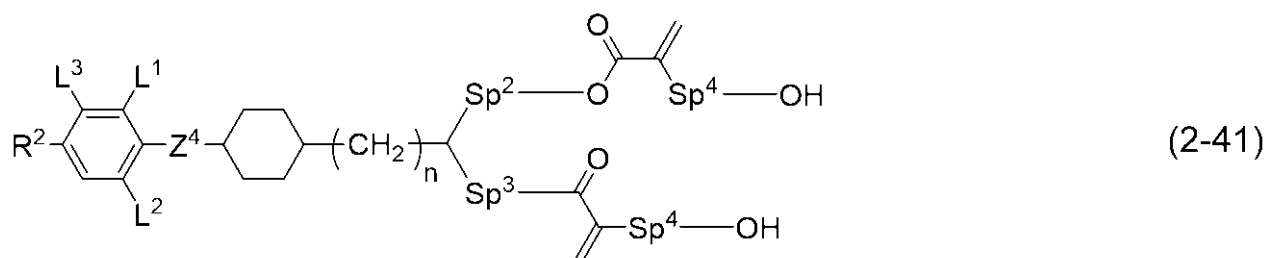




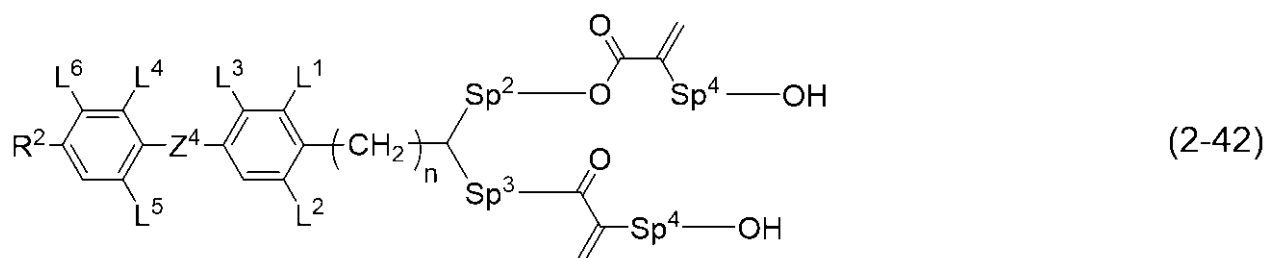
10



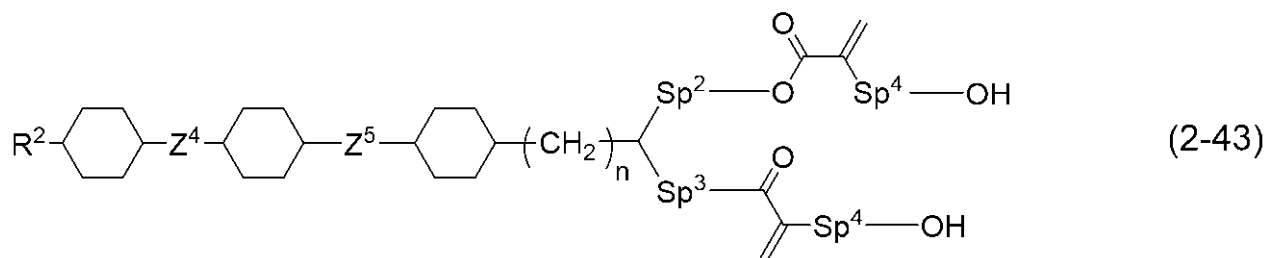
20

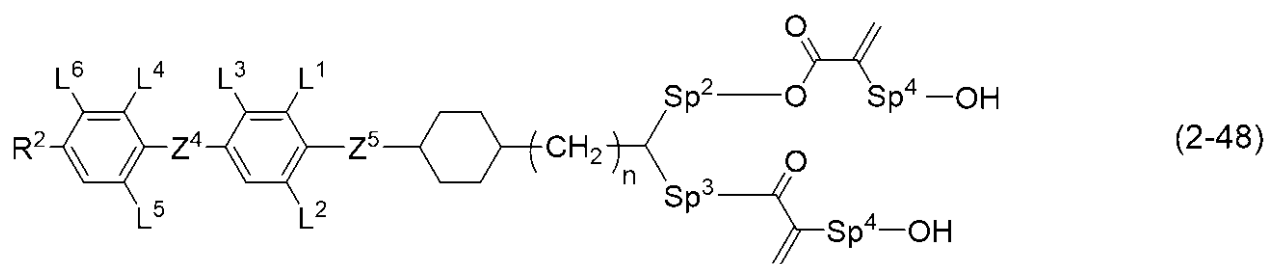
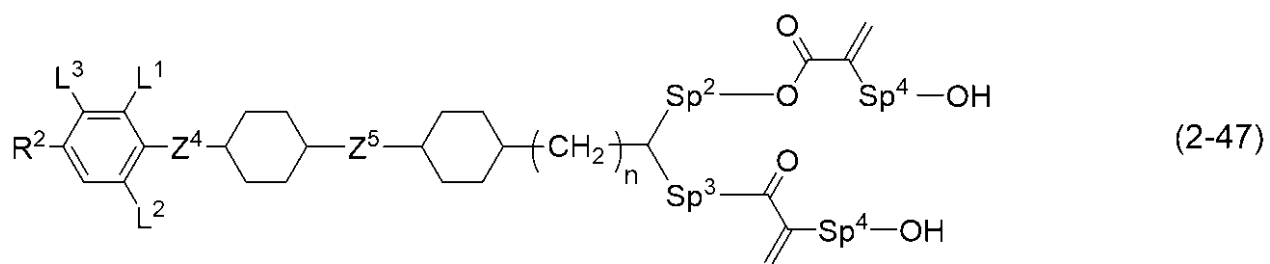
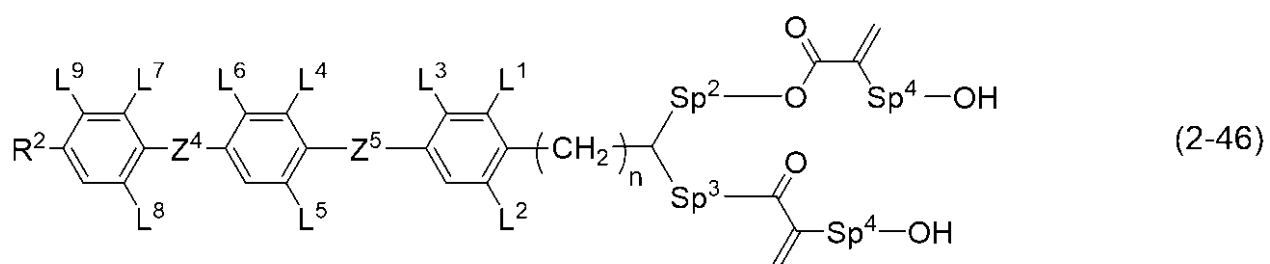
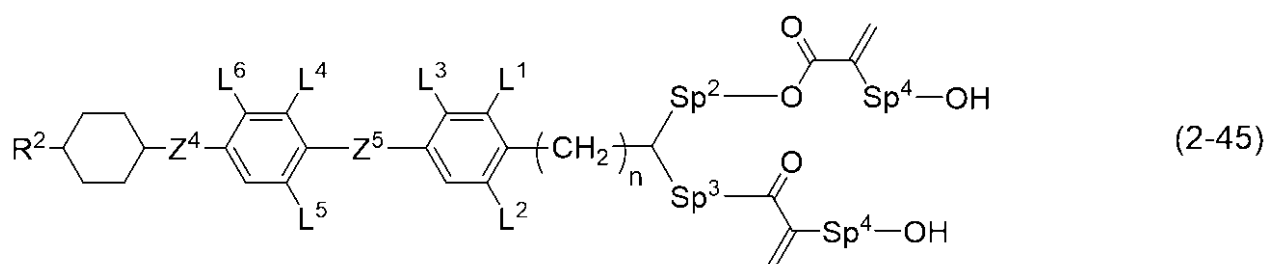
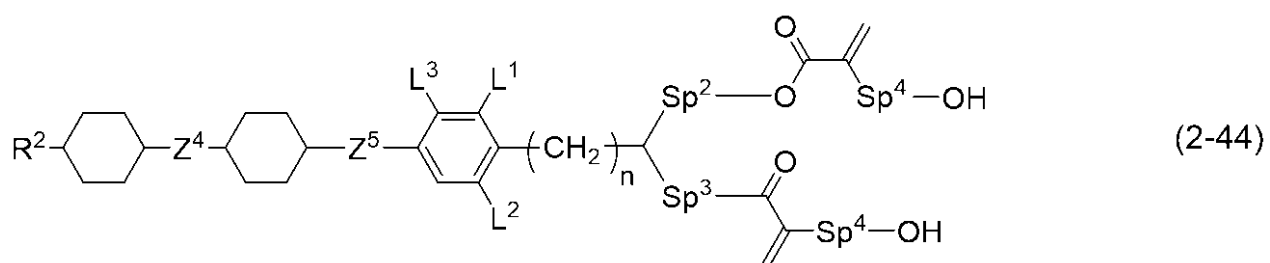


30



40



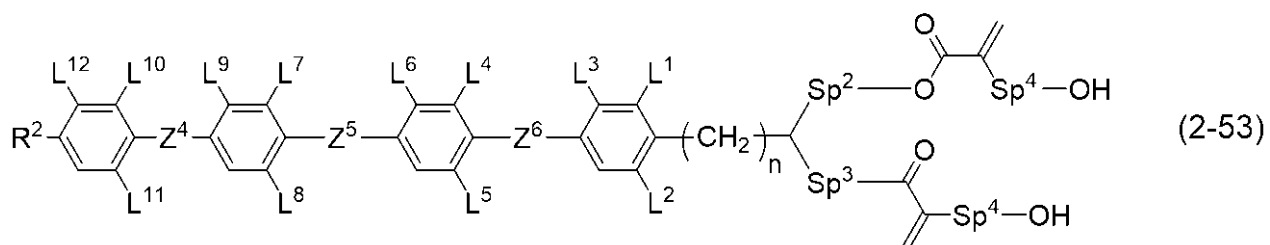
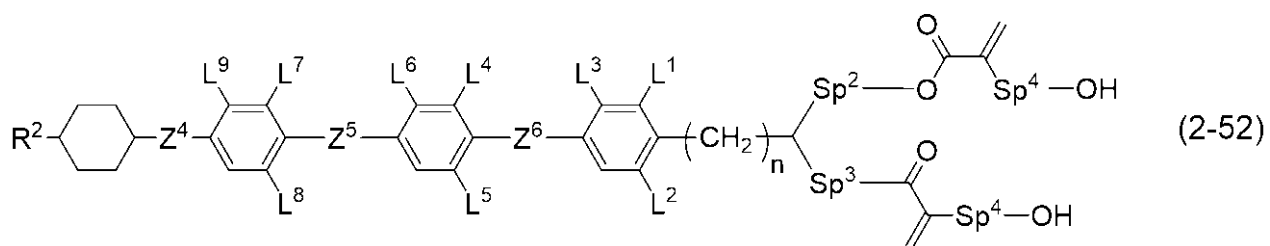
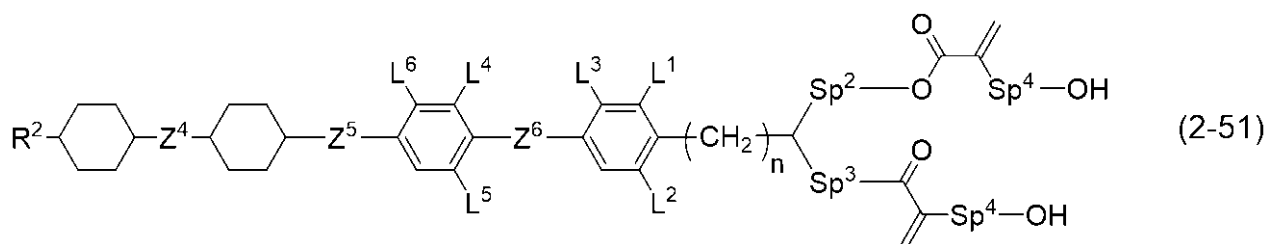
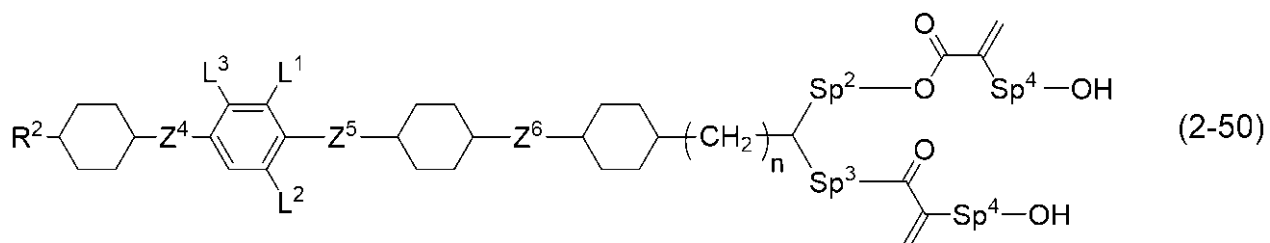
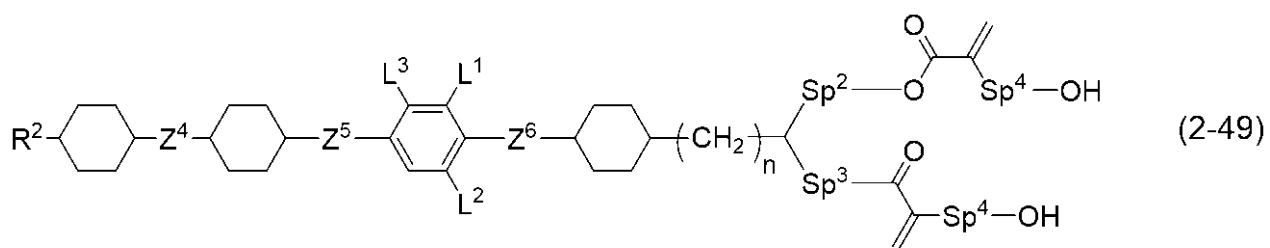


10

20

30

40

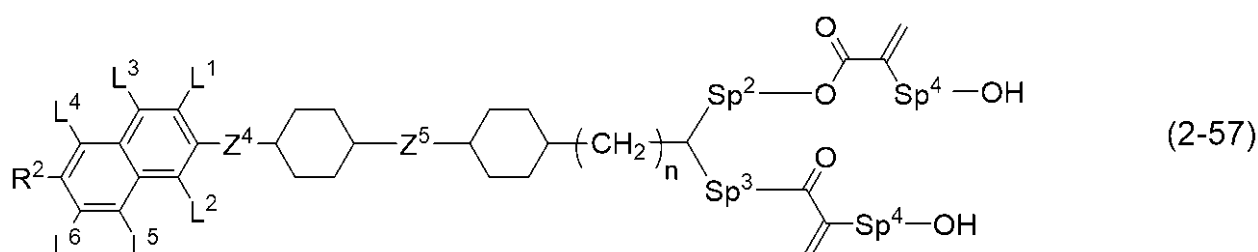
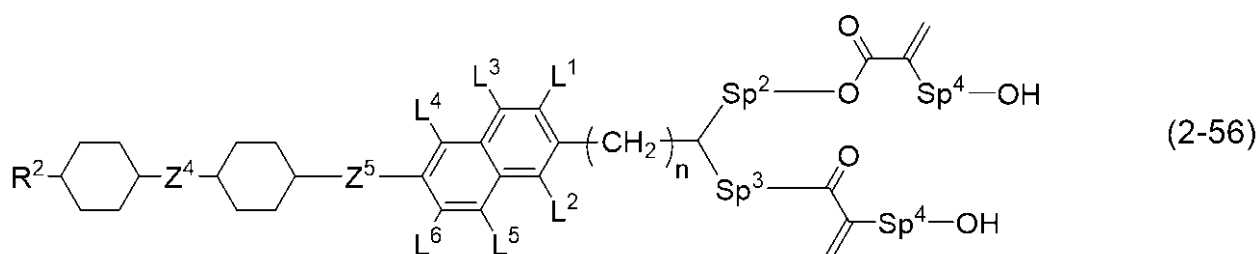
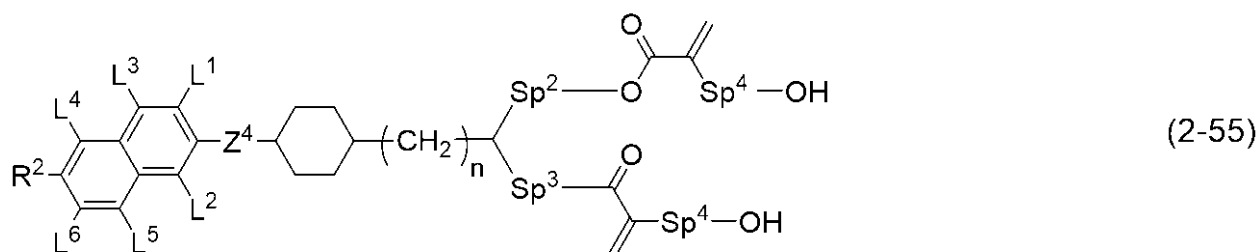
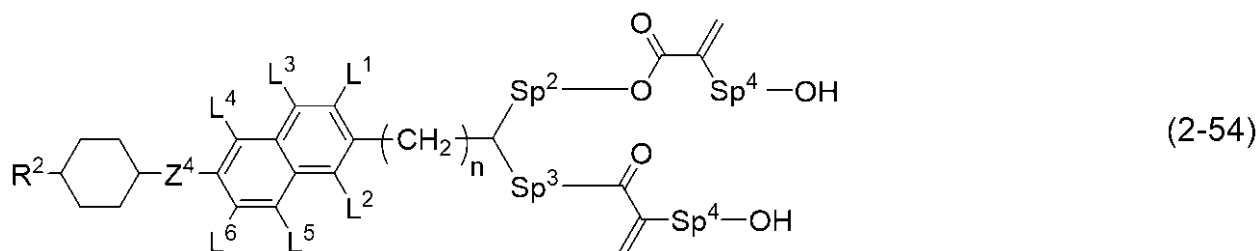


10

20

30

40



式(2-1)から式(2-57)において、 R^2 は、炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； Z^4 、 Z^5 、および Z^6 は、単結合、エチレン、ブチレン、ビニレン、メチレンオキシ、またはジフルオロメチレンオキシであり； Sp^2 、 Sp^3 、 Sp^4 、 Sp^5 、および Sp^6 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、 L^{10} 、 L^{11} 、および L^{12} は、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり； n は、0、1、2、3、4、5、または6である。

【0026】

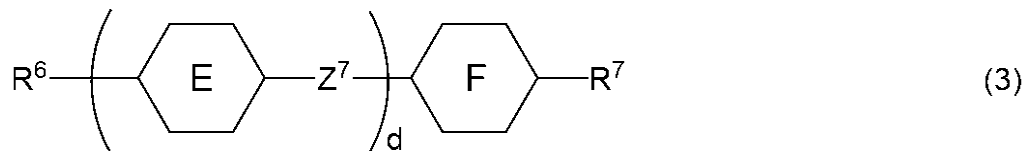
項4. 第一成分の割合が5質量%から55質量%の範囲である、項1から3のいずれか1項に記載の液晶組成物。

【0027】

項5. 第一添加物の割合が0.05質量%から10質量%の範囲である、項1から4のいずれか1項に記載の液晶組成物。

【0028】

項6. 第二成分として式(3)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から5のいずれか1項に記載の液晶組成物。



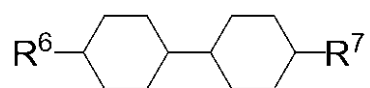
10

式(3)において、R⁶およびR⁷は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり；環Eおよび環Fは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレンであり；Z⁷は、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり；dは、1、2、または3である。

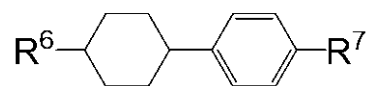
20

【0029】

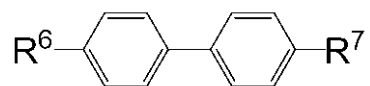
項7. 第二成分として式(3-1)から式(3-13)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から6のいずれか1項に記載の液晶組成物。



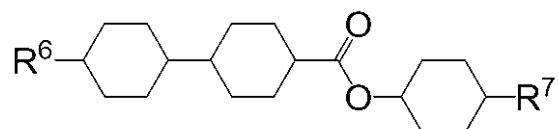
(3-1)



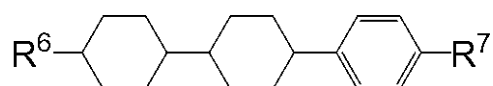
(3-2)



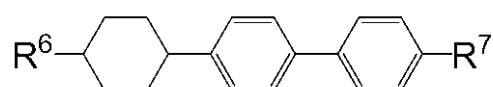
(3-3)



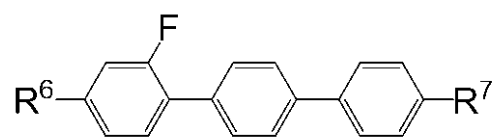
(3-4)



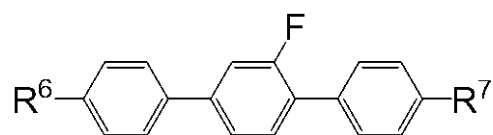
(3-5)



