



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I608080 B

(45)公告日：中華民國 106 (2017) 年 12 月 11 日

(21)申請案號：103103614

(22)申請日：中華民國 103 (2014) 年 01 月 29 日

(51)Int. Cl. : *C09K19/12 (2006.01)* *C09K19/18 (2006.01)*
C09K19/20 (2006.01) *C09K19/30 (2006.01)*
C09K19/32 (2006.01) *C09K19/34 (2006.01)*
G02F1/1333 (2006.01)

(71)申請人：達興材料股份有限公司 (中華民國) DAXIN MATERIALS CORPORATION (TW)
 臺中市西屯區科園一路 15 號

(72)發明人：游蕙如 YU, HUI JU (TW)；王俊智 WANG, CHUN CHIH (TW)；羅致遠 LO, CHIH YUAN (TW)

(74)代理人：蔡坤財；李世章

(56)參考文獻：

US 6475595B1

US 2010/0237285A1

審查人員：呂易理

申請專利範圍項數：7 項 圖式數：6 共 54 頁

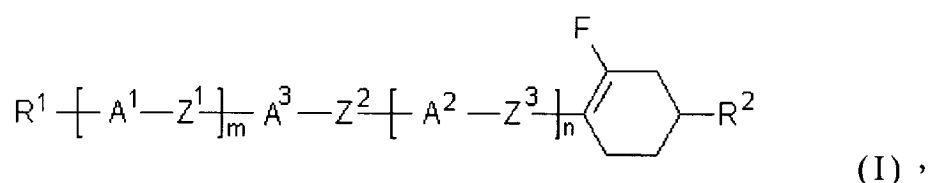
(54)名稱

液晶化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件

LIQUID CRYSTAL COMPOUND, LIQUID CRYSTAL COMPOSITION AND LIQUID CRYSTAL DISPLAY DEVICE HAVING THEREOF

(57)摘要

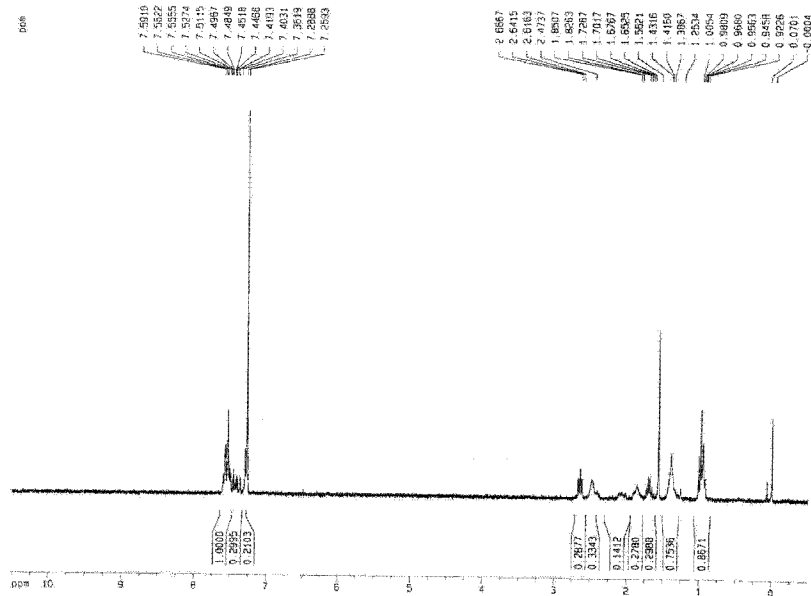
一種液晶化合物，其具有如式(I)所示之一結構：



其中 R^1 、 R^2 、 A^1 、 A^2 、 A^3 、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 m 與 n 的定義係如內文所定義，此液晶化合物具有高光學異向性以及廣向列相溫度範圍，藉此，有利於液晶化合物的保存及擴大其應用範圍。

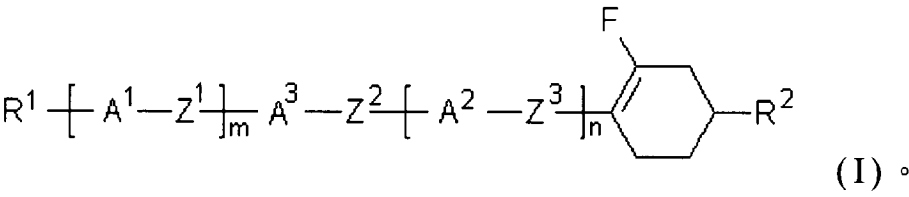
A liquid crystal compound has a structure of formula (I), wherein R^1 、 R^2 、 A^1 、 A^2 、 A^3 、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 m and n are defined in the specification. The liquid crystal compound is featured with high optical anisotropy and wide temperature range of nematic phase. It is favorable for preserving the liquid crystal compound and broadening the application thereof.