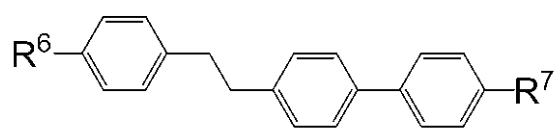
(3-6)



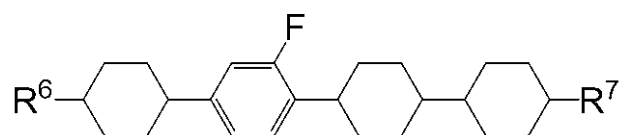
(3-7)



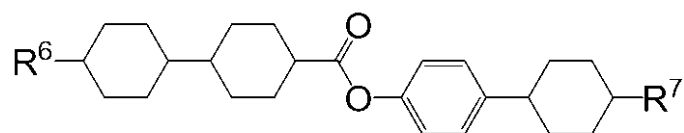
(3-8)



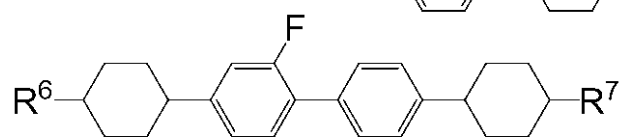
(3-9)



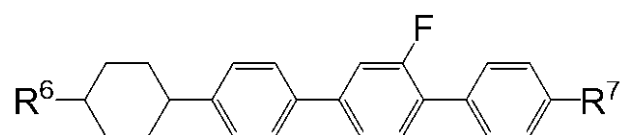
(3-10)



(3-11)



(3-12)



(3-13)

10

20

30

40

50

式(3-1)から式(3-13)において、 R^6 および R^7 は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルである。

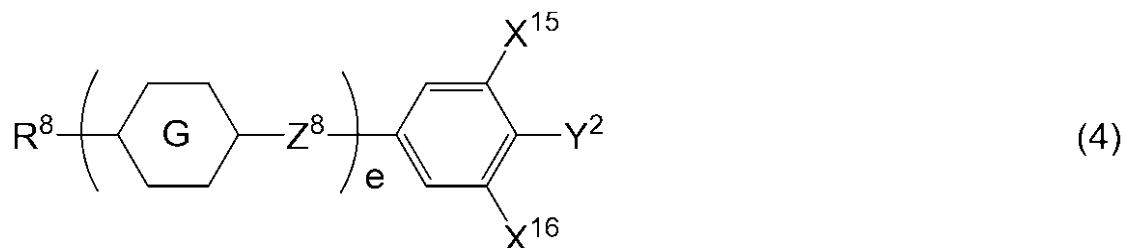
【0030】

項8. 第二成分の割合が10質量%から90質量%の範囲である、項6または7に記載の液晶組成物。

【0031】

項9. 第三成分として式(4)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から8のいずれか1項に記載の液晶組成物。

10



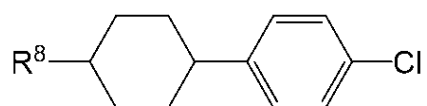
式(4)において、 R^8 は炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；環Gは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2,6-ジフルオロ-1,4-フェニレン、ピリミジン-2,5-ジイル、1,3-ジオキササン-2,5-ジイル、またはテトラヒドロピラン-2,5-ジイルであり； Z^8 は、単結合、エチレン、またはカルボニルオキシであり； X^{15} および X^{16} は、水素またはフッ素であり； Y^2 は、フッ素、塩素、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルオキシであり；eは、1、2、3、または4である。

20

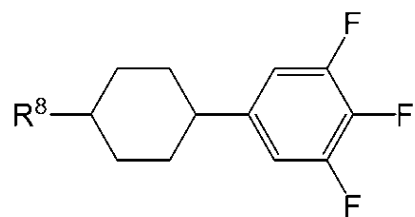
【0032】

項10. 第三成分として式(4-1)から式(4-16)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から9のいずれか1項に記載の液晶組成物。

30

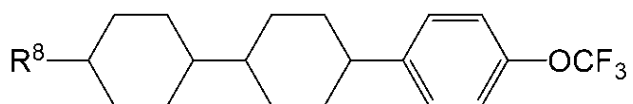


(4-1)

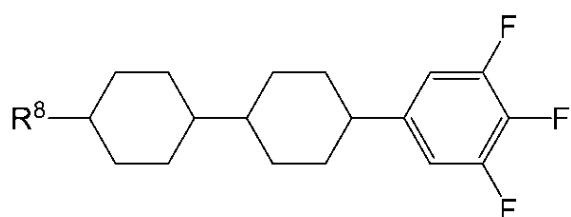


(4-2)

10

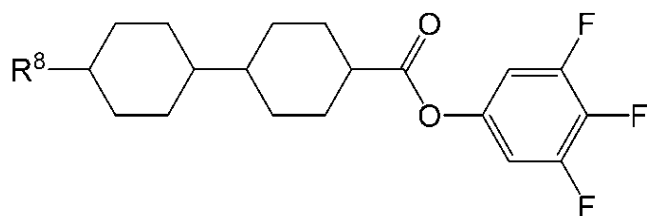


(4-3)



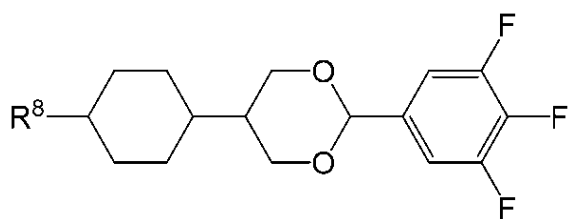
(4-4)

20

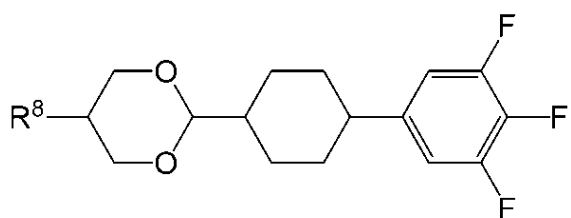


(4-5)

30

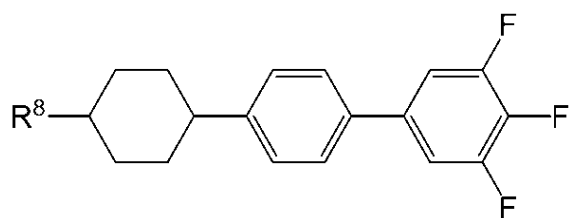


(4-6)



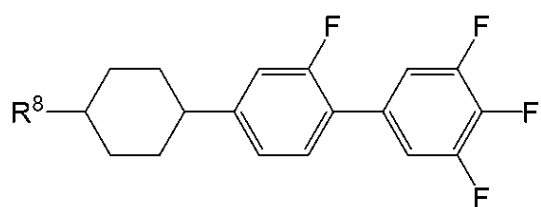
(4-7)

40

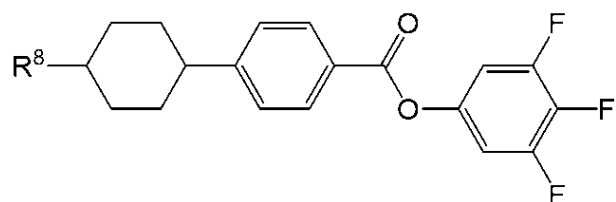


(4-8)

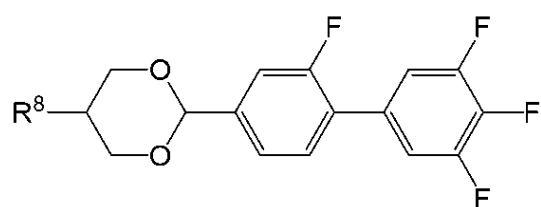
50



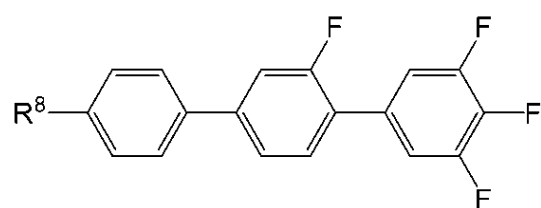
(4-9)



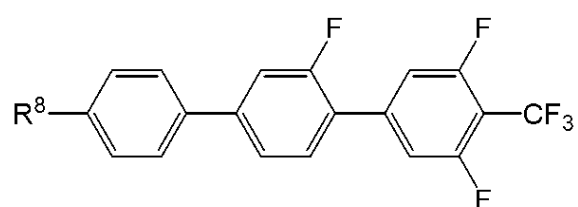
(4-10)



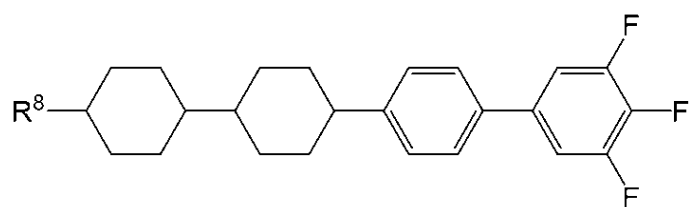
(4-11)



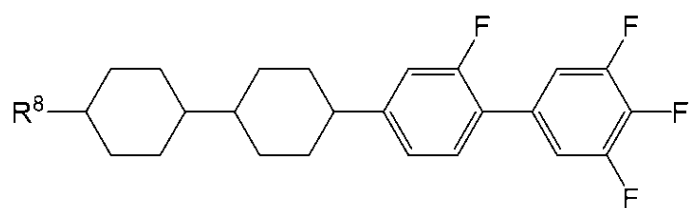
(4-12)



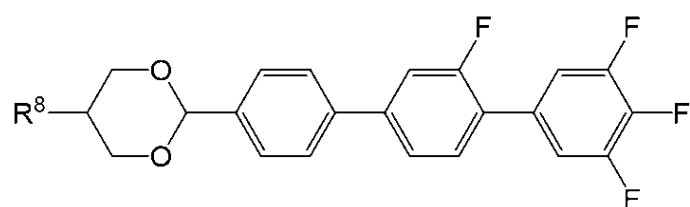
(4-13)



(4-14)



(4-15)



(4-16)

10

20

30

40

50

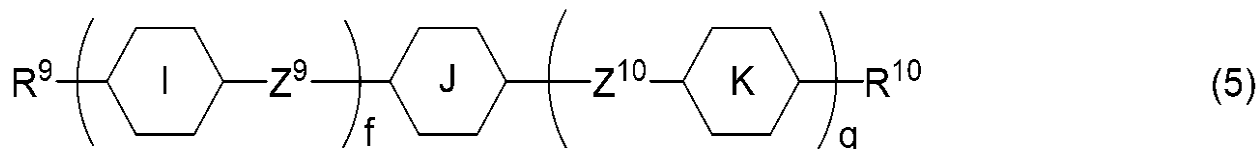
式(4-1)から式(4-16)において、 R^8 は、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

【0033】

項11. 第三成分の割合が5質量%から50質量%の範囲である、項9または10に記載の液晶組成物。

【0034】

項12. 第四成分として式(5)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から11のいずれか1項に記載の液晶組成物。



10

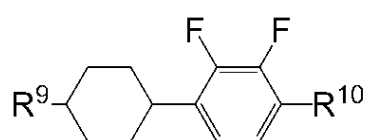
式(5)において、 R^9 および R^{10} は、水素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシであり；環Iおよび環Kは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたナフタレン-2,6-ジイル、クロマン-2,6-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたクロマン-2,6-ジイルであり；環Jは、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2-クロロ-3-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-5-メチル-1,4-フェニレン、3,4,5-トリフルオロナフタレン-2,6-ジイル、7,8-ジフルオロクロマン-2,6-ジイル、3,4,5,6-テトラフルオロフルオレン-2,7-ジイル、4,6-ジフルオロジベンゾフラン-3,7-ジイル、または1,1,6,7-テトラフルオロインダン-2,5-ジイルであり； Z^9 および Z^{10} は、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり；fは、1、2、または3であり、gは、0または1であり、そしてfとgとの和は3以下である。

20

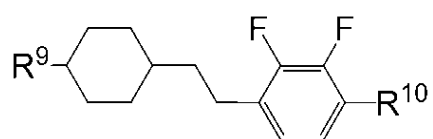
【0035】

項13. 第四成分として式(5-1)から式(5-33)で表される化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から12のいずれか1項に記載の液晶組成物。

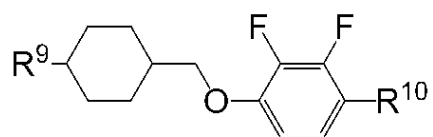
30



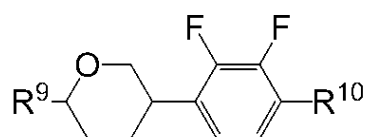
(5-1)



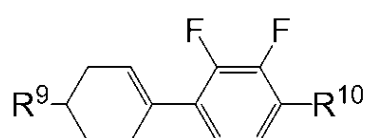
(5-2)



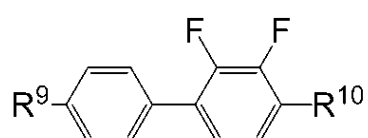
(5-3)



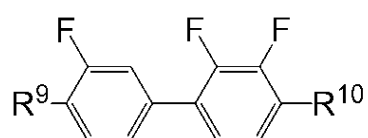
(5-4)



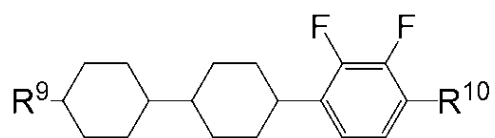
(5-5)



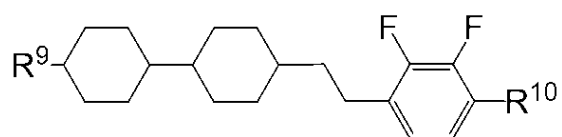
(5-6)



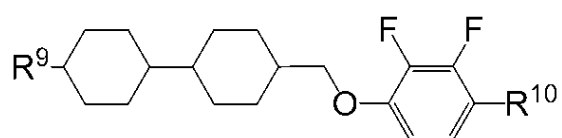
(5-7)



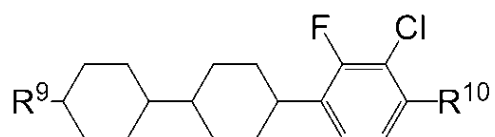
(5-8)



(5-9)



(5-10)



(5-11)

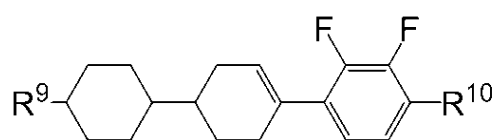
10

20

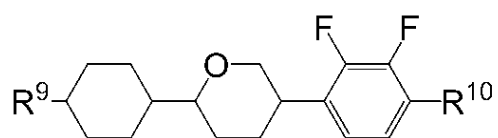
30

40

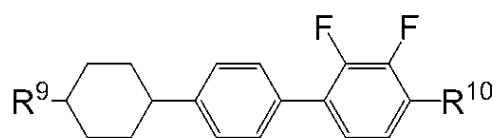
50



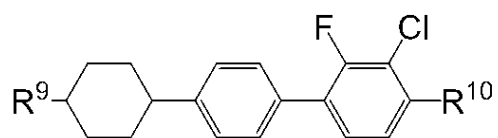
(5-12)



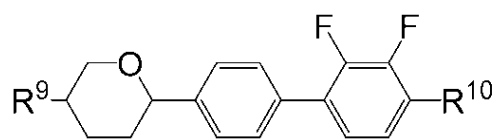
(5-13)



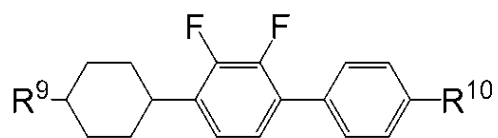
(5-14)



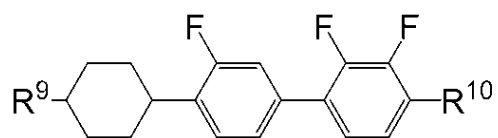
(5-15)



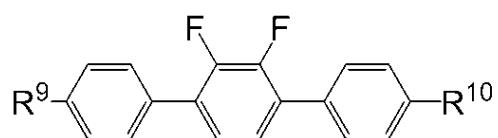
(5-16)



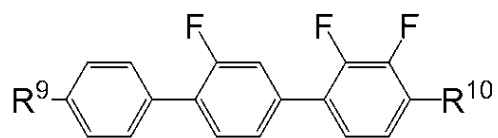
(5-17)



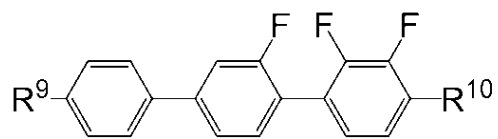
(5-18)



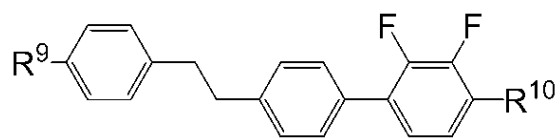
(5-19)



(5-20)



(5-21)



(5-22)

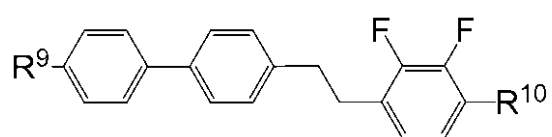
10

20

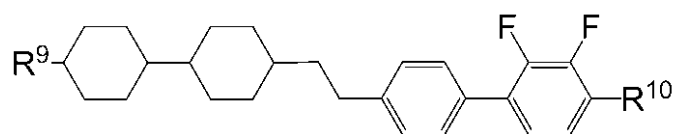
30

40

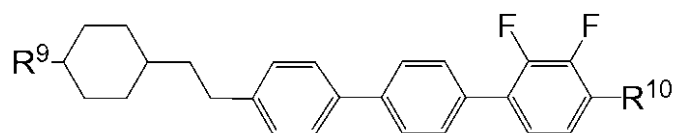
50



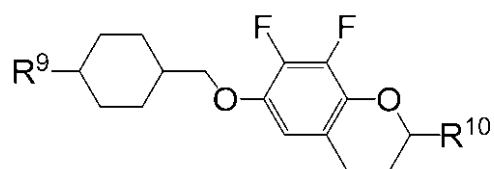
(5-23)



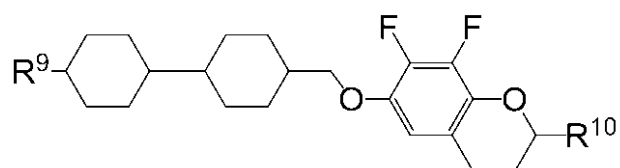
(5-24)



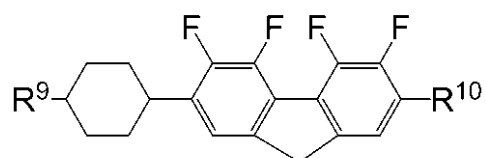
(5-25)



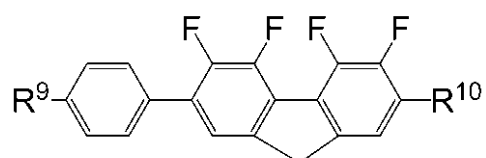
(5-26)



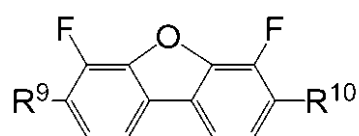
(5-27)



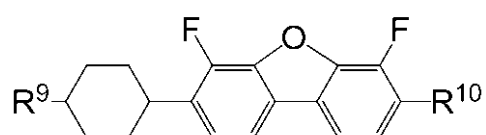
(5-28)



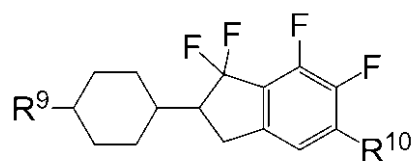
(5-29)



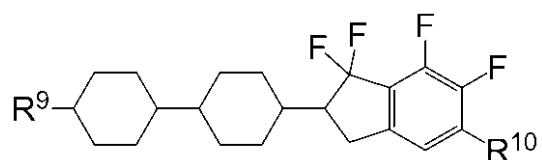
(5-30)



(5-31)



(5-32)



(5-33)

10

20

30

40

50

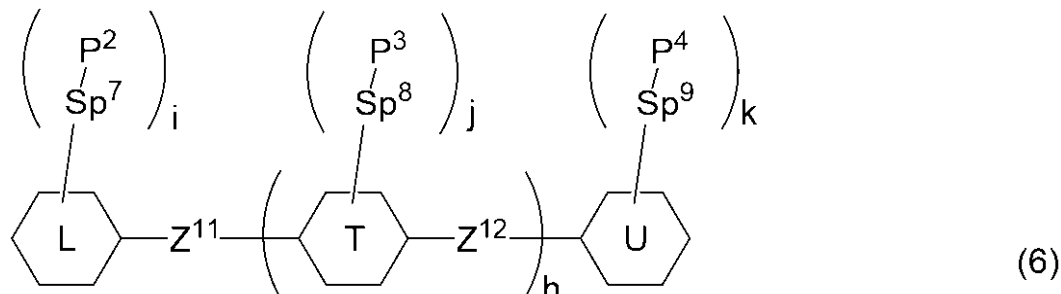
式(5-1)から式(5-33)において、 R^9 および R^{10} は、水素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または炭素数2から12のアルケニルオキシである。

【0036】

項14. 第四成分の割合が3質量%から40質量%の範囲である、項12または13に記載の液晶組成物。

【0037】

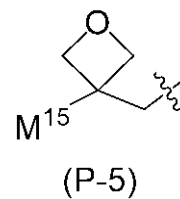
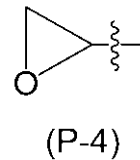
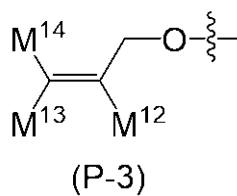
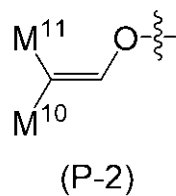
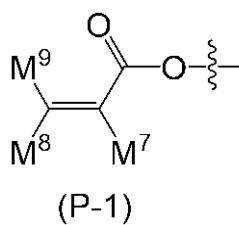
項15. 第二添加物として式(6)で表される重合性化合物から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(6)において、環Lおよび環Uは、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1,3-ジオキサソ-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；環Tは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく； Z^{11} および Z^{12} は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ 、 $-C(CH_3)=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)-$ 、または $-C(CH_3)=C(CH_3)-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく； P^2 、 P^3 、および P^4 は、項1に記載の式(1a)および(1b)で表される重合性基とは異なる重合性基であり； Sp^7 、 Sp^8 、および Sp^9 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；hは0、1、または2であり；i、j、およびkは、0、1、2、3、または4であり、そしてi、j、およびkの和は、1以上である。

【0038】

項16. 式(6)において、 P^2 、 P^3 、および P^4 が式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基から選択された基である、項15に記載の液晶組成物。

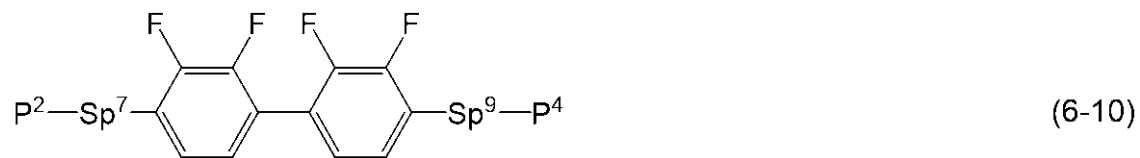
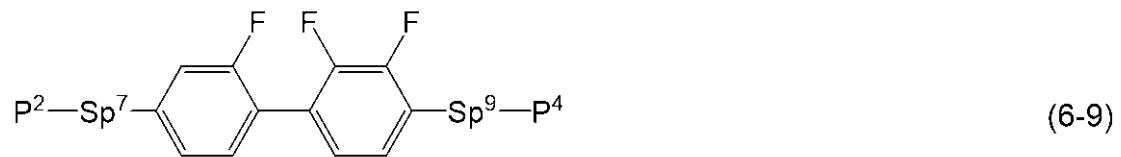
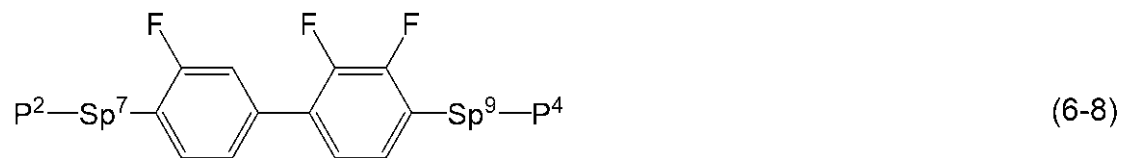
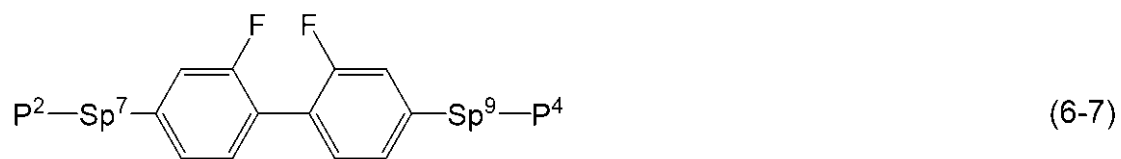
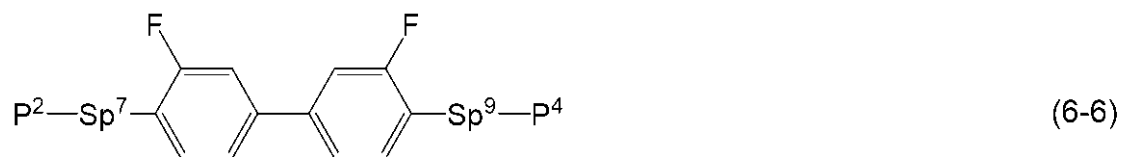
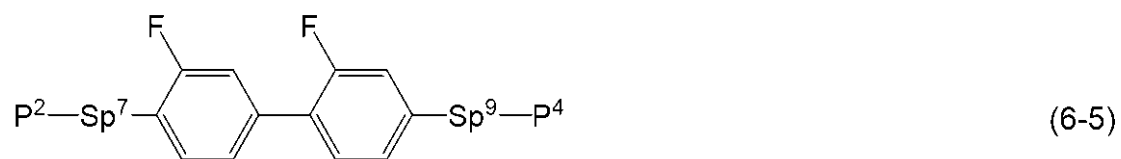
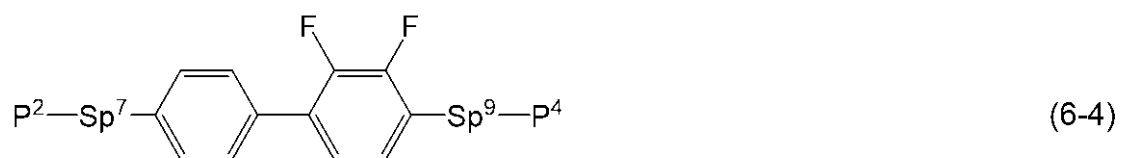
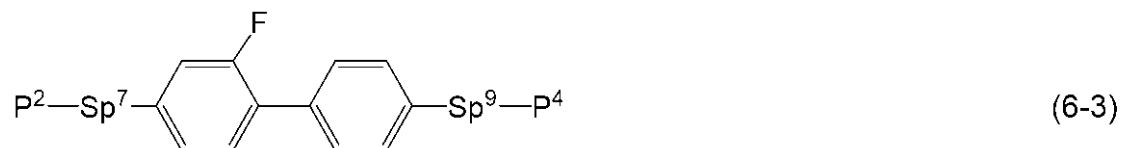
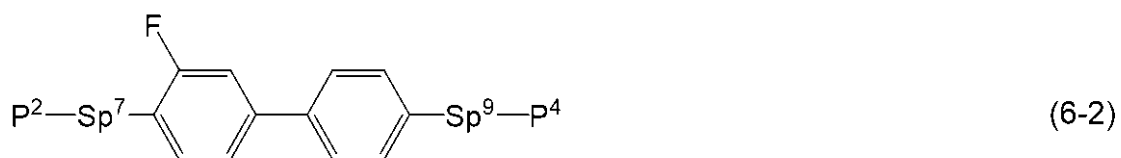
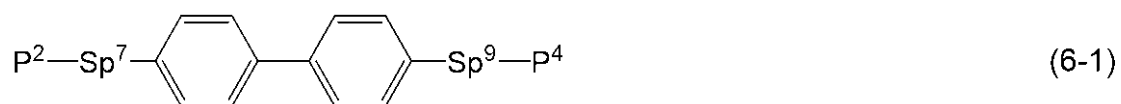


式 (P-1) から式 (P-5) において、 M^7 、 M^8 、 M^9 、 M^{10} 、 M^{11} 、 M^{12} 、 M^{13} 、 M^{14} 、および M^{15} は、水素、フッ素、炭素数 1 から 5 のアルキル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数 1 から 5 のアルキルである。

10

【0039】

項 17. 第二添加物として式 (6-1) から式 (6-28) で表される重合性化合物から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する、項 1 から 16 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

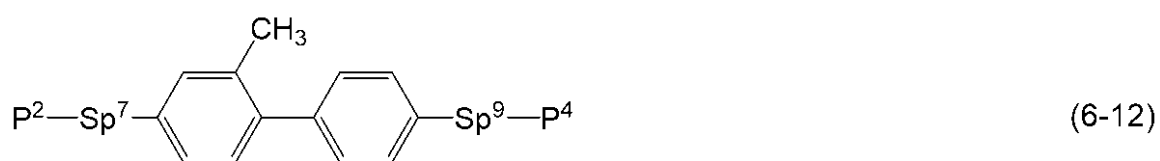
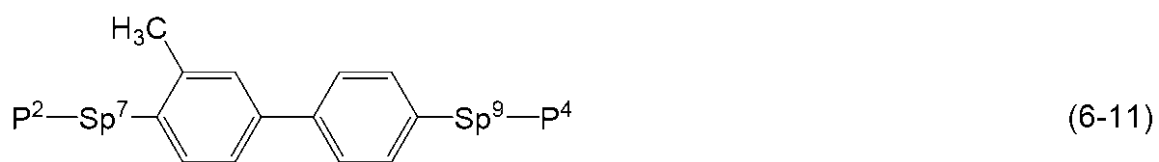


10

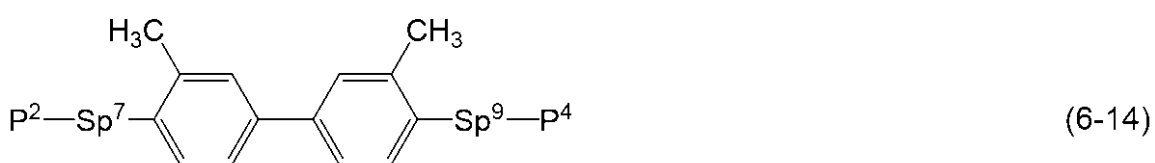
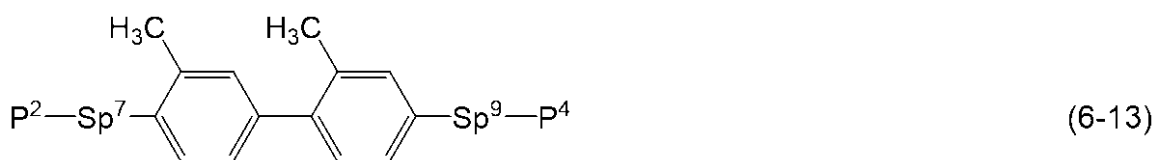
20

30

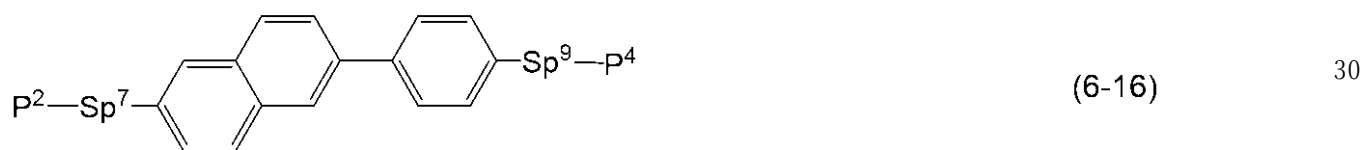
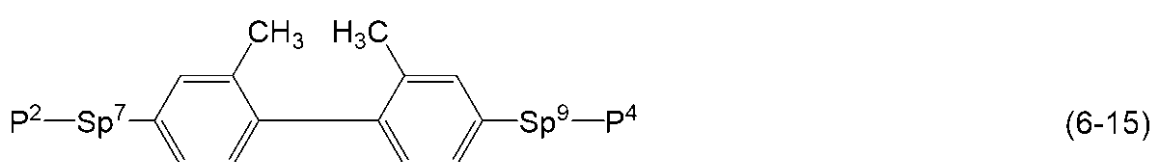
40



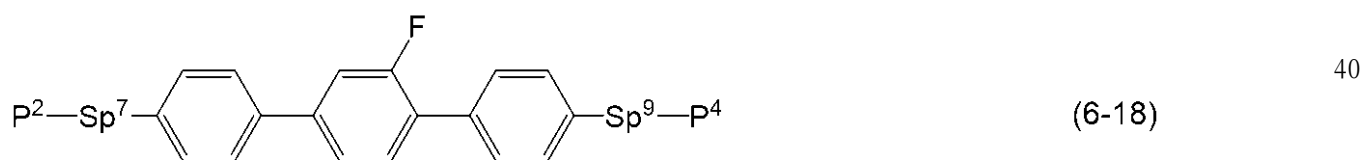
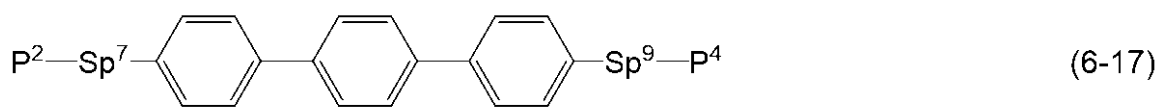
10



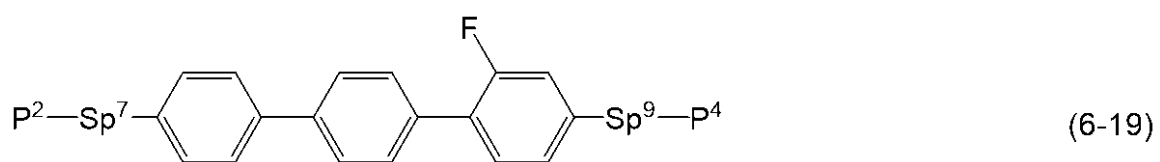
20

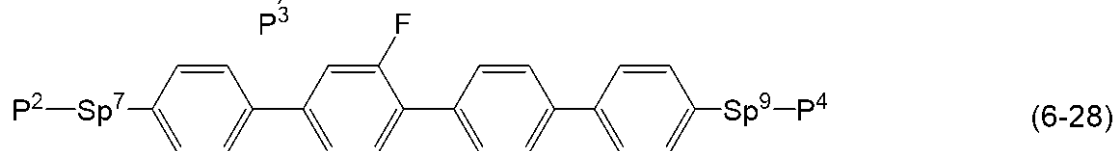
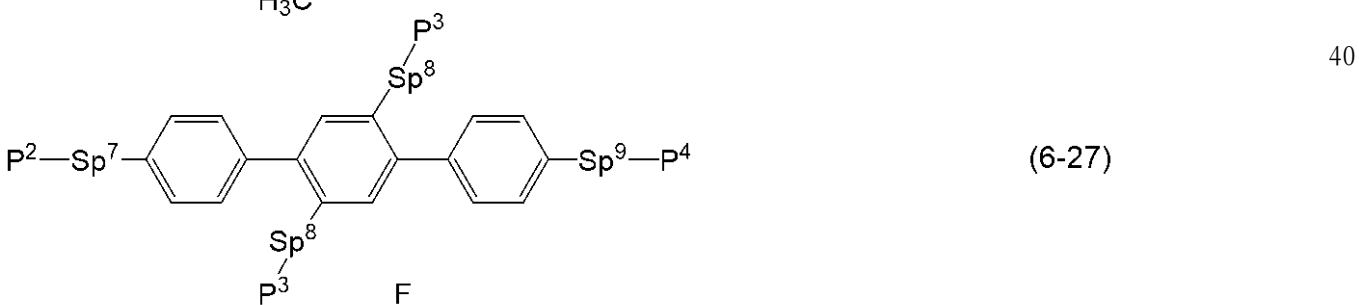
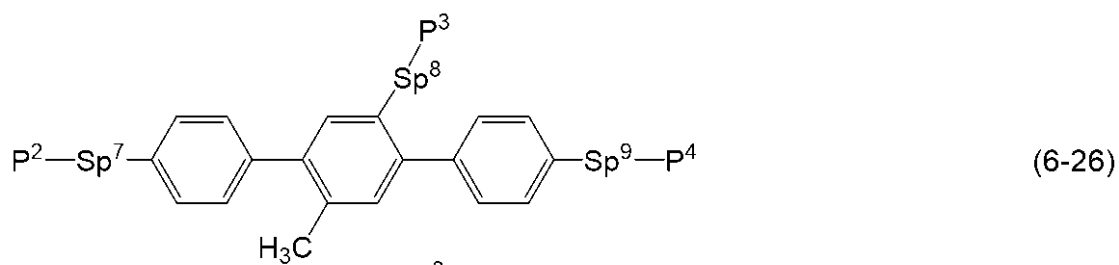
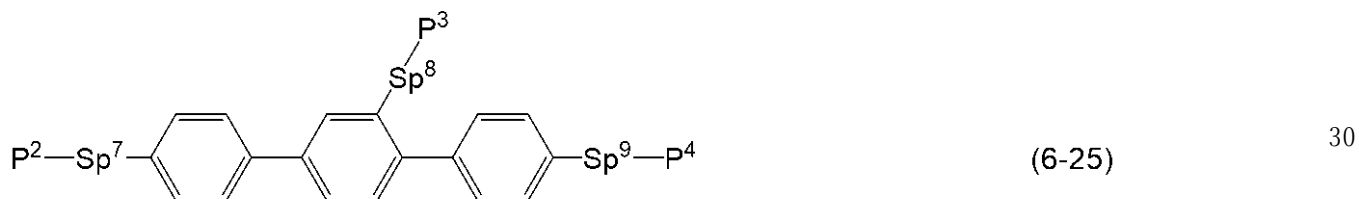
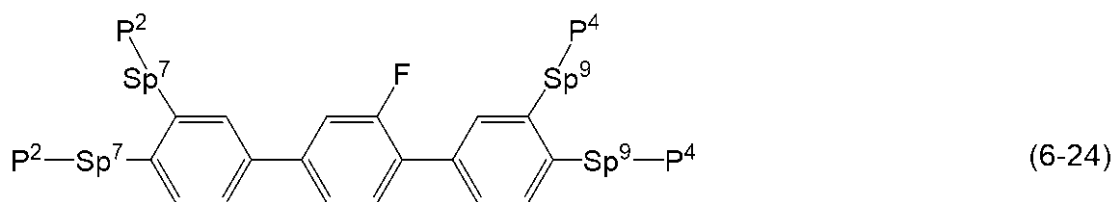
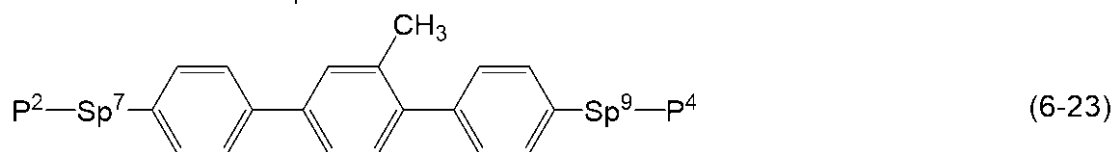
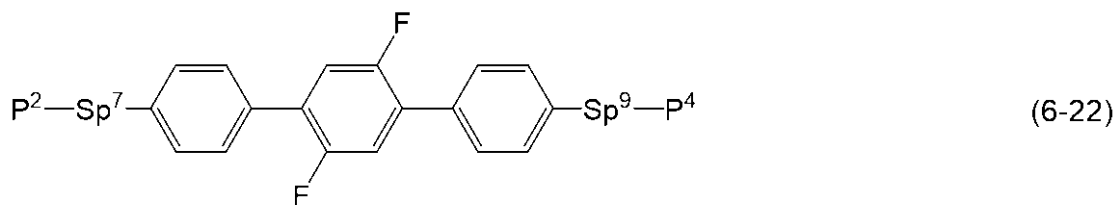
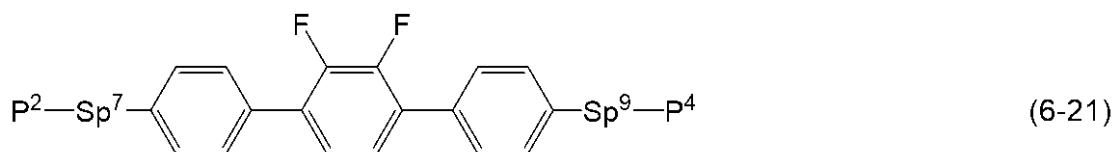
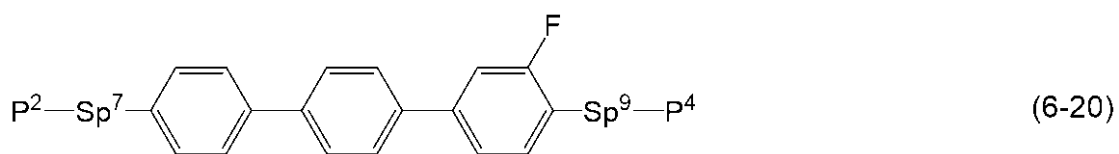


30



40





10

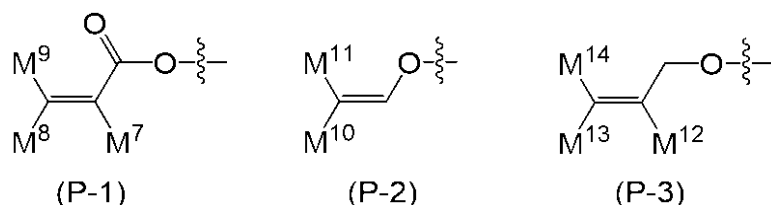
20

30

40

50

式(6-1)から式(6-28)において、 P^2 、 P^3 、および P^4 は、式(P-1)から式(P-3)で表される重合性基から選択された基であり、



ここで、 M^7 、 M^8 、 M^9 、 M^{10} 、 M^{11} 、 M^{12} 、 M^{13} 、および M^{14} は、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり； Sp^7 、 Sp^8 、および Sp^9 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【0040】