指定代表圖：



第 1 圖

特徵化學式：



發明專利說明書

【發明名稱】(中文/英文)

液晶化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件

LIQUID CRYSTAL COMPOUND, LIQUID CRYSTAL
COMPOSITION AND LIQUID CRYSTAL DISPLAY
DEVICE HAVING THEREOF

【技術領域】

【0001】 本發明是有關於一種液晶化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件，且特別是有關於一種具有高光學異向性、高澄清點、廣向列相溫度範圍以及較佳低溫儲存性的液晶化合物、液晶組成物以及包含液晶組成物之液晶顯示元件。

【先前技術】

【0002】 液晶顯示元件(liquid crystal display device)為利用液晶光電變化之顯示元件，其具有體積小、重量輕、低電力消耗與顯示品質佳等優點，因此近年來已成為市場主流。

【0003】 液晶顯示元件中包含有液晶組成物，液晶組成物係包含一種以上之液晶化合物，為提升液晶顯示元件的性能，液晶化合物應具有以下特性：(1)化學性質與物理性質穩定；(2)具有較高的澄清點(向列相至液相的相變溫度)；(3)向列相的下限溫度較低；(4)與其他液晶化合物之相溶性優異；(5)具有較大之介電異向性；(6)具有相對高的光學異向性。

【0004】 當液晶顯示元件中包含化學性質與物理性質穩定的液晶化合物，可提高電壓保持率。當使用具有較高澄清點及向列相下限溫度較低的液晶化合物，可擴寬向列相的溫度範圍，而使液晶顯示元件的使用溫度範圍變大，進而擴大液晶顯示元件的應用範圍。當使用與其他液晶化合物之相溶性優異的液晶化合物，可提升液晶組成物的性質。由於單一液晶化合物難以具備上述所有特點，因此液晶組成物通常包含一種以上之液晶化合物，當液晶化合物彼此間的相溶性越高，有利於液晶組成物的均勻性與穩定性。當使用具有較大之介電異向性的液晶化合物，有助於降低臨界電壓，臨界電壓較低可提升液晶顯示元件的對比度、顯示容量與響應速度。當使用具有較高的光學異向性的液晶化合物，有助於提升對比度。已知構成液晶顯示元件之單元厚度(d)與液晶組合物的光學異向性(Δn)的乘積值為固定時，當光學異向性(Δn)較大時，所使用的液晶顯示元件之單元厚度(d)可以較小。適當的乘積值取決於運作模式的種類，例如，以扭轉向列(Twisted nematic, TN)運作的液晶顯示元件，適當的乘積值約為 $0.45\mu\text{m}$ 。由於響應速度與單元厚度的平方成反比，在維持固定乘積值與兼顧響應速度的情況下，可使用具有較高的光學異向性的液晶化合物。

【0005】 如何改變液晶化合物的分子結構，使液晶化合物具備上述性質，以進一步改善液晶顯示元件的品質，係相關業者努力的目標。

可被 -N- 取代，且 1,4-伸苯基中任意一個氫原子可被氟原子取代，1,4-伸環己基中任意一個或任意兩個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O- 或 -S- 取代，且 1,4-伸環己基中任意一個氫原子可被氟原子取代。

【0012】 A³ 為



其中 L 為氫原子或氟原子。

【0013】 Z¹、Z² 與 Z³ 係各自獨立為單鍵、-O-、-CO-、-COO-、-C≡C-、-CH=CH-、-CH₂CH₂-、-CF₂CF₂-、-CF=CH-、-CH=CF-。m 為 1 或 2。n 為 0、1 或 2，且當 Z¹ 為單鍵時，n ≠ 0。