項18. 第二添加物の割合が0.03質量%から10質量%の範囲である、項15から17のいずれか1項に記載の液晶組成物。

【0041】

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

【0042】

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

【0043】

項21. 項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物が重合された、高分子支持配向型の液晶表示素子。

【0044】

項22. 項15から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物および第二添加物が重合された、高分子支持配向型の液晶表示素子。

【0045】

項23. 項1から14のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物が重合された、配向膜を有しない液晶表示素子。

【0046】

項24. 項15から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有し、この液晶組成物に含有される第一添加物および第二添加物が重合された、配向膜を有しない液晶表示素子。

【0047】

項25. 項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、液晶表示素子における使用。

【0048】

項26. 項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、高分子支持配向型の液晶表示素子における使用。

【0049】

項27. 項1から18のいずれか1項に記載の液晶組成物の、配向膜を有しない液晶表示素子における使用。

【0050】

10

20

30

40

50

本発明は、次の項も含む。(a) 上記の液晶組成物を2つの基板のあいだに配置し、この組成物に電圧を印加した状態で光を照射し、この組成物に含有された重合性基を有する極性化合物を重合させることによって、上記の液晶表示素子を製造する方法。(b) ネマチック相の上限温度が70℃以上であり、波長589nmにおける光学異方性(25℃で測定)が0.08以上であり、そして周波数1kHzにおける誘電率異方性(25℃で測定)が2以上である、上記の液晶組成物。

【0051】

本発明は、次の項も含む。(c) 上記の極性化合物(2)から選択された少なくとも2つの化合物を含有する上記の組成物。(d) 上記の極性化合物(2)とは異なる極性化合物をさらに含有する上記の組成物。(e) 光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、消光剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物のような添加物の1つ、2つまたは少なくとも3つを含有する上記の組成物。(f) 上記の組成物を含有するAM素子。(g) 上記の組成物を含有し、そしてTN、ECB、OCB、IPS、FFS、VA、またはFPAのモードを有する素子。(h) 上記の組成物を含有する透過型の素子。(i) 上記の組成物を、ネマチック相を有する組成物として使用すること。(j) 上記の組成物に光学活性化合物を添加することによって調製された組成物を、光学活性な組成物として使用すること。

【0052】

本発明の組成物を次の順で説明する。第一に、組成物の構成を説明する。第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物に及ぼす主要な効果を説明する。第三に、組成物における成分化合物の組合せ、好ましい割合およびその根拠を説明する。第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。第五に、好ましい成分化合物を示す。第六に、組成物に添加してもよい添加物を説明する。第七に、成分化合物の合成法を説明する。最後に、組成物の用途を説明する。

【0053】

第一に、組成物の構成を説明する。この組成物は、複数の液晶性化合物を含有する。この組成物は、添加物を含有してもよい。添加物は、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、消光剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物などである。この組成物は、液晶性化合物の観点から組成物Aと組成物Bに分類される。組成物Aは、化合物(1)、化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)から選択された液晶性化合物の他に、その他の液晶性化合物、添加物などをさらに含有してもよい。「その他の液晶性化合物」は、化合物(1)、化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)とは異なる液晶性化合物である。このような化合物は、特性をさらに調整する目的で組成物に混合される。

【0054】

組成物Bは、実質的に化合物(1)、化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)から選択された液晶性化合物のみからなる。「実質的に」は、組成物Bが添加物を含有してもよいが、その他の液晶性化合物を含有しないことを意味する。組成物Bは組成物Aに比較して成分化合物の数が少ない。コストを下げるという観点から、組成物Bは組成物Aよりも好ましい。その他の液晶性化合物を混合することによって特性をさらに調整できるという観点から、組成物Aは組成物Bよりも好ましい。

【0055】

第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物や素子に及ぼす主要な効果を説明する。成分化合物の主要な特性を表2にまとめる。表2の記号において、Lは大きいまたは高い、Mは中程度の、Sは小さいまたは低い、を意味する。記号L、M、Sは、成分化合物のあいだの定性的な比較に基づいた分類であり、記号0(ゼロ)は、S(小さい)よりも小さいことを意味する。

【0056】

表2. 化合物の特性

特性	化合物(1)	化合物(3)	化合物(4)	化合物(5)
上限温度	S~L	S~L	S~L	S~M
粘度	M~L	S~M	M~L	M
光学異方性	M~L	S~L	M~L	M~L
誘電率異方性	S~L ¹⁾	0	S~M ¹⁾	M~L ²⁾
比抵抗	L	L	L	L

1) 誘電率異方性は正であり、記号は絶対値の大小を示す。

2) 誘電率異方性は負であり、記号は絶対値の大小を示す。

【0057】

成分化合物を組成物に混合したとき、成分化合物が組成物の特性に及ぼす主要な効果は次のとおりである。化合物(1)は、誘電率異方性を上げる。化合物(3)は、上限温度を上げる、または粘度を下げる。化合物(4)は、誘電率異方性を上げ、そして下限温度を下げる。化合物(5)は、短軸方向における誘電率を上げる。化合物(5)は、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整する目的で添加される。

【0058】

化合物(2)は、極性基の作用で基板表面に吸着し、液晶分子の配向を制御する。所期の効果を得るには、化合物(2)は、液晶性化合物との高い相溶性を有することが必須である。化合物(2)は、1, 4-シクロヘキシレンや1, 4-フェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状であるからこの目的に最適である。化合物(6)は、高分子支持配向型の素子に、さらに適合させる目的で添加される。化合物(2)または化合物(6)は、重合によって重合体を与える。この重合体は、液晶分子の配向を安定化するので、素子の応答時間を短縮し、そして画像の焼き付きを改善する。液晶分子の配向という観点から、化合物(2)の重合体は効果的である。化合物(6)の重合体は長期安定性の観点から効果的である。化合物(2)および化合物(6)の組合せはさらに効果的である。この組合せによって相乗効果が期待できる。この組合せでは、化合物(2)のみよりも良好な長期安定性を期待できる。

【0059】

第三に、組成物における成分化合物の組合せ、好ましい割合およびその根拠を説明する。成分化合物の好ましい組合せは、化合物(1)＋化合物(2)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(4)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(5)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(6)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(4)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(5)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(6)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(4)＋化合物(5)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(4)＋化合物(6)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(5)＋化合物(6)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(4)＋化合物(5)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(4)＋化合物(6)、または化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(4)＋化合物(5)＋化合物(6)である。さらに好ましい組合せは、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(4)、化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(6)、または化合物(1)＋化合物(2)＋化合物(3)＋化合物(4)＋化合物(6)である。

10

20

30

40

50

【0060】

化合物（１）の好ましい割合は、誘電率異方性を上げるために約５質量％以上であり、下限温度を下げるために、または粘度を下げるために、約５５質量％以下である。さらに好ましい割合は約５質量％から約４５質量％の範囲である。特に好ましい割合は約１０質量％から約３５質量％の範囲である。

【0061】

化合物（２）の好ましい割合は、液晶分子を配向させるために約０．０５質量％以上であり、素子の表示不良を防ぐために約１０質量％以下である。さらに好ましい割合は、約０．１質量％から約７質量％の範囲である。特に好ましい割合は、約０．５質量％から約５質量％の範囲である。

10

【0062】

化合物（３）の好ましい割合は、上限温度を上げるために、または粘度を下げるために約１０質量％以上であり、誘電率異方性を上げるために約９０質量％以下である。さらに好ましい割合は約１５質量％から約８５質量％の範囲である。特に好ましい割合は約２０質量％から約８０質量％の範囲である。

【0063】

化合物（４）の好ましい割合は、誘電率異方性を上げるために約５質量％以上であり、下限温度を下げるために、約５０質量％以下である。さらに好ましい割合は約５質量％から約４０質量％の範囲である。特に好ましい割合は約５質量％から約３０質量％の範囲である。

20

【0064】

化合物（５）の好ましい割合は、短軸方向における誘電率を上げるために約３質量％以上であり、下限温度を下げるために約４０質量％以下である。さらに好ましい割合は約５質量％から約３５質量％の範囲である。特に好ましい割合は約１０質量％から約３５質量％の範囲である。

【0065】

化合物（６）の好ましい割合は、配向の長期安定性を向上させるために約０．０３質量％以上であり、素子の表示不良を防ぐために約１０質量％以下である。さらに好ましい割合は、約０．１質量％から約２質量％の範囲である。特に好ましい割合は、約０．２質量％から約１．０質量％の範囲である。

30

【0066】

第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。まず、４つの液晶性化合物をまとめて説明する。次に、第一添加物（重合性基を有する極性化合物）、第二添加物（重合性化合物）の順に説明する。

【0067】

（a）液晶性化合物

式（１）、式（３）、式（４）、および式（５）において、 R^1 は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルである。好ましい R^1 は、紫外線または熱に対する安定性を上げるために、炭素数１から１２のアルキルである。 R^6 および R^7 は、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、炭素数２から１２のアルケニル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数２から１２のアルケニルである。好ましい R^6 または R^7 は、紫外線または熱に対する安定性を上げるために炭素数１から１２のアルキルであり、下限温度を下げるために、または粘度を下げるために炭素数２から１２のアルケニルである。

40

【0068】

R^8 は炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または炭素数２から１２のアルケニルである。好ましい R^8 は、紫外線または熱に対する安定性を上げるために、炭素数１から１２のアルキルである。 R^9 および R^{10} は、水素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、炭素数２から１２のアルケニル、また

50

は炭素数 2 から 12 のアルケニルオキシである。好ましい R^9 または R^{10} は、紫外線または熱に対する安定性を上げるために炭素数 1 から 12 のアルキルであり、誘電率異方性を上げるために炭素数 1 から 12 のアルコキシである。

【0069】

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

【0070】

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

10

【0071】

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

20

【0072】

好ましいアルケニルオキシは、ビニルオキシ、アリルオキシ、3-ブテニルオキシ、3-ペンテニルオキシ、または4-ペンテニルオキシである。粘度を下げるために、さらに好ましいアルケニルオキシは、アリルオキシまたは3-ブテニルオキシである。

【0073】

少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたアルキルの好ましい例は、フルオロメチル、2-フルオロエチル、3-フルオロプロピル、4-フルオロブチル、5-フルオロペンチル、6-フルオロヘキシル、7-フルオロヘプチル、または8-フルオロオクチルである。さらに好ましい例は、誘電率異方性を上げるために2-フルオロエチル、3-フルオロプロピル、4-フルオロブチル、または5-フルオロペンチルである。

30

【0074】

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

【0075】

環 A および環 B は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、2, 6-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキササン-2, 5-ジイル、またはテトラヒドロピラン-2, 5-ジイルである。好ましい環 A または環 B は、光学異方性を上げるために、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、または2, 6-ジフルオロ-1, 4-フェニレンである。環 E および環 F は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、または2, 5-ジフルオロ-1, 4-フェニレンである。好ましい環 E または環 F は、粘度を下げるために1, 4-シクロヘキシレンであり、光学異方性を上げるために1, 4-フェニレンである。環 G は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、2, 6-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキササン-2, 5-ジイル、ま

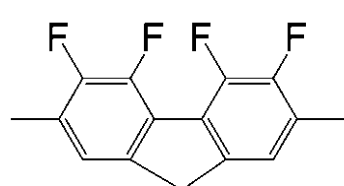
40

50

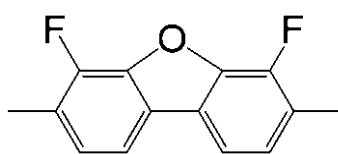
たはテトラヒドロピラン-2, 5-ジイルである。好ましい環Gは光学異方性を上げるために、1, 4-フェニレンまたは2-フルオロ-1, 4-フェニレンである。

【0076】

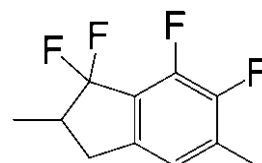
環Iおよび環Kは、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたナフタレン-2, 6-ジイル、クロマン-2, 6-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたクロマン-2, 6-ジイルである。好ましい環Iまたは環Kは、粘度を下げるために1, 4-シクロヘキシレンであり、誘電率異方性を上げるためにテトラヒドロピラン-2, 5-ジイルであり、光学異方性を上げるために1, 4-フェニレンである。環Jは、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、2-クロロ-3-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-5-メチル-1, 4-フェニレン、3, 4, 5-トリフルオロナフタレン-2, 6-ジイル、7, 8-ジフルオロクロマン-2, 6-ジイル、3, 4, 5, 6-テトラフルオロフルオレン-2, 7-ジイル (FLF4)、4, 6-ジフルオロジベンゾフラン-3, 7-ジイル (BFF2)、または1, 1, 6, 7-テトラフルオロインダン-2, 5-ジイル (InF4) である。



(FLF4)



(BFF2)



(InF4)

好ましい環Jは、誘電率異方性を上げるために2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレンである。

【0077】

Z¹およびZ²は、単結合、エチレン、ビニレン、メチレンオキシ、カルボニルオキシ、またはジフルオロメチレンオキシである。好ましいZ¹またはZ²は、粘度を下げるために単結合である。Z⁷は、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシである。好ましいZ⁷は、粘度を下げるために単結合である。Z⁸は、単結合、エチレン、またはカルボニルオキシである。好ましいZ⁸は、粘度を下げるために単結合である。Z⁹およびZ¹⁰は、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシである。好ましいZ⁹またはZ¹⁰は、粘度を下げるために単結合であり、誘電率異方性を上げるためにメチレンオキシである。

【0078】

X¹、X²、X³、X⁴、X⁵、X⁶、X⁷、X⁸、X⁹、X¹⁰、X¹¹、X¹²、X¹³、X¹⁴、X¹⁵、およびX¹⁶は、水素またはフッ素である。好ましいX¹からX¹⁵、またはX¹⁶は、誘電率異方性を上げるためにフッ素である。

【0079】

Y¹およびY²は、フッ素、塩素、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキル、少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルオキシである。好ましいY¹またはY²は、下限温度を下げるためにフッ素である。少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたアルキルの好ましい例は、トリフルオロメチルである。少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたアルコキシの好ましい例は、トリフルオロメトキシである。少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられたアルケニルオキシの好ましい例は、トリフルオロビニルオキシである。

【0080】

aは、1、2、3、または4であり、bは、0、1、2、または3であり、そしてaおよびbの和は4以下である。好ましいaは、誘電率異方性を上げるために2または3である。好ましいbは、下限温度を下げるために0または1である。dは、1、2、または3である。好ましいdは、粘度を下げるために1であり、下限温度を下げるために2である。eは、1、2、3、または4である。好ましいeは、誘電率異方性を上げるために2または3である。fは、1、2、または3であり、gは0または1であり、そしてfおよびgの和は3以下である。好ましいfは粘度を下げるために1であり、上限温度を上げるために2または3である。好ましいgは粘度を下げるために0であり、下限温度を下げるために1である。

10

【0081】

(b) 第一添加物

式(2)において、 R^2 は、炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい R^2 は、炭素数1から15のアルキルである。

【0082】

環Cおよび環Dは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、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-ジオキサセン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、アントラセン-2,6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイル、または2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい環Cまたは環Dは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロー-1,4-フェニレン、2-エチル-1,4-フェニレン、またはナフタレン-2,6-ジイルである。

20

30

【0083】

Z^3 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい Z^3 は、単結合、エチレン、ブチレン、ビニレン、メチレンオキシ、またはジフルオロメチレンオキシである。さらに好ましい Z^3 は、単結合である。

40

【0084】

Sp^1 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、この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 $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい Sp^1 は、単結合、炭素数1から10のアルキレン、または少なくとも1つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数1から10のアルキレンである。

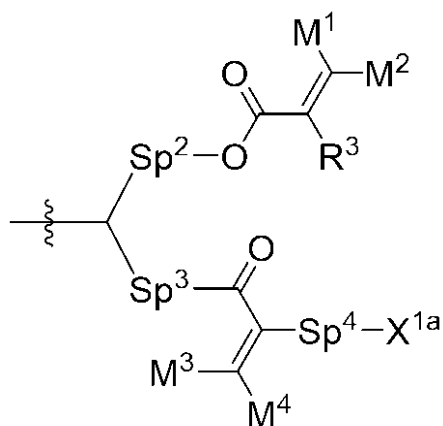
【0085】

cは、0、1、2、3、または4である。好ましいcは、0、1、または2である。

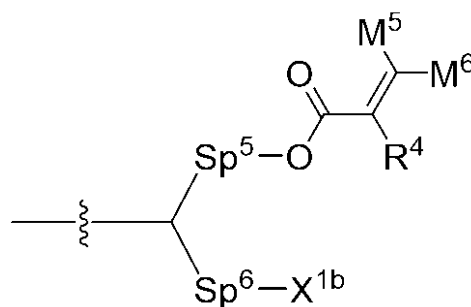
50

【0086】

P¹は、式(1a)または式(1b)で表される重合性基である。



(1a)



(1b)

10

【0087】

式(1a)および式(1b)において、Sp²、Sp³、Sp⁴、Sp⁵、およびSp⁶は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-NH-、-CO-、-COO-、-OCO-、または-OCO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましいSp²、Sp³、Sp⁴、Sp⁵、またはSp⁶は、単結合、炭素数1から10のアルキレン、または少なくとも1つの-CH₂-が-O-で置き換えられた炭素数1から10のアルキレンである。

20

【0088】

M¹、M²、M³、M⁴、M⁵、およびM⁶は、水素、フッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。好ましいM¹、M²、M³、M⁴、M⁵、またはM⁶は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましいM¹、M²、M³、M⁴、M⁵、またはM⁶は、水素である。

30

【0089】

R³は、水素、-Sp⁴-X^{1a}、または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-または-S-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましいR³は、水素、-Sp⁴-X^{1a}、炭素数1から15のアルキル、または少なくとも1つの-CH₂-が-O-で置き換えられた炭素数1から15のアルキルである。R⁴は、水素または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-または-S-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-CH₂CH₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましいR⁴は、水素、炭素数1から15のアルキル、または少なくとも1つの-CH₂-が-O-で置き換えられた炭素数1から15のアルキルである。

40

【0090】

X^{1a}およびX^{1b}は、-OR⁵、-N(R⁵)₂、-COOH、-SH、-B(OH)₂、または-Si(R⁵)₃である。R⁵は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-で置き換えられ

50

てもよく、少なくとも1つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。液晶組成物への高い相溶性の観点から、 X^{1a} および X^{1b} は、 $-\text{OH}$ または $-\text{NH}_2$ であることが特に好ましい。 $-\text{OH}$ は、高いアンカー力を有するので $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{COO}-$ よりも好ましい。複数のヘテロ原子（窒素、酸素）を有する基は、特に好ましい。そのような極性基を有する化合物は、低い濃度であっても有効である。化合物(2)は、紫外線や熱に対して安定であることが好ましい。化合物(2)を組成物に添加したとき、この化合物が素子の電圧保持率を下げないことが好ましい。化合物(2)は、低い揮発性を有することが好ましい。好ましいモル質量は 130 g/mol 以上である。さらに好ましいモル質量は 150 g/mol から 800 g/mol の範囲である。

10

【0091】

式(2-1)から式(2-57)において、 Z^4 、 Z^5 、および Z^6 は、単結合、エチレン、ブチレン、ビニレン、メチレンオキシ、またはジフルオロメチレンオキシである。

【0092】

L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、 L^{10} 、 L^{11} 、および L^{12} は、水素、フッ素、メチル、またはエチルである。好ましい L^1 から L^{12} は、水素、フッ素、またはメチルである。さらに好ましい L^1 から L^{12} は、水素またはフッ素である。

【0093】

n は、0、1、2、3、4、5、または6である。

20

【0094】

(c) 第二添加物

式(6)において、環Lおよび環Uは、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1,3-ジオキササン-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよい。好ましい環Lまたは環Uは、フェニルである。

【0095】

30

環Tは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-1,2-ジイル、ナフタレン-1,3-ジイル、ナフタレン-1,4-ジイル、ナフタレン-1,5-ジイル、ナフタレン-1,6-ジイル、ナフタレン-1,7-ジイル、ナフタレン-1,8-ジイル、ナフタレン-2,3-ジイル、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキササン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、またはピリジン-2,5-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよい。好ましい環Tは、1,4-フェニレンまたは2-フルオロ-1,4-フェニレンである。

40

【0096】

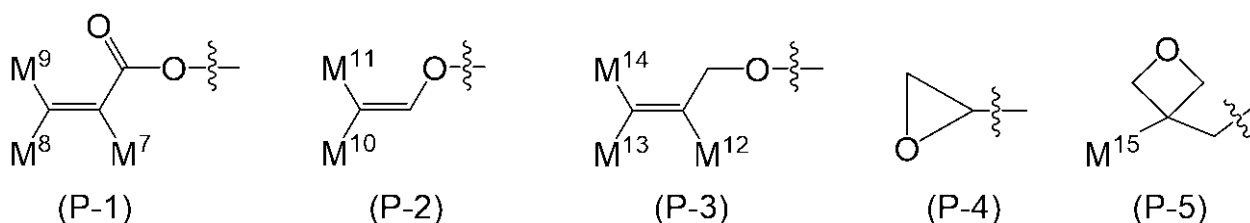
Z^{11} および Z^{12} は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、または $-\text{OCO}-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)-$ 、または $-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{C}(\text{CH}_3)-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい Z^{11} または Z^{12} は、単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、または $-\text{OCO}-$ である。さらに好ましい Z^{11} または Z^{12} は、単結合である。

50

【0097】

式(6)において、 P^2 、 P^3 、および P^4 は、式(1a)および式(1b)で表される重合性基とは異なる重合性基である。この重合性基は、 $-OH$ 、 $-OR^0$ 、 $-NH_2$ 、 $-NHR^0$ 、または $-N(R^0)_2$ のような極性基を有しない。ここで、 R^0 は炭素数1から12のアルキルである。好ましい P^2 、 P^3 、または P^4 は、式(P-1)から式(P-5)で表される重合性基から選択された基である。さらに好ましい P^2 、 P^3 、または P^4 は、式(P-1)、式(P-2)、または式(P-3)で表される基である。特に好ましい P^2 、 P^3 、または P^4 は、式(P-1)または式(P-2)で表される基である。最も好ましい P^2 、 P^3 、または P^4 は、式(P-1)で表される基である。式(P-1)で表される好ましい基は、アクリロイルオキシ($-OCO-CH=CH_2$)またはメ

10



【0098】

式(P-1)から式(P-5)において、 M^7 、 M^8 、 M^9 、 M^{10} 、 M^{11} 、 M^{12} 、 M^{13} 、 M^{14} 、および M^{15} は、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。好ましい M^7 、 M^8 、 M^9 、 M^{10} 、 M^{11} 、 M^{12} 、 M^{13} 、 M^{14} 、および M^{15} は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましい M^7 、 M^{12} 、および M^{15} は水素またはメチルであり、さらに好ましい M^8 、 M^9 、 M^{10} 、 M^{11} 、 M^{13} 、および M^{14} は水素である。

20

【0099】

式(6)において、 Sp^7 、 Sp^8 、および Sp^9 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンである。このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-COOO-$ で置き換えられてもよく、そして少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい Sp^7 、 Sp^8 、または Sp^9 は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CO-CH=CH-$ 、または $-CH=CH-CO-$ である。さらに好ましい Sp^7 、 Sp^8 、または Sp^9 は、単結合である。

30

【0100】

h は、0、1、または2である。好ましい h は、0または1である。 i 、 j 、および k は、0、1、2、3、または4であり、そして i 、 j 、および k の和は、1以上である。好ましい i 、 j 、および k は、1または2である。

40

【0101】

第五に、好ましい成分化合物を示す。好ましい化合物(1)は、項2に記載の化合物(1-1)から化合物(1-14)である。これらの化合物において、第一成分の少なくとも1つが、化合物(1-3)、化合物(1-4)、化合物(1-7)、化合物(1-9)、化合物(1-10)、または化合物(1-12)であることが好ましい。第一成分の少なくとも2つが、化合物(1-3)および化合物(1-4)、化合物(1-3)および化合物(1-7)、化合物(1-3)および化合物(1-10)、化合物(1-7)および化合物(1-10)、または化合物(1-9)および化合物(1-10)の組合せであることが好ましい。

【0102】

50

好ましい化合物(2)は、項3に記載の化合物(2-1)から化合物(2-57)である。これらの化合物において、第一添加物の少なくとも1つが、化合物(2-1)、化合物(2-2)、化合物(2-3)、化合物(2-9)、化合物(2-17)、化合物(2-19)、化合物(2-20)、化合物(2-21)、化合物(2-22)、化合物(2-39)、化合物(2-40)、または化合物(2-41)であることが好ましい。第一添加物の少なくとも2つが、化合物(2-1)および化合物(2-2)、化合物(2-1)および化合物(2-3)、または化合物(2-5)および化合物(2-6)の組合せであることが好ましい。

【0103】

好ましい化合物(3)は、項7に記載の化合物(3-1)から化合物(3-13)である。これらの化合物において、第二成分の少なくとも1つが、化合物(3-1)、化合物(3-3)、化合物(3-5)、化合物(3-6)、化合物(3-8)、または化合物(3-13)であることが好ましい。第二成分の少なくとも2つが、化合物(3-1)および化合物(3-3)、化合物(3-1)および化合物(3-5)、化合物(3-1)および化合物(3-8)、または化合物(3-3)および化合物(3-5)の組合せであることが好ましい。

【0104】

好ましい化合物(4)は、項10に記載の化合物(4-1)から化合物(4-16)である。これらの化合物において、第三成分の少なくとも1つが、化合物(4-4)、化合物(4-8)、化合物(4-9)、化合物(4-11)、化合物(4-12)、化合物(4-13)、または化合物(4-16)であることが好ましい。第三成分の少なくとも2つが、化合物(4-9)および化合物(4-12)、化合物(4-11)および化合物(4-12)、化合物(4-12)および化合物(4-13)、または化合物(4-12)および化合物(4-16)の組合せであることが好ましい。

【0105】

好ましい化合物(5)は、項13に記載の化合物(5-1)から化合物(5-33)である。これらの化合物において、第四成分の少なくとも1つが、化合物(5-1)、化合物(5-3)、化合物(5-6)、化合物(5-8)、化合物(5-10)、化合物(5-14)、または化合物(5-17)であることが好ましい。第一成分の少なくとも2つが、化合物(5-1)および化合物(5-8)、化合物(5-1)および化合物(5-14)、化合物(5-3)および化合物(5-8)、化合物(5-3)および化合物(5-14)、化合物(5-3)および化合物(5-17)、化合物(5-6)および化合物(5-8)、化合物(5-6)および化合物(5-10)、化合物(5-6)および化合物(5-17)、化合物(5-10)および化合物(5-17)の組合せであることが好ましい。

【0106】

好ましい化合物(6)は、項17に記載の化合物(6-1)から化合物(6-28)である。さらに好ましい化合物(6)は、化合物(6-1)、化合物(6-2)、化合物(6-3)、化合物(6-4)、化合物(6-5)、化合物(6-6)、化合物(6-7)、化合物(6-18)、化合物(6-20)、化合物(6-23)、化合物(6-24)、化合物(6-25)、および化合物(6-26)である。特に好ましい化合物(6)は、化合物(6-2)、化合物(6-3)、化合物(6-4)、および化合物(6-18)である。

【0107】

第六に、組成物に添加してもよい添加物を説明する。このような添加物は、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、消光剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物などである。液晶分子のらせん構造を誘起してねじれ角を与える目的で光学活性化合物が組成物に添加される。このような化合物の例は、化合物(7-1)から化合物(7-5)である。光学活性化合物の好ましい割合は約5質量%以下である。さらに好ましい割合は約0.01質量%から約2質量%の範囲である。

10

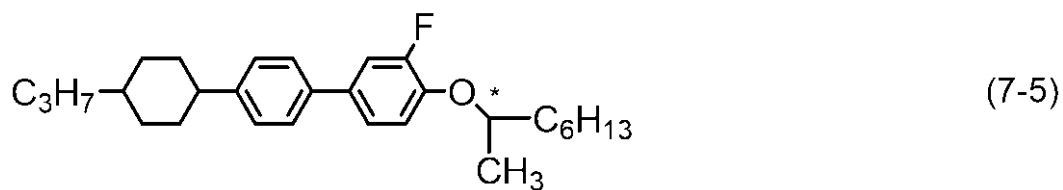
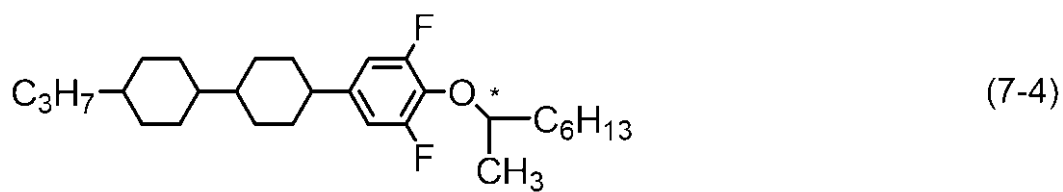
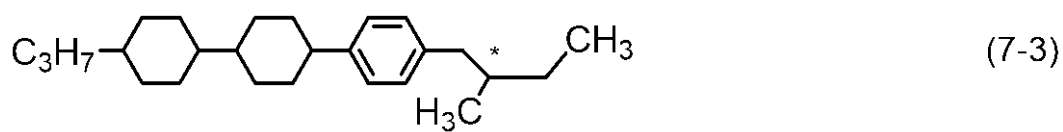
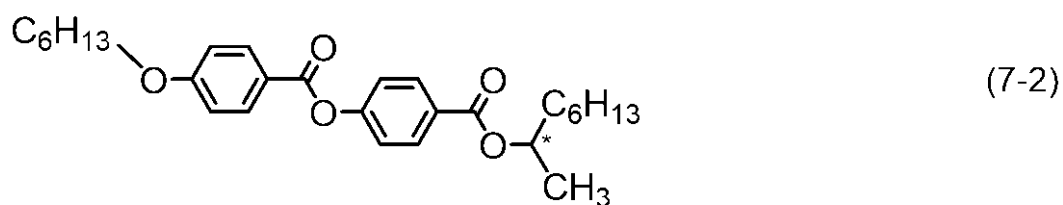
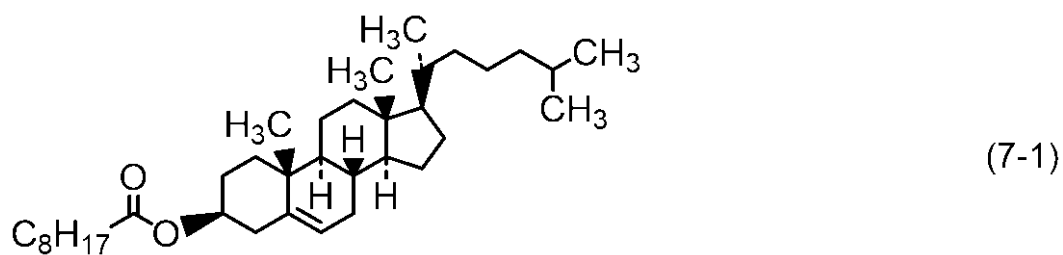
20

30

40

50

【 0 1 0 8 】



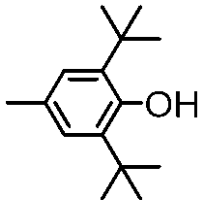
【 0 1 0 9 】

大気中での加熱による比抵抗の低下を防止するために、または素子を長時間使用したあと、室温だけではなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を維持するために、酸化防止剤が組成物に添加される。酸化防止剤の好ましい例は、化合物（８－１）から化合物（８－３）などである。

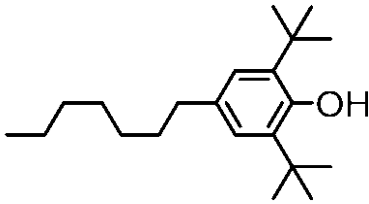
10

20

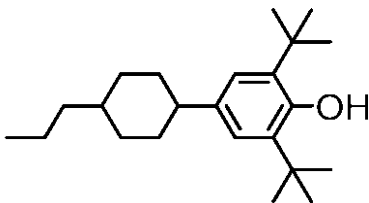
30



(8-1)



(8-2)



(8-3)

【0110】

化合物（８－２）は、揮発性が小さいので、素子を長時間使用したあと、室温だけではなく上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を維持するのに有効である。酸化防止剤の好ましい割合は、その効果を得るために約５０ppm以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないように約６００ppm以下である。さらに好ましい割合は、約１００ppmから約３００ppmの範囲である。

10

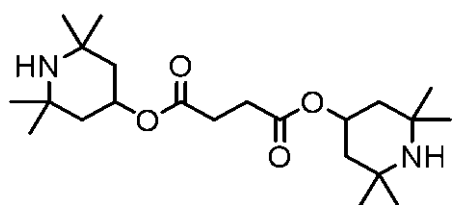
20

【0111】

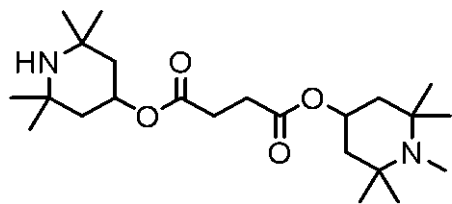
紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。立体障害のあるアミンのような光安定剤もまた好ましい。光安定剤の好ましい例は、化合物（９－１）から化合物（９－１６）などである。これらの吸収剤や安定剤における好ましい割合は、その効果を得るために約５０ppm以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないために約１００００ppm以下である。さらに好ましい割合は約１００ppmから約１００００ppmの範囲である。

30

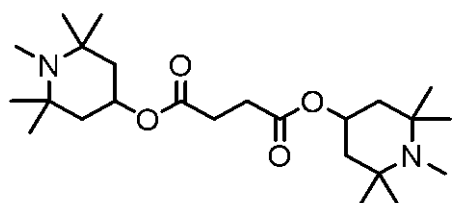
【0112】



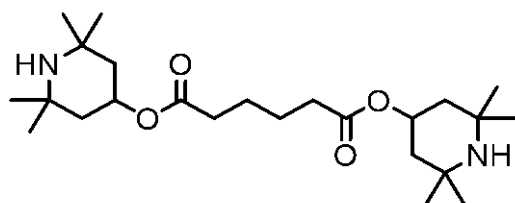
(9-1)



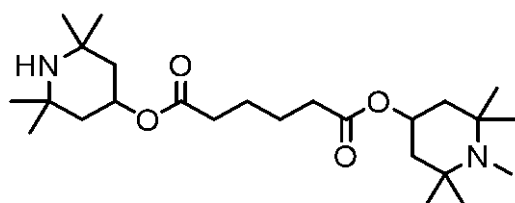
(9-2)



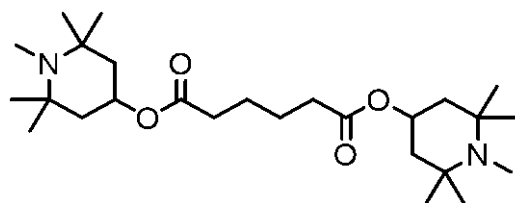
(9-3)



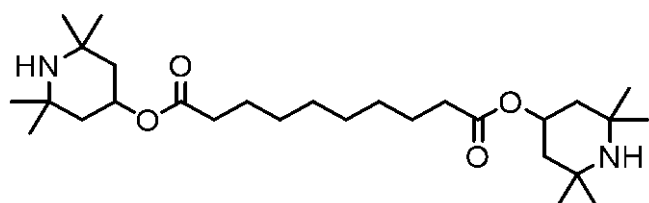
(9-4)



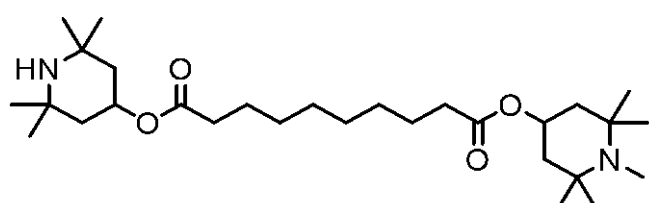
(9-5)



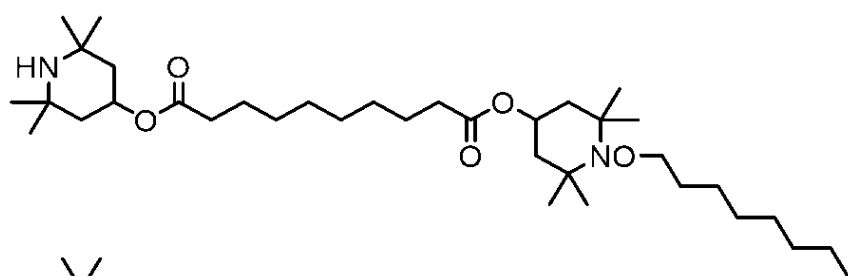
(9-6)



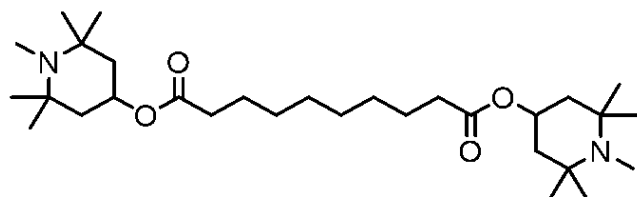
(9-7)



(9-8)

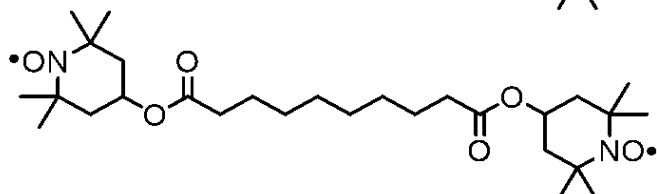


(9-9)

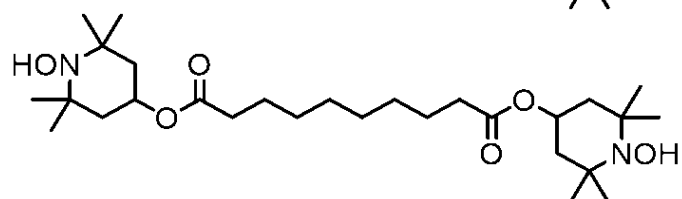


(9-10)

10

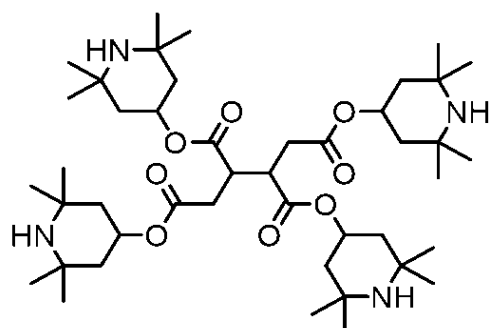


(9-11)



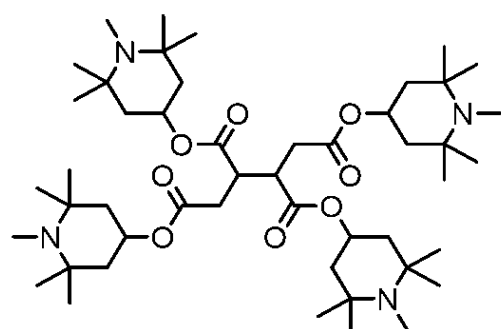
(9-12)

20



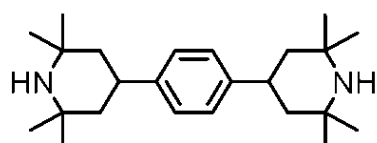
(9-13)

30

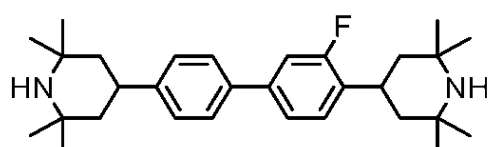


(9-14)

40



(9-15)



(9-16)

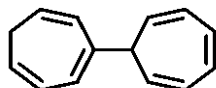
消光剤は、液晶性化合物が吸収した光エネルギーを受容し、熱エネルギーに変換することにより、液晶性化合物の分解を防止する化合物である。消光剤の好ましい例は、化合物（１０－１）から化合物（１０－７）などである。これらの消光剤における好ましい割合は、その効果を得るために約５０ppm以上であり、下限温度を上げないために約２０００ppm以下である。さらに好ましい割合は約１００ppmから約１０００ppmの範囲である。

【０１１５】

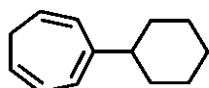


(10-1)

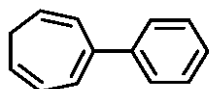
10



(10-2)

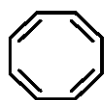


(10-3)

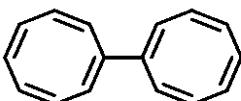


(10-4)

20

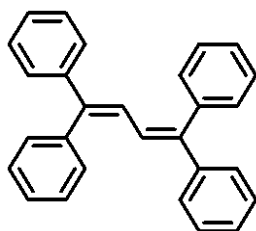


(10-5)



(10-6)

30



(10-7)

【０１１６】

GH (guest host) モードの素子に適合させるために、アゾ系色素、アントラキノン系色素などのような二色性色素 (dichroic dye) が組成物に添加される。色素の好ましい割合は、約０．０１質量％から約１０質量％の範囲である。泡立ちを防ぐために、ジメチルシリコンオイル、メチルフェニルシリコンオイルなどの消泡剤が組成物に添加される。消泡剤の好ましい割合は、その効果を得るために約１ppm以上であり、表示不良を防ぐために約１０００ppm以下である。さらに好ましい割合は、約１ppmから約５００ppmの範囲である。

40

【０１１７】

高分子支持配向 (PSA) 型の素子に適合させるために重合性化合物が用いられる。化合物（２）および化合物（６）はこの目的に適している。化合物（２）および化合物（６）と共に、化合物（２）および化合物（６）とは異なる重合性化合物を組成物に添加してもよい。そのような重合性化合物の好ましい例は、アクリレート、メタクリレート、ビニ

50

ル化合物、ビニルオキシ化合物、プロペニルエーテル、エポキシ化合物（オキシラン、オキセタン）、ビニルケトンなど化合物である。さらに好ましい例は、アクリレートまたはメタクリレートである。化合物（２）および化合物（６）の好ましい割合は、重合性化合物の全質量に基づいて約１０質量％以上である。さらに好ましい割合は、約５０質量％以上である。特に好ましい割合は、約８０質量％以上である。特に好ましい割合は、１００質量％でもある。化合物（２）および化合物（６）の種類を変えることによって、または化合物（２）および化合物（６）にその他の重合性化合物を適切な比で組み合わせることによって、重合性化合物の反応性や液晶分子のプレチルト角を調整することができる。プレチルト角を最適化することによって、素子の短い応答時間を達成することができる。液晶分子の配向が安定化されるので、大きなコントラスト比や長い寿命を達成することができる。

10

【０１１８】

この重合性化合物は紫外線照射によって重合する。光重合開始剤などの適切な開始剤の存在下で重合させてもよい。重合のための適切な条件、開始剤の適切なタイプ、および適切な量は、当業者には既知であり、文献に記載されている。例えば、光重合開始剤である I r g a c u r e 6 5 1（登録商標；B A S F）、I r g a c u r e 1 8 4（登録商標；B A S F）、または D a r o c u r 1 1 7 3（登録商標；B A S F）がラジカル重合に対して適切である。光重合開始剤の好ましい割合は、重合性化合物の全質量に基づいて約 0.1 質量％から約 5 質量％の範囲である。さらに好ましい割合は約 1 質量％から約 3 質量％の範囲である。

20

【０１１９】

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

【０１２０】

極性化合物は、極性をもつ有機化合物である。ここでは、イオン結合を有する化合物は含まれない。酸素、硫黄、および窒素のような原子は、より電氣的に陰性であり、部分的な負電荷をもつ傾向にある。炭素および水素は中性であるか、または部分的な正電荷をもつ傾向がある。極性は、化合物中の別種の原子間で部分電荷が均等に分布しないことから生じる。例えば、極性化合物は、 $-OH$ 、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-NH_2$ 、 $>NH$ 、 $>N-$ のような部分構造の少なくとも１つを有する。

30

【０１２１】

第七に、成分化合物の合成法を説明する。これらの化合物は既知の方法によって合成できる。合成法を例示する。化合物（１－４）および化合物（１－１０）は、特開平１０－２５１１８６号公報に記載された方法で合成する。化合物（２）の合成法は、実施例の項に記載する。化合物（３－１）は、特開昭５９－１７６２２１号公報に記載された方法で合成する。化合物（４－４）および化合物（４－８）は、特開平２－２３３６２６号公報に記載された方法で合成する。化合物（５－１）および化合物（５－８）は、特表平２－５０３４４１号公報に記載された方法で合成する。化合物（６－１８）は特開平７－１０１９００号公報に記載された方法で合成する。化合物（８－１）は、アルドリッチ（Sigma-Aldrich Corporation）から入手できる。化合物（８－２）などは、米国特許３６６０５０５号明細書に記載された方法によって合成する。

40

【０１２２】

合成法を記載しなかった化合物は、オーガニック・シンセシス（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc.）、オーガニック・リアクションズ（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc.）、コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、新実験化学講座（丸善）などの成書に記載された方法によって合成できる。組成物は、このようにして得た化合物から公知の方法によって調製される。例えば、成分化合物を混合し、そして加熱によって互いに溶解させる。

50

【0123】

最後に、組成物の用途を説明する。大部分の組成物は、約 -10°C 以下の下限温度、約 70°C 以上の上限温度、そして約 0.07 から約 0.20 の範囲の光学異方性を有する。成分化合物の割合を制御することによって、またはその他の液晶性化合物を混合することによって、約 0.08 から約 0.25 の範囲の光学異方性を有する組成物を調製してもよい。さらには、試行錯誤によって約 0.10 から約 0.30 の範囲の光学異方性を有する組成物を調製してもよい。この組成物を含有する素子は大きな電圧保持率を有する。この組成物はAM素子に適する。この組成物は透過型のAM素子に特に適する。この組成物は、ネマチック相を有する組成物としての使用、光学活性化合物を添加することによって光学活性な組成物としての使用が可能である。

10

【0124】

この組成物はAM素子への使用が可能である。さらにPM素子への使用も可能である。この組成物は、PC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、FFS、VA、FPAなどのモードを有するAM素子およびPM素子への使用が可能である。TN、OCB、IPS、FFSなどのモードを有するAM素子への使用は特に好ましい。IPSモードまたはFFSモードを有するAM素子において、電圧が無印加のとき、液晶分子の配向がガラス基板に対して並行であってもよく、または垂直であってもよい。これらの素子が反射型、透過型、または半透過型であってもよい。透過型の素子への使用は好ましい。非結晶シリコン-TFT素子または多結晶シリコン-TFT素子への使用も可能である。この組成物をマイクロカプセル化して作製したNCA P (nematic curvilinear aligned phase) 型の素子や、組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたPD (polymer dispersed) 型の素子にも使用できる。

20

【0125】

高分子支持配向型の素子を製造する方法の一例は、次のとおりである。アレイ基板とカラーフィルター基板と呼ばれる2つの基板を有する素子を用意する。この基板は配向膜を有する。この基板の少なくとも1つは、電極層を有する。液晶性化合物を混合して液晶組成物を調製する。この組成物に重合性化合物を添加する。必要に応じて添加物をさらに添加してもよい。この組成物を素子に注入する。この素子に電圧を印加した状態で光照射する。紫外線が好ましい。光照射によって重合性化合物を重合させる。この重合によって、重合体を含有する組成物が生成する。高分子支持配向型の素子は、このような手順で製造する。

30

【0126】

この手順において、電圧を印加したとき、液晶分子が配向膜および電場の作用によって配向する。この配向に従って重合性化合物の分子も配向する。この状態で重合性化合物が紫外線によって重合するので、この配向を維持した重合体が生成する。この重合体の効果によって、素子の応答時間が短縮される。画像の焼き付きは、液晶分子の動作不良であるから、この重合体の効果によって焼き付きも同時に改善されることになる。なお、組成物中の重合性化合物を予め重合させ、この組成物を液晶表示素子の基板のあいだに配置することも可能であろう。

【0127】

化合物(2)のような重合性基を有する極性化合物(すなわち、重合性化合物)を用いる場合は、素子の基板に配向膜は不要である。配向膜を有しない素子は、2つ前の段落に記載した手順に従って配向膜を有しない基板から製造する。

40

【0128】

この手順において、化合物(2)は、極性基が基板表面と相互作用するので、基板上に配列する。この配列に従って液晶分子が配向される。電圧を印加したとき、液晶分子の配向がさらに促進される。この状態で重合性基が紫外線によって重合するので、この配向を維持した重合体が生成する。この重合体の効果によって、液晶分子の配向が追加的に安定化し、素子の応答時間が短縮される。画像の焼き付きは、液晶分子の動作不良であるから、この重合体の効果によって焼き付きも同時に改善されることになる。

50

【実施例】

【0129】

実施例によって本発明をさらに詳しく説明する。本発明はこれらの実施例によっては制限されない。本発明は、組成物（M1）と組成物（M2）との混合物を含む。本発明は、実施例の組成物の少なくとも2つを混合した混合物をも含む。合成した化合物は、NMR分析などの方法によって同定した。化合物、組成物および素子の特性は、下記の方法によって測定した。

【0130】

NMR分析：測定には、ブルカーバイオスピン社製のDRX-500を用いた。¹H-NMRの測定では、試料をCDCl₃などの重水素化溶媒に溶解させ、測定は、室温で、500MHz、積算回数16回の条件で行った。テトラメチルシランを内部標準として用いた。¹⁹F-NMRの測定では、CFCl₃を内部標準として用い、積算回数24回で行った。核磁気共鳴スペクトルの説明において、sはシングレット、dはダブルレット、tはトリプレット、qはカルテット、quinはクインテット、sexはセクステット、mはマルチプレット、brはブロードであることを意味する。

10

【0131】

ガスクロマト分析：測定には島津製作所製のGC-14B型ガスクロマトグラフを用いた。キャリアーガスはヘリウム（2mL/分）である。試料気化室を280℃に、検出器（FID）を300℃に設定した。成分化合物の分離には、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムDB-1（長さ30m、内径0.32mm、膜厚0.25μm；固定液相はジメチルポリシロキサン；無極性）を用いた。このカラムは、200℃で2分間保持したあと、5℃/分の割合で280℃まで昇温した。試料はアセトン溶液（0.1質量%）に調製したあと、その1μLを試料気化室に注入した。記録計は島津製作所製のC-R5A型Chromatopac、またはその同等品である。得られたガスクロマトグラムは、成分化合物に対応するピークの保持時間およびピークの面積を示した。

20

【0132】

試料を希釈するためにクロロホルム、ヘキサンなどの溶媒を用いてもよい。成分化合物を分離するために、次のキャピラリカラムを用いてもよい。Agilent Technologies Inc.製のHP-1（長さ30m、内径0.32mm、膜厚0.25μm）、Restek Corporation製のRtx-1（長さ30m、内径0.32mm、膜厚0.25μm）、SGE International Pty. Ltd製のBP-1（長さ30m、内径0.32mm、膜厚0.25μm）。化合物ピークの重なりを防ぐ目的で島津製作所製のキャピラリカラムCBP1-M50-025（長さ50m、内径0.25mm、膜厚0.25μm）を用いてもよい。

30

【0133】

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

40

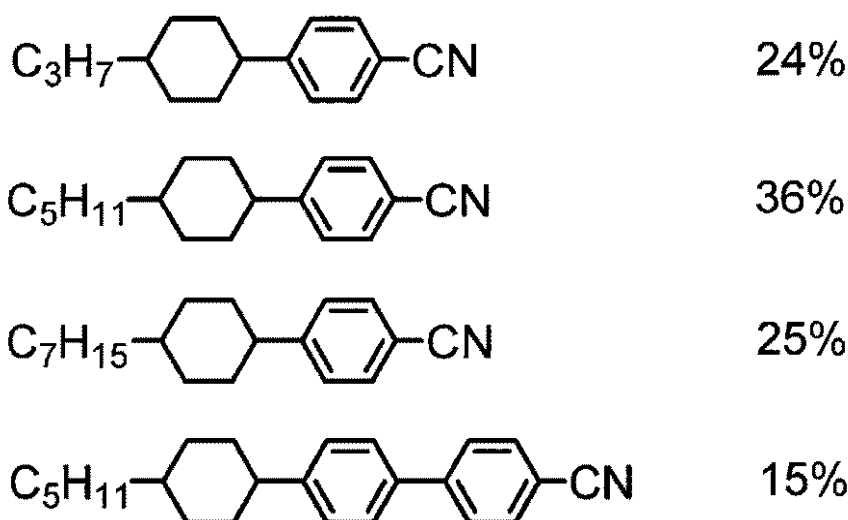
【0134】

測定試料：組成物および素子の特性を測定するときは、組成物をそのまま試料として用いた。化合物の特性を測定するときは、この化合物（15質量%）を母液晶（85質量%）に混合することによって測定用の試料を調製した。測定によって得られた値から外挿法によって化合物の特性値を算出した。（外挿値）＝{（試料の測定値）－0.85×（母液晶の測定値）}／0.15。この割合でスメクチック相（または結晶）が25℃で析出するときは、化合物と母液晶の割合を10質量%：90質量%、5質量%：95質量%、1質量%：99質量%の順に変更した。この外挿法によって化合物に関する上限温度、光学異方性、粘度、および誘電率異方性の値を求めた。

【0135】

下記の母液晶を用いた。成分化合物の割合は質量%で示した。

50



10

【0136】

測定方法：特性の測定は下記の方法で行った。これらの多くは、社団法人電子情報技術産業協会（Japan Electronics and Information Technology Industries Association；J E I T A という）で審議制定される J E I T A 規格（J E I T A ・ E D - 2 5 2 1 B）に記載された方法、またはこれを修飾した方法であった。測定に用いた T N 素子には、薄膜トランジスター（T F T）を取り付けなかった。

20

【0137】

（１）ネマチック相の上限温度（N I；℃）：偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレートに試料を置き、1℃／分の速度で加熱した。試料の一部がネマチック相から等方性液体に変化したときの温度を測定した。ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。

【0138】

（２）ネマチック相の下限温度（T_C；℃）：ネマチック相を有する試料をガラス瓶に入れ、0℃、-10℃、-20℃、-30℃、および-40℃のフリーザー中に10日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が-20℃ではネマチック相のままであり、-30℃では結晶またはスメクチック相に変化したとき、T_Cを<-20℃と記載した。

30

【0139】

（３）粘度（バルク粘度；η；20℃で測定；mPa・s）：測定には東京計器株式会社製の E 型回転粘度計を用いた。

【0140】

（４）粘度（回転粘度；γ₁；25℃で測定；mPa・s）：測定は、M. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。ツイスト角が0°であり、そして2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が5μmである T N 素子に試料を入れた。この素子に16Vから19.5Vの範囲で0.5V毎に段階的に印加した。0.2秒の無印加のあと、ただ1つの矩形波（矩形パルス；0.2秒）と無印加（2秒）の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流（transient current）のピーク電流（peak current）とピーク時間（peak time）を測定した。これらの測定値と M. Imai らの論文、40頁の計算式（8）とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性は、測定（6）に記載された方法で測定した。

40

【0141】

（５）光学異方性（屈折率異方性；Δn；25℃で測定）：測定は、波長589nmの光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッペ屈折計によって行なった。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率n_∥は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率n_⊥は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学異方性の値は、Δn=n_∥-n_⊥、の式から計算した

50

。

【0142】

(6) 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$; 25℃で測定): 2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)が9 μm であり、そしてツイスト角が80度であるTN素子に試料を入れた。この素子にサイン波(10 V、1 kHz)を印加し、2秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率($\epsilon_{\parallel}$)を測定した。この素子にサイン波(0.5 V、1 kHz)を印加し、2秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率($\epsilon_{\perp}$)を測定した。誘電率異方性の値は、 $\Delta \epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 、の式から計算した。

【0143】

(7) しきい値電圧 (V_{th} ; 25℃で測定; V): 測定には大塚電子株式会社製のLCD5100型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)が0.45/ Δn (μm)であり、ツイスト角が80度であるノーマリーホワイトモード(normally white mode)のTN素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧(32 Hz、矩形波)は0 Vから10 Vまで0.02 Vずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときに透過率100%であり、この光量が最小であったときに透過率0%である電圧-透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が90%になったときの電圧で表した。

【0144】

(8) 電圧保持率 ($VHR-1$; 25℃で測定; %): 測定に用いたTN素子はポリイミド配向膜を有し、そして2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)は5 μm であった。この素子は試料を注入したあと紫外線で硬化する接着剤で密閉した。このTN素子にパルス電圧(5 Vで60マイクロ秒)を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で16.7ミリ秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Aを求めた。面積Bは減衰しなかったときの面積であった。電圧保持率は面積Bに対する面積Aの百分率で表した。

【0145】

(9) 電圧保持率 ($VHR-2$; 80℃で測定; %): 25℃の代わりに、80℃で測定した以外は、上記と同じ手順で電圧保持率を測定した。得られた値を $VHR-2$ で表した。

。

【0146】

(10) 電圧保持率 ($VHR-3$; 25℃で測定; %): 紫外線を照射したあと、電圧保持率を測定し、紫外線に対する安定性を評価した。測定に用いたTN素子はポリイミド配向膜を有し、そしてセルギャップは5 μm であった。この素子に試料を注入し、光を20分間照射した。光源は超高圧水銀ランプUSH-500D(ウシオ電機製)であり、素子と光源の間隔は20 cmであった。 $VHR-3$ の測定では、16.7ミリ秒のあいだ減衰する電圧を測定した。大きな $VHR-3$ を有する組成物は紫外線に対して大きな安定性を有する。 $VHR-3$ は90%以上が好ましく、95%以上がさらに好ましい。

【0147】

(11) 電圧保持率 ($VHR-4$; 25℃で測定; %): 試料を注入したTN素子を80℃の恒温槽内で500時間加熱したあと、電圧保持率を測定し、熱に対する安定性を評価した。 $VHR-4$ の測定では、16.7ミリ秒のあいだ減衰する電圧を測定した。大きな $VHR-4$ を有する組成物は熱に対して大きな安定性を有する。

【0148】

(12) 応答時間 (τ ; 25℃で測定; ms): 測定には大塚電子株式会社製のLCD5100型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。ローパス・フィルタ(Low-pass filter)は5 kHzに設定した。2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)が3.5 μm であり、配向膜を有しないFFS素子に試料を入れた。この素子を紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子に、30 Vの電圧を印加しながら78 mW/ cm^2 (405 nm)の紫外線を359秒間(28 J)照射した。紫外線の照射には、アイグラフィッ

10

20

30

40

50

クス株式会社製、紫外硬化用マルチメタルランプM04-L41を用いた。この素子に矩形波(120 Hz)を印加した。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率100%であり、この光量が最小であったときが透過率0%であるとみなした。矩形波の最大電圧は透過率が90%になるように設定した。矩形波の最低電圧は透過率が0%になる2.5 Vに設定した。応答時間は透過率90%から10%に変化するのに要した時間(立ち下がり時間; fall time; ミリ秒)で表した。

【0149】

(13) 弾性定数(K; 25℃で測定; pN): 測定には横河・ヒューレットパッカード株式会社製のHP4284A型LCRメータを用いた。2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)が20 μmである水平配向素子に試料を入れた。この素子に0ボルトから20ボルト電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。測定した静電容量(C)と印加電圧(V)の値を「液晶デバイスハンドブック」(日刊工業新聞社)、75頁にある式(2.98)、式(2.101)を用いてフィッティングし、式(2.99)からK11およびK33の値を得た。次に同171頁にある式(3.18)に、先ほど求めたK11およびK33の値を用いてK22を算出した。弾性定数Kは、このようにして求めたK11、K22、およびK33の平均値で表した。

10

【0150】

(14) 比抵抗(ρ; 25℃で測定; Ωcm): 電極を備えた容器に試料1.0 mLを入れた。この容器に直流電圧(10 V)を印加し、10秒後の直流電流を測定した。比抵抗は次の式から算出した。(比抵抗) = {(電圧) × (容器の電気容量)} / {(直流電流) × (真空の誘電率)}。

20

【0151】

(15) プレチルト角

プレチルト角の測定には、分光エリプソメータM-2000U(J. A. Woollam Co., Inc. 製)を使用した。

【0152】

(16) 配向安定性(液晶配向軸安定性)

液晶表示素子の電極側の液晶配向軸の変化を評価した。ストレス印加前の電極側の液晶配向角度φ(before)を測定し、その後、素子に矩形波4.5 V、60 Hzを20分間印加した後、1秒間ショートし、1秒後および5分後に再び電極側の液晶配向角度φ(after)を測定した。これらの値から、1秒後および5分後の液晶配向角度の変化Δφ(deg.)を次の式を用いて算出した。

30

$$\Delta\phi(\text{deg.}) = \phi(\text{after}) - \phi(\text{before})$$

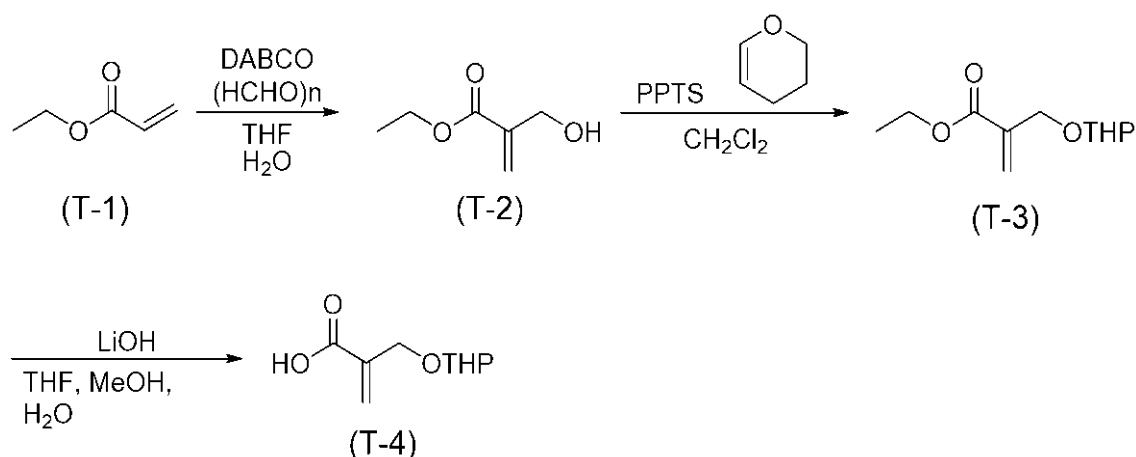
これらの測定はJ. Hilfiker, B. Johs, C. Herzinger, J. F. Elman, E. Montbach, D. Bryant, and P. J. Bos, Thin Solid Films, 455-456, (2004) 596-600を参考に行った。Δφが小さいほうが液晶配向軸の変化率が小さく、液晶配向軸の安定性が良いといえる。

【0153】

[合成例1] 化合物(2-39-1)の合成

まず、化合物(T-4)の合成を説明する。この化合物は、第6工程で反応に用いた。

40



10

【0154】

第1工程

パラホルムアルデヒド (30.0 g)、1,4-ジアザビシクロ[2.2.2]オクタン (DABCO) (56.0 g)、および水 (600 ml) を反応器に入れ、室温で15分間攪拌した。そこへ化合物 (T-1) (50.0 g) の THF (1200 ml) 溶液を滴下し、室温で72時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、酢酸エチルで抽出した。抽出液を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、トルエン：酢酸エチル = 4 : 1) で精製して、化合物 (T-2) (43.2 g ; 65%) を得た。

20

【0155】

第2工程

化合物 (T-2) (30.0 g)、3,4-ジヒドロ-2H-ピラン (23.3 g)、ピリジニウム p-トルエンスルホナート (PPTS) (5.80 g) を反応器に入れ50℃で10時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、ジクロロメタンで抽出した。抽出液を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、ヘプタン：酢酸エチル = 2 : 1) で精製して、化合物 (T-3) (39.5 g ; 80%) を得た。

30

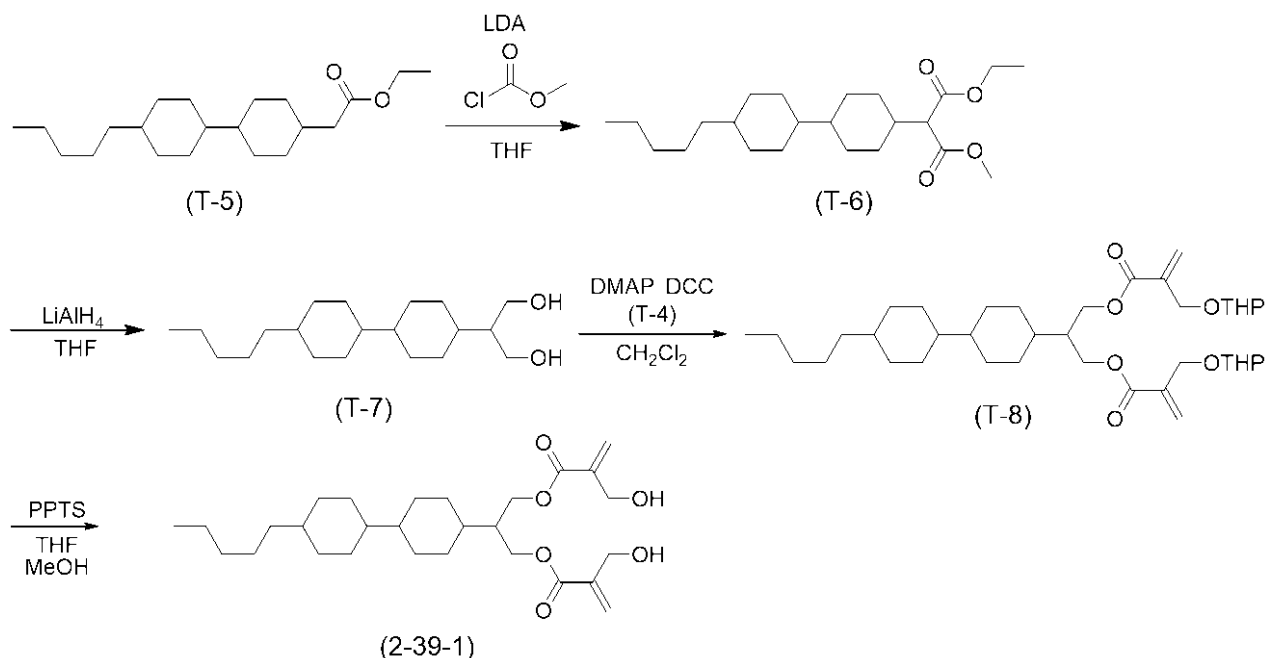
【0156】

第3工程

化合物 (T-3) (39.5 g)、THF (400 ml)、および水 (400 ml) を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへ水酸化リチウム一水和物 (15.4 g) を加え、室温に戻しつつ12時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、6N塩酸 (60 ml) をゆっくりと加え酸性にした後、酢酸エチルで抽出した。抽出液を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮して化合物 (T-4) (32.6 g ; 95%) を得た。

【0157】

次に、化合物 (T-5) から化合物 (2-39-1) を合成する方法を説明する。



10

【0158】

第4工程

化合物 (T-5) (20.0 g) および THF (200 ml) を反応器に入れ、 -70°C に冷却し、リチウムジイソプロピルアミド (LDA) (1.10 M; THF 溶液; 68.0 ml) をゆっくりと滴下し、1時間攪拌した。そこへクロロギ酸メチル (7.00 g) をゆっくりと加え、室温に戻しつつ4時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、トルエンで抽出した。抽出液を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、トルエン:ヘプタン=9:1) で精製して、化合物 (T-6) (19.4 g; 82%) を得た。

20

【0159】

第5工程

水素化リチウムアルミニウム (1.93 g) および THF (200 ml) を反応器に入れ、 0°C に冷却した。そこへ、化合物 (T-6) (19.4 g) の THF (100 ml) 溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ3時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、酢酸エチルで抽出した。抽出液を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、トルエン:酢酸エチル=1:1) で精製して、化合物 (T-7) (6.0 g; 38%) を得た。

30

【0160】

第6工程

化合物 (T-7) (2.0 g)、化合物 (T-4) (2.63 g)、 DMAP (0.78 g)、およびジクロロメタン (100 ml) を反応器に入れ、 0°C に冷却した。そこへ DCC (2.92 g) のジクロロメタン (60 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、ジクロロメタンで抽出した。抽出液を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、トルエン:酢酸エチル=9:1) で精製して、化合物 (T-8) (2.83 g; 68%) を得た。

40

【0161】

第7工程

化合物 (T-8) (2.83 g)、ピリジニウム p-トルエンスルホナート (PPTS) (1.09 g)、 THF (50 ml) およびメタノール (50 ml) を反応器に入れ、 50°C で8時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、酢酸エチ

50

ルで抽出した。抽出液を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝1：1）で精製して、化合物（2-39-1）（1.47 g；70%）を得た。

【0162】

化合物（2-39-1）の¹H-NMR（ppm；CDCl₃）：6.24（s，2H）、5.82（s，2H）、4.35-4.31（m，6H）、4.22-4.19（m，2H）、2.36（s，2H）、1.97-1.91（s，1H）、1.82-1.63（m，8H）、1.43-1.18（m，7H）、1.15-0.79（m，16H）。

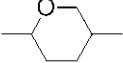
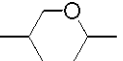
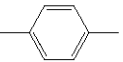
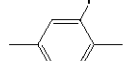
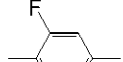
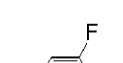
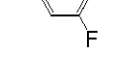
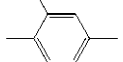
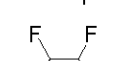
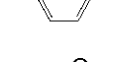
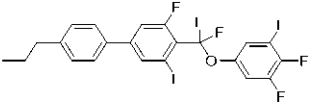
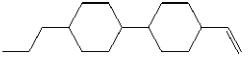
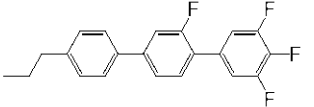
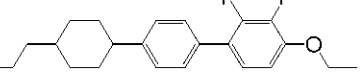
【0163】

組成物の実施例を以下に示す。成分化合物は、下記の表3の定義に基づいて記号によって表した。表3において、1,4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。記号化された化合物の後にあるかっこ内の番号は、化合物が属する化学式を表す。（-）の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合（百分率）は、添加物を含まない液晶組成物の質量に基づいた質量百分率（質量%）である。最後に、組成物の特性値をまとめた。

【0164】

表3 記号を用いた化合物の表記法



1) 左末端基 R-	記号	4) 環構造 -A _n -	記号
C _n H _{2n+1} -	n-		H
C _n H _{2n+1} O-	nO-		Dh
C _m H _{2m+1} OC _n H _{2n} -	mOn-		dh
CH ₂ =CH-	V-		B
C _n H _{2n+1} -CH=CH-	nV-		B(F)
CH ₂ =CH-C _n H _{2n} -	Vn-		B(2F)
C _m H _{2m+1} -CH=CH-C _n H _{2n} -	mVn-		B(F,F)
CF ₂ =CH-	VFF-		B(2F,5F)
CF ₂ =CH-C _n H _{2n} -	VFFn-		B(2F,3F)
F-C _n H _{2n} -	Fn-		G
			ch
2) 右末端基 -R'	記号		
-C _n H _{2n+1}	-n		
-OC _n H _{2n+1}	-On		
-CH=CH ₂	-V		
-CH=CH-C _n H _{2n+1}	-Vn		
-C _n H _{2n} -CH=CH ₂	-nV		
-C _n H _{2n} -CH=CH-C _m H _{2m+1}	-nVm		
-CH=CF ₂	-VFF		
-COOCH ₃	-EMe		
-F	-F		
-Cl	-Cl		
-OCF ₃	-OCF3		
-CF ₃	-CF3		
-CN	-C		
-CF=CH-CF ₃	-FVCF3		
3) 結合基 -Z _n -	記号		
-C ₂ H ₄ -	2		
-COO-	E		
-CH=CH-	V		
-C≡C-	T		
-CF ₂ O-	X		
-OCF ₂ -	x		
-CH ₂ O-	10		
5) 表記例			
例1 3-BB(F,F)XB(F,F)-F		例2 3-HH-V	
			
例3 3-BB(F)B(F,F)-F		例4 3-HBB(2F,3F)-O2	
			

10

20

30

40

50

1. 原料

配向膜を有しない素子に、第一添加物（極性化合物）や第二添加物（重合性化合物）を添加した組成物を注入した。電圧を印加しながら紫外線を照射したあと、この素子における液晶分子の垂直配向を検討した。液晶分子が十分に配向したか否かは、光漏れテストによって判断した。垂直配向が達成された場合には、光漏れが観察されないからである。最初に原料を説明する。原料は、組成物（M1）から（M13）、極性化合物（PC-1）から（PC-31）、重合性化合物（RM-1）から（RM-8）の中から適宜選択した。組成物は以下のとおりであった。

【0166】

組成物（M1）

10

5-HXB (F, F) - F	(1-1)	3 %	
3-HHXB (F, F) - F	(1-2)	6 %	
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(1-4)	6 %	
3-BB (2F, 3F) XB (F, F) - F	(1-4)	4 %	
3-HHB (F, F) XB (F, F) - F	(1-5)	4 %	
3-HBB (2F, 3F) XB (F, F) - F	(1-7)	5 %	
5-BB (F) B (F, F) XB (F) B (F, F) - F	(1-14)	2 %	
3-HH-V	(3-1)	22 %	
3-HH-V1	(3-1)	10 %	
5-HB-O2	(3-2)	5 %	20
3-HHEH-3	(3-4)	3 %	
3-HBB-2	(3-6)	7 %	
5-B (F) BB-3	(3-7)	3 %	
3-HB-CL	(4-1)	3 %	
3-HHB-OCF3	(4-3)	3 %	
3-HGB (F, F) - F	(4-6)	3 %	
3-HB (F) B (F, F) - F	(4-9)	5 %	
3-HHBB (F, F) - F	(4-14)	6 %	

NI = 77. 2 °C ; Tc < -20 °C ; Δn = 0. 101 ; Δε = 5. 8 ; Vth = 1. 88 V ; η = 13. 7 mPa · s ; γ1 = 61. 3 mPa · s .

30

【0167】

組成物（M2）

5-HXB (F, F) - F	(1-1)	6 %	
3-HHXB (F, F) - F	(1-2)	6 %	
2-BB (F) B (F, F) XB (F) - F	(1-10)	3 %	
3-BB (F) B (F, F) XB (F) - F	(1-10)	3 %	
4-BB (F) B (F, F) XB (F) - F	(1-10)	4 %	
2-HH-5	(3-1)	8 %	
3-HH-V	(3-1)	10 %	
3-HH-V1	(3-1)	7 %	40
4-HH-V	(3-1)	10 %	
4-HH-V1	(3-1)	8 %	
5-HB-O2	(3-2)	7 %	
4-HHEH-3	(3-4)	3 %	
V2-BB (F) B-1	(3-8)	3 %	
5-HB-CL	(4-1)	5 %	
V-HB (F) B (F, F) - F	(4-9)	5 %	
3-HHB (F) B (F, F) - F	(4-15)	7 %	
1O1-HBBH-3	(-)	5 %	

NI = 78. 5 °C ; Tc < -20 °C ; Δn = 0. 095 ; Δε = 3. 4 ; Vth = 1. 50

50

50 V ; $\eta = 8.4 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\gamma_1 = 54.2 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

【0168】

組成物 (M3)

3-HHXB (F, F) - F	(1-2)	7 %	
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(1-4)	10 %	
5-HHB (F, F) XB (F, F) - F	(1-5)	6 %	
3-HBB (2F, 3F) XB (F, F) - F	(1-7)	5 %	
2-HH-3	(3-1)	8 %	
3-HH-V	(3-1)	20 %	
3-HH-V1	(3-1)	7 %	10
4-HH-V	(3-1)	6 %	
5-HB-O2	(3-2)	5 %	
V2-B2BB-1	(3-9)	3 %	
3-HHEBH-3	(3-11)	5 %	
3-HHEBH-5	(3-11)	5 %	
3-HHEB (F, F) - F	(4-5)	5 %	
5-HBEB (F, F) - F	(4-10)	5 %	
2-HHB (F) B (F, F) - F	(4-15)	3 %	

$NI = 90.3^\circ\text{C}$; $T_c < -20^\circ\text{C}$; $\Delta n = 0.088$; $\Delta \varepsilon = 5.4$; $V_{th} = 1.$

69 V ; $\eta = 13.7 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\gamma_1 = 60.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

20

【0169】

組成物 (M4)

3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(1-4)	12 %	
3-HBBXB (F, F) - F	(1-7)	3 %	
3-BB (F) B (F, F) XB (F) - F	(1-10)	3 %	
3-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-10)	3 %	
4-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-10)	5 %	
5-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-10)	4 %	
2-HH-3	(3-1)	6 %	
3-HH-5	(3-1)	6 %	30
3-HH-V	(3-1)	25 %	
3-HH-VFF	(3-1)	6 %	
5-HB-O2	(3-2)	7 %	
V-HHB-1	(3-5)	6 %	
V-HBB-2	(3-6)	5 %	
3-HHBB (F, F) - F	(4-14)	5 %	
4-HHBB (F, F) - F	(4-14)	4 %	

$NI = 78.3^\circ\text{C}$; $T_c < -20^\circ\text{C}$; $\Delta n = 0.107$; $\Delta \varepsilon = 7.0$; $V_{th} = 1.$

55 V ; $\eta = 11.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\gamma_1 = 55.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

【0170】

組成物 (M5)

3-HHXB (F, F) - F	(1-2)	6 %	
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(1-4)	8 %	
3-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-10)	3 %	
4-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-10)	6 %	
5-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-10)	5 %	
3-HH-V	(3-1)	30 %	
3-HH-V1	(3-1)	5 %	
3-HHB-O1	(3-5)	2 %	
V-HHB-1	(3-5)	5 %	50

40

2-BB(F)B-3	(3-8)	6%
3-HHBB(F, F)-F	(4-14)	5%
4-HHBB(F, F)-F	(4-14)	4%
F3-HH-V	(-)	15%

NI = 82.0°C; Tc < -20°C; Δn = 0.104; Δε = 5.7; Vth = 1.43V; η = 11.8 mPa·s; γ1 = 62.1 mPa·s.

【0171】

組成物(M6)

3-GB(F, F)XB(F, F)-F	(1-3)	5%	10
3-HGB(F, F)XB(F, F)-F	(1-6)	5%	
2-dhBB(F, F)XB(F, F)-F	(1-8)	4%	20
3-dhB(F, F)B(F, F)XB(F)B(F, F)-F	(1-13)	3%	
3-BB(2F, 5F)B-3	(3)	3%	
2-HH-3	(3-1)	14%	
2-HH-5	(3-1)	4%	
3-HH-V	(3-1)	26%	
1V2-HH-3	(3-1)	5%	
1V2-BB-1	(3-3)	3%	
3-HB(F)HH-2	(3-10)	4%	
5-HBB(F)B-2	(3-13)	6%	
7-HB(F, F)-F	(4-2)	3%	40
3-HGB(F, F)-F	(4-6)	3%	
5-GHB(F, F)-F	(4-7)	4%	
3-BB(F)B(F, F)-CF3	(4-13)	2%	
3-HHBB(F, F)-F	(4-14)	4%	
3-GBB(F)B(F, F)-F	(4-16)	2%	

NI = 78.3°C; Tc < -20°C; Δn = 0.094; Δε = 5.9; Vth = 1.25V; η = 12.8 mPa·s; γ1 = 61.9 mPa·s.

【0172】

組成物(M7)

3-BB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(1-10)	3%	30
4-BB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(1-10)	5%	
3-BB(F, F)XB(F)B(F, F)-F	(1-12)	3%	40
5-BB(F)B(F, F)XB(F)B(F, F)-F	(1-14)	4%	
2-HH-5	(3-1)	8%	
3-HH-V	(3-1)	25%	
3-HH-V1	(3-1)	7%	
4-HH-V1	(3-1)	6%	
5-HB-O2	(3-2)	5%	
7-HB-1	(3-2)	5%	
VFF-HHB-O1	(3-5)	8%	
VFF-HHB-1	(3-5)	3%	
3-HH2BB(F, F)-F	(4)	3%	50
4-HH2BB(F, F)-F	(4)	3%	
3-HBB(F, F)-F	(4-8)	5%	
5-HBB(F, F)-F	(4-8)	4%	
3-BB(F)B(F, F)-F	(4-12)	3%	

NI = 80.0°C; Tc < -20°C; Δn = 0.101; Δε = 4.6; Vth = 1.71V; η = 11.0 mPa·s; γ1 = 47.2 mPa·s.

【0173】

組成物 (M8)

3-BB(F, F)XB(F, F)-F	(1-4)	10%	
3-GB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(1-9)	6%	
5-GB(F, F)XB(F)B(F, F)-F	(1-11)	5%	
5-HBBH-3	(3)	5%	
3-HH-V	(3-1)	30%	
3-HH-V1	(3-1)	10%	
1V2-HH-3	(3-1)	8%	
3-HH-VFF	(3-1)	8%	
V2-BB-1	(3-3)	2%	10
5-HB(F)BH-3	(3-12)	5%	
3-HHB(F, F)-F	(4-4)	8%	
3-GB(F)B(F, F)-F	(4-11)	3%	
NI = 76.6°C; Tc < -20°C; Δn = 0.088; Δε = 5.5; Vth = 1.81V; η = 12.1 mPa·s; γ1 = 60.2 mPa·s.			

【0174】

組成物 (M9)

3-HHB(F, F)XB(F, F)-F	(1-5)	5%	
5-HHB(F, F)XB(F, F)-F	(1-5)	3%	
3-HGB(F, F)XB(F, F)-F	(1-6)	5%	20
3-GB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(1-9)	5%	
4-GB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(1-9)	5%	
2-HH-5	(3-1)	3%	
3-HH-5	(3-1)	5%	
3-HH-V	(3-1)	24%	
4-HH-V	(3-1)	5%	
1V2-HH-3	(3-1)	5%	
3-HHEH-3	(3-4)	5%	
5-B(F)BB-2	(3-7)	3%	
5-B(F)BB-3	(3-7)	2%	30
5-HEB(F, F)-F	(4)	3%	
5-HB-CL	(4-1)	5%	
3-HHB-OCF3	(4-3)	4%	
3-HHEB(F, F)-F	(4-5)	4%	
3-HBEB(F, F)-F	(4-10)	3%	
5-HBEB(F, F)-F	(4-10)	3%	
3-BB(F)B(F, F)-F	(4-12)	3%	
NI = 78.6°C; Tc < -20°C; Δn = 0.091; Δε = 6.8; Vth = 1.52V; η = 15.5 mPa·s; γ1 = 59.3 mPa·s.			

【0175】

組成物 (M10)

3-HHXB(F, F)-F	(1-2)	9%	
3-BB(F, F)XB(F, F)-F	(1-4)	5%	
3-HH-V	(3-1)	25%	
3-HH-V1	(3-1)	10%	
5-HB-O2	(3-2)	10%	
7-HB-1	(3-2)	5%	
V2-BB-1	(3-3)	3%	
3-HHB-1	(3-5)	4%	
1V-HBB-2	(3-6)	5%	50

5-HBB (F) B-2	(3-13)	6%
3-HBB (F, F) -F	(4-8)	3%
3-BB (F) B (F, F) -F	(4-12)	4%
3-BB (F) B (F, F) -CF3	(4-13)	4%
3-GBB (F) B (F, F) -F	(4-16)	3%
4-GBB (F) B (F, F) -F	(4-16)	4%

NI = 79.6 °C ; Tc < -20 °C ; Δn = 0.111 ; Δε = 4.7 ; Vth = 1.86 V ; η = 9.7 mPa · s ; γ1 = 49.9 mPa · s .

【0176】

組成物 (M11)

10

3-BB (F, F) XB (F, F) -F	(1-4)	14%
3-dhB (F, F) B (F, F) XB (F) B (F, F) -F	(1-13)	7%
3-BB (2F, 5F) B-3	(3)	3%
2-HH-5	(3-1)	5%
3-HH-V	(3-1)	30%
3-HH-V1	(3-1)	3%
3-HH-VFF	(3-1)	10%
3-HHB-1	(3-5)	4%
3-HHB-3	(3-5)	5%
3-HHB-O1	(3-5)	3%
3-HHEBH-3	(3-11)	3%
3-HHEBH-4	(3-11)	4%
3-HHEBH-5	(3-11)	3%
7-HB (F, F) -F	(4-2)	6%

20

NI = 82.7 °C ; Tc < -20 °C ; Δn = 0.085 ; Δε = 5.1 ; Vth = 1.70 V ; η = 8.0 mPa · s ; γ1 = 53.9 mPa · s .

【0177】

組成物 (M12)

30

3-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(1-10)	3%
4-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(1-10)	5%
3-BB (F, F) XB (F) B (F, F) -F	(1-12)	3%
5-BB (F) B (F, F) XB (F) B (F, F) -F	(1-14)	4%
2-HH-5	(3-1)	8%
3-HH-V	(3-1)	28%
4-HH-V1	(3-1)	7%
5-HB-O2	(3-2)	2%
7-HB-1	(3-2)	5%
VFF-HHB-O1	(3-5)	8%
VFF-HHB-1	(3-5)	3%
3-HH2BB (F, F) -F	(4)	3%
4-HH2BB (F, F) -F	(4)	3%
3-HBB (F, F) -F	(4-8)	5%
5-HBB (F, F) -F	(4-8)	4%
3-BB (F) B (F, F) -F	(4-12)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(5-14)	2%
2-BB (2F, 3F) B-3	(5-19)	4%

40

NI = 81.9 °C ; Tc < -20 °C ; Δn = 0.109 ; Δε = 4.8 ; Vth = 1.75 V ; η = 13.3 mPa · s ; γ1 = 57.4 mPa · s .

【0178】

組成物 (M13)

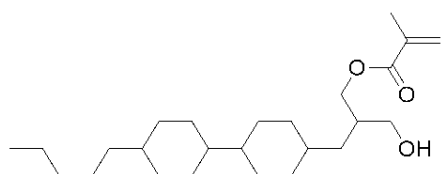
50

5-HHB (F, F) XB (F, F) - F	(1-5)	3 %	
3-HGB (F, F) XB (F, F) - F	(1-6)	4 %	
3-HBBXB (F, F) - F	(1-7)	6 %	
3-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-9)	5 %	
4-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(1-9)	5 %	
3-HH-5	(3-1)	4 %	
3-HH-V	(3-1)	2 1 %	
3-HH-V 1	(3-1)	3 %	
4-HH-V	(3-1)	4 %	
1 V 2-HH-3	(3-1)	6 %	10
5-B (F) BB-2	(3-7)	3 %	
5-B (F) BB-3	(3-7)	2 %	
5-HEB (F, F) - F	(4)	3 %	
5-HB-CL	(4-1)	2 %	
3-HHB-OCF 3	(4-3)	4 %	
3-HHEB (F, F) - F	(4-5)	4 %	
3-HBEB (F, F) - F	(4-10)	3 %	
5-HBEB (F, F) - F	(4-10)	3 %	
3-BB (F) B (F, F) - F	(4-12)	3 %	
3-HB (2 F, 3 F) - O 2	(5-1)	3 %	20
3-BB (2 F, 3 F) - O 2	(5-6)	2 %	
3-HHB (2 F, 3 F) - O 2	(5-8)	4 %	
F 3-HH-V	(-)	3 %	

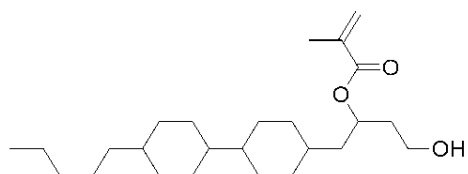
$N I = 78.1^{\circ}C$; $T_c < -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.100$; $\Delta \varepsilon = 6.6$; $V t h = 1.50 V$; $\eta = 16.2 mPa \cdot s$; $\gamma 1 = 61.8 mPa \cdot s$.

【0179】

第一添加物は、極性化合物 (PC-1) から (PC-31) であった。

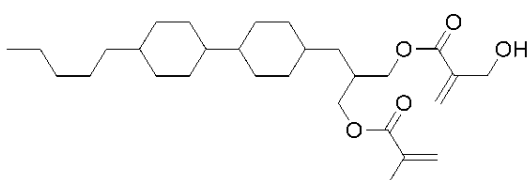


(PC-1)



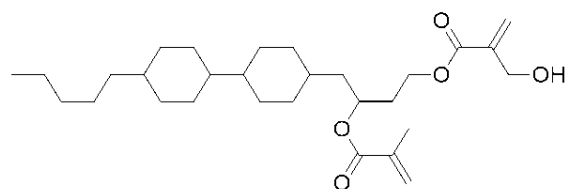
(PC-2)

10

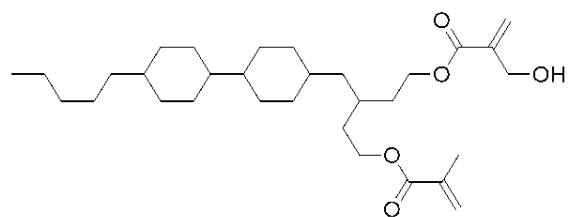


(PC-3)

20

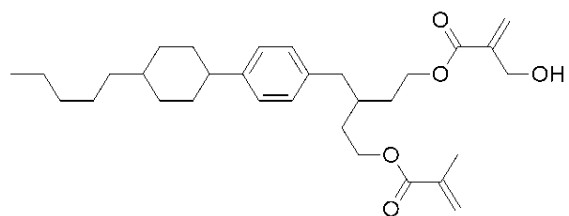


(PC-4)



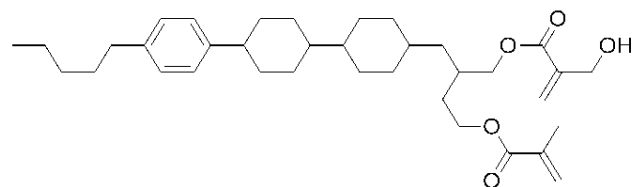
(PC-5)

30



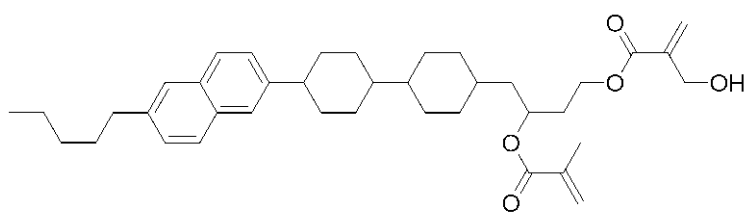
(PC-6)

40

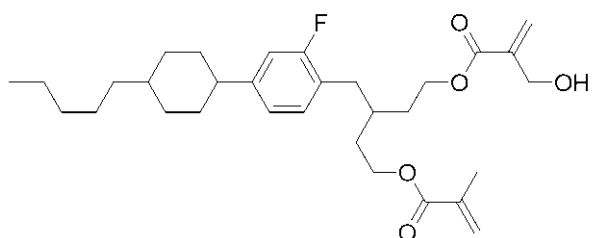


(PC-7)

50

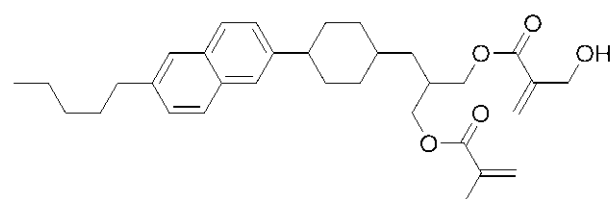


(PC-8)



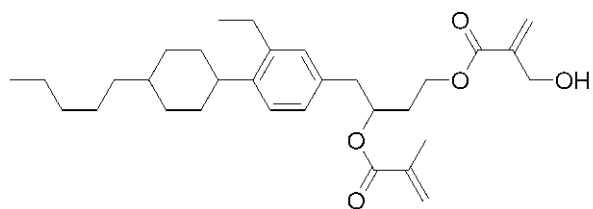
(PC-9)

10



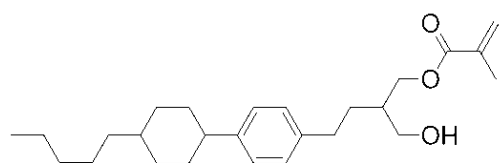
(PC-10)

20

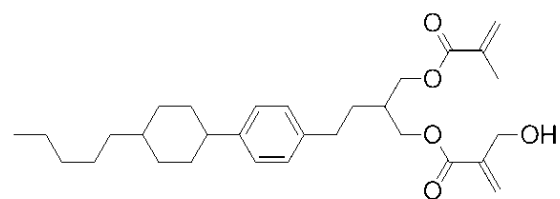


(PC-11)

30

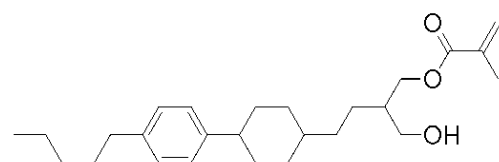


(PC-12)



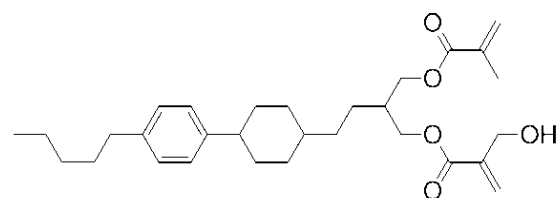
(PC-13)

10



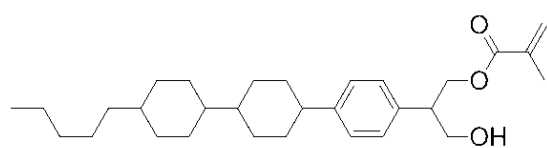
(PC-14)

20

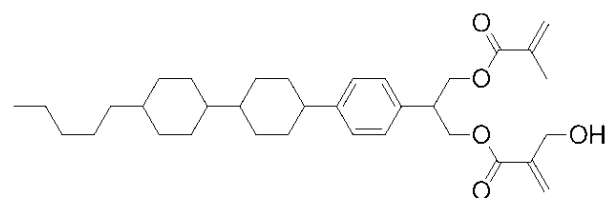


(PC-15)

30

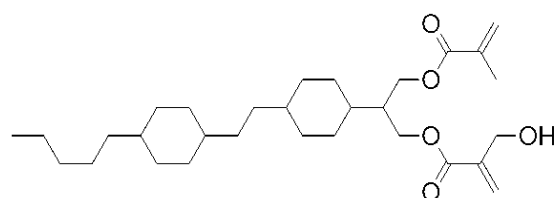


(PC-16)



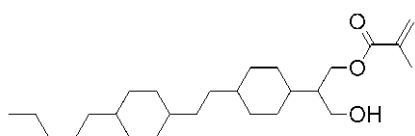
(PC-17)

40

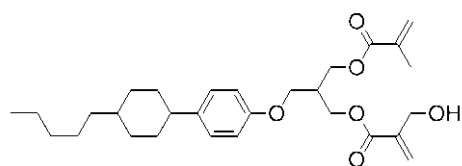


(PC-18)

50

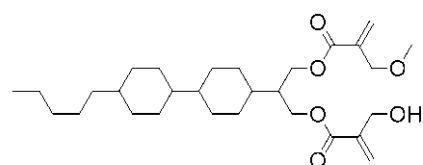


(PC-19)

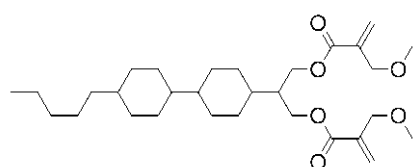


(PC-20)

10

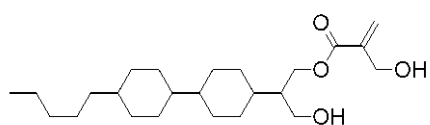


(PC-21)

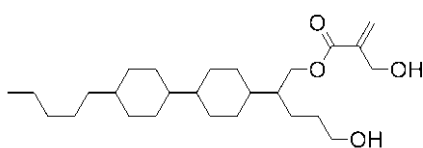


(PC-22)

20

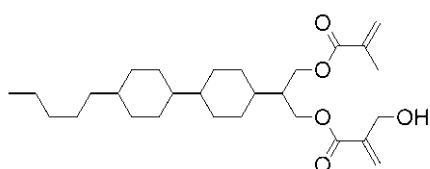


(PC-23)

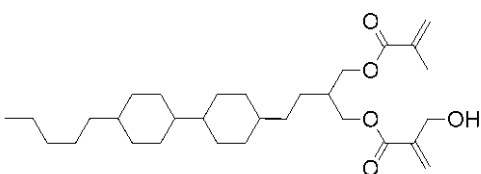


(PC-24)

30

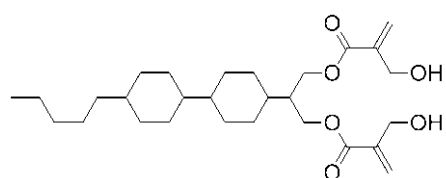


(PC-25)



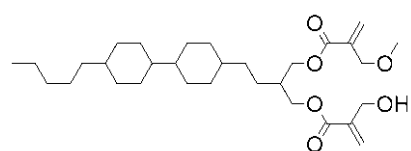
(PC-26)

40

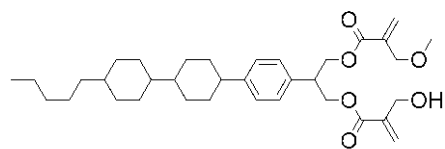


(PC-27)

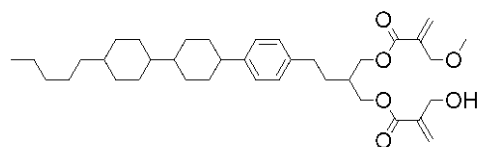
50



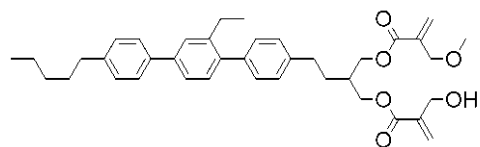
(PC-28)



(PC-29)



(PC-30)

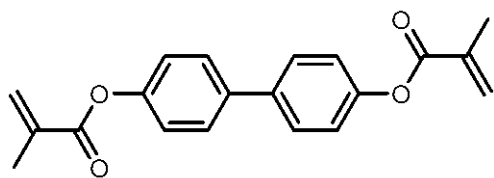


(PC-31)

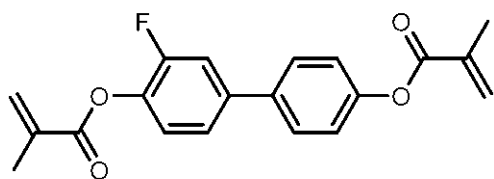
10

【 0 1 8 0 】

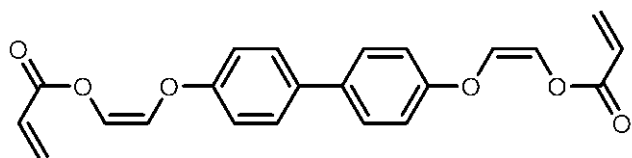
第二添加物は、重合性化合物（RM-1）から（RM-8）であった。



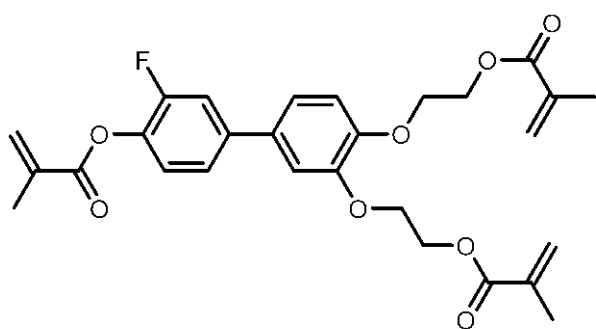
(RM-1)



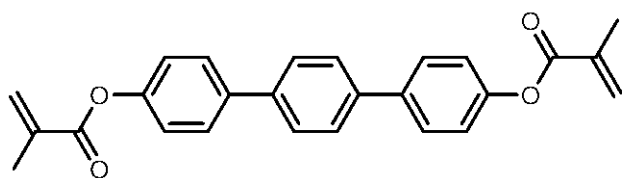
(RM-2)



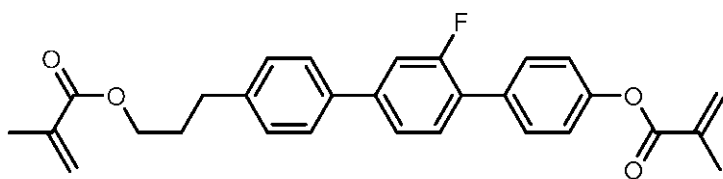
(RM-3)



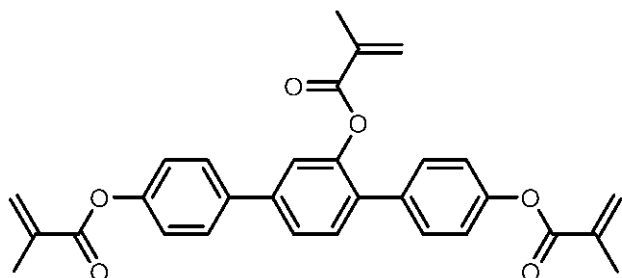
(RM-4)



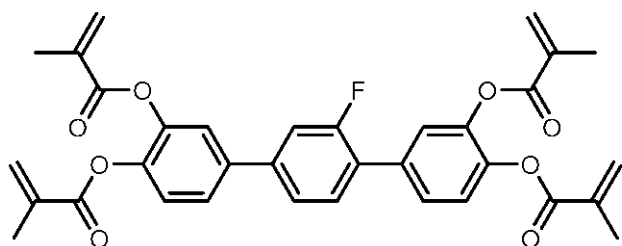
(RM-5)



(RM-6)



(RM-7)



(RM-8)

2. 液晶分子の垂直配向

実施例 1

組成物 (M1) に第一添加物である極性化合物 (PC-1) を 5 質量% の割合で添加した。この混合物を 100 °C のホットステージ上で 2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 4.0 μm である、配向膜を有しない素子に注入した。この素子に電圧を印加しながら超高圧水銀ランプ USH-250-BY (ウシオ電機製) を用いて紫外線を照射 (28 J) することによって、極性化合物 (PC-1) を重合させた。この素子を偏光子と検光子が直交して配置された偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。液晶分子が十分に配向し、光漏れがなかった場合は、垂直配向が「良好」と判断した。光漏れが観察された場合は、配向が「不良」と判断した。

10

【0182】

実施例 2 から 3 1

組成物に重合性基を有する極性化合物を添加して調製した混合物を用いて配向膜を有しない素子を作製した。実施例 1 と同様な方法で光漏れの有無を観察した。結果を表 4 にまとめた。実施例 27 では、0.5 質量% の割合で重合性化合物 (RM-1) をさらに添加した。

【0183】

表4. 分子の垂直配向

実施例	液晶組成物	極性化合物 (5質量%)	重合性化合物 (0.5質量%)	垂直配向
1	M1	PC-1	—	良好
2	M2	PC-2	—	良好
3	M3	PC-3	—	良好
4	M4	PC-4	—	良好
5	M5	PC-5	—	良好
6	M6	PC-6	—	良好
7	M7	PC-7	—	良好
8	M8	PC-8	—	良好
9	M9	PC-9	—	良好
10	M10	PC-10	—	良好
11	M11	PC-11	—	良好
12	M12	PC-12	—	良好
13	M13	PC-13	—	良好
14	M1	PC-14	—	良好
15	M2	PC-15	—	良好
16	M3	PC-16	—	良好
17	M4	PC-17	—	良好
18	M5	PC-18	—	良好
19	M6	PC-19	—	良好
20	M7	PC-20	—	良好
21	M8	PC-21	—	良好
22	M9	PC-22	—	良好
23	M10	PC-23	—	良好
24	M11	PC-24	—	良好
25	M12	PC-25	—	良好
26	M13	PC-26	—	良好
27	M1	PC-27	RM-1	良好
28	M2	PC-28	—	良好
29	M3	PC-29	—	良好
30	M4	PC-30	—	良好
31	M5	PC-31	—	良好

【0184】

表4から分かるように、実施例1から31では、組成物や極性化合物の種類を変えたが、光漏れは観察されなかった。この結果は、素子に配向膜がなくても、液晶分子が垂直配向していることを示している。実施例27では、重合性化合物（RM-1）をさらに添加したが、同様な結果が得られた。

【産業上の利用可能性】

【0185】

本発明の液晶組成物は、液晶モニター、液晶テレビなどに用いることができる。

フロントページの続き

(51)Int.Cl.	F I		テーマコード (参考)	
<i>C 0 9 K 19/42 (2006.01)</i>	C 0 9 K	19/42		
<i>C 0 9 K 19/12 (2006.01)</i>	C 0 9 K	19/12		
<i>C 0 9 K 19/14 (2006.01)</i>	C 0 9 K	19/14		
<i>C 0 9 K 19/32 (2006.01)</i>	C 0 9 K	19/32		
<i>G 0 2 F 1/13 (2006.01)</i>	G 0 2 F	1/13	5 0 0	
<i>G 0 2 F 1/1337 (2006.01)</i>	G 0 2 F	1/1337	5 2 0	
<i>C 0 9 K 19/38 (2006.01)</i>	C 0 9 K	19/38		

F ターム (参考)	4H027	BA01	BD01	BD02	BD03	BD04	BD05	BD08	BD10	BD20	BE05
		CD01	CD03	CD05	CE01	CE03	CE05	CG05	CK05	CM01	CM03
		CM04	CM05	CP05	CQ01	CQ03	CQ05	CR05	CT01	CT03	CT05
		CU05	CW01	CW03	CX01	CX03	DH05	DM05	DP05		