【0014】 依據本發明之一態樣之另一實施方式是在提供一種液晶組成物，其包含前述之液晶化合物。

【0015】 依據本發明之一態樣之又一實施方式是在提供一種液晶顯示元件，其包含前述之液晶組成物。

【圖式簡單說明】

【0016】

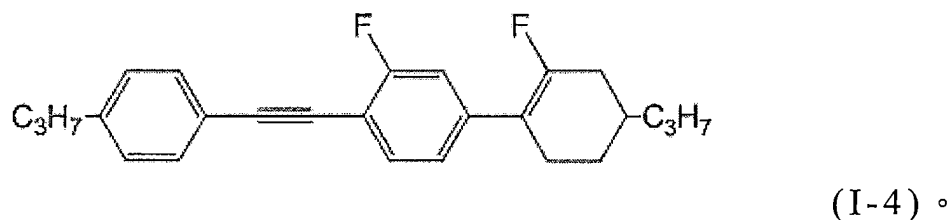
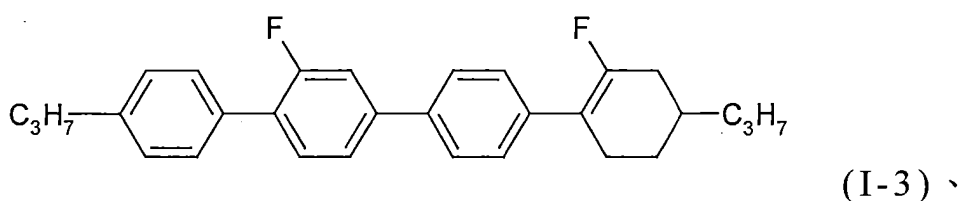
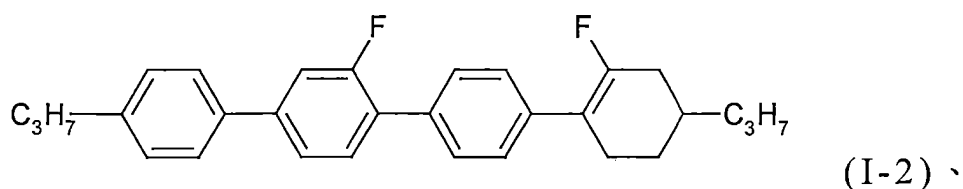
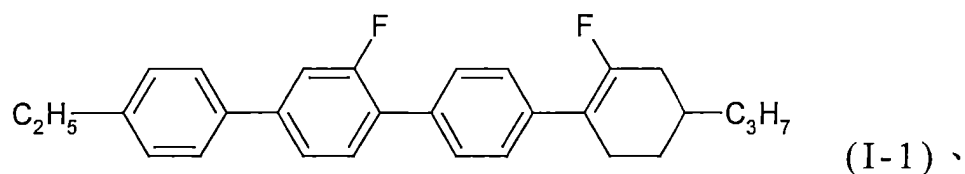
第 1 圖係液晶化合物 (I-2) 之 ¹H-NMR 光譜圖。

第 2 圖係液晶化合物 (I-1) 之 ¹H-NMR 光譜圖。

第 3 圖係液晶化合物 (I-3) 之 ¹H-NMR 光譜圖。

第 4 圖係液晶化合物 (I-4) 之 ¹H-NMR 光譜圖。

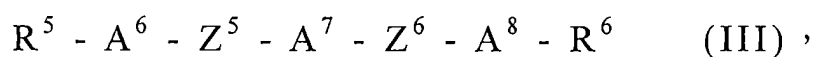
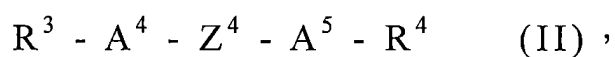
第 5 圖係液晶化合物 (R-1) 之 ¹H-NMR 光譜圖。



液晶組成物

【0026】 本發明之液晶組成物包含前述結構如式(I)之液晶化合物。

【0027】 前述之液晶組成物可更包含結構如式(II)、式(III)及式(IV)所示之化合物之至少一者：



【0028】 其中， R^3 、 R^5 與 R^7 係各自獨立為碳數 1 至 15 的烷基或碳數 2 至 15 的烯基， R^3 、 R^5 與 R^7 中任意一個或多個-H 可被 -F、-CF₃、-CF₂H 取代，且 R^3 、 R^5 與 R^7 中任意一個

或多個不相鄰的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-$ 或 $-\text{O}-\text{COO}-$ 取代。 R^4 、 R^6 與 R^8 係各自獨立為氫、鹵素、碳數 1 至 15 的烷基或碳數 2 至 15 的烯基， R^4 、 R^6 與 R^8 中任意一個或多個 $-\text{H}$ 可被 $-\text{F}$ 、 $-\text{CF}_3$ 或 $-\text{CF}_2\text{H}$ 取代，且 R^4 、 R^6 與 R^8 中任意一個或多個不相鄰的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-$ 或 $-\text{O}-\text{COO}-$ 取代。 A^4 、 A^5 、 A^6 、 A^7 、 A^8 、 A^9 、 A^{10} 、 A^{11} 與 A^{12} 係各自獨立為 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基、1,3-伸環戊基或 2,5-茛滿基，其中 1,4-伸環己基中任意一個或多個不相鄰的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 取代，且 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基、1,3-伸環戊基與 2,5-茛滿基中任意一個或多個氫原子可被氟原子取代。 Z^4 、 Z^5 、 Z^6 、 Z^7 、 Z^8 與 Z^9 係各自獨立為單鍵、雙鍵、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_4-$ 、 $-\text{C}_4\text{H}_8-$ 、 $-\text{CF}_2-\text{CF}_2-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{O}-\text{CO}-$ 。前述之液晶組成物可更包含結構如式(II)、式(III)及式(IV)所示之化合物之至少一者，係指液晶組成物可僅包含結構如式(II)、式(III)及式(IV)所示之化合物之其中一種，亦可同時包含二種或者二種以上。

【0029】 前述液晶組成物中，可更選擇性地包含添加劑，該添加劑可選自由表一所示之摻雜劑之其中一者或表二所示之安定劑之其中一者。

表一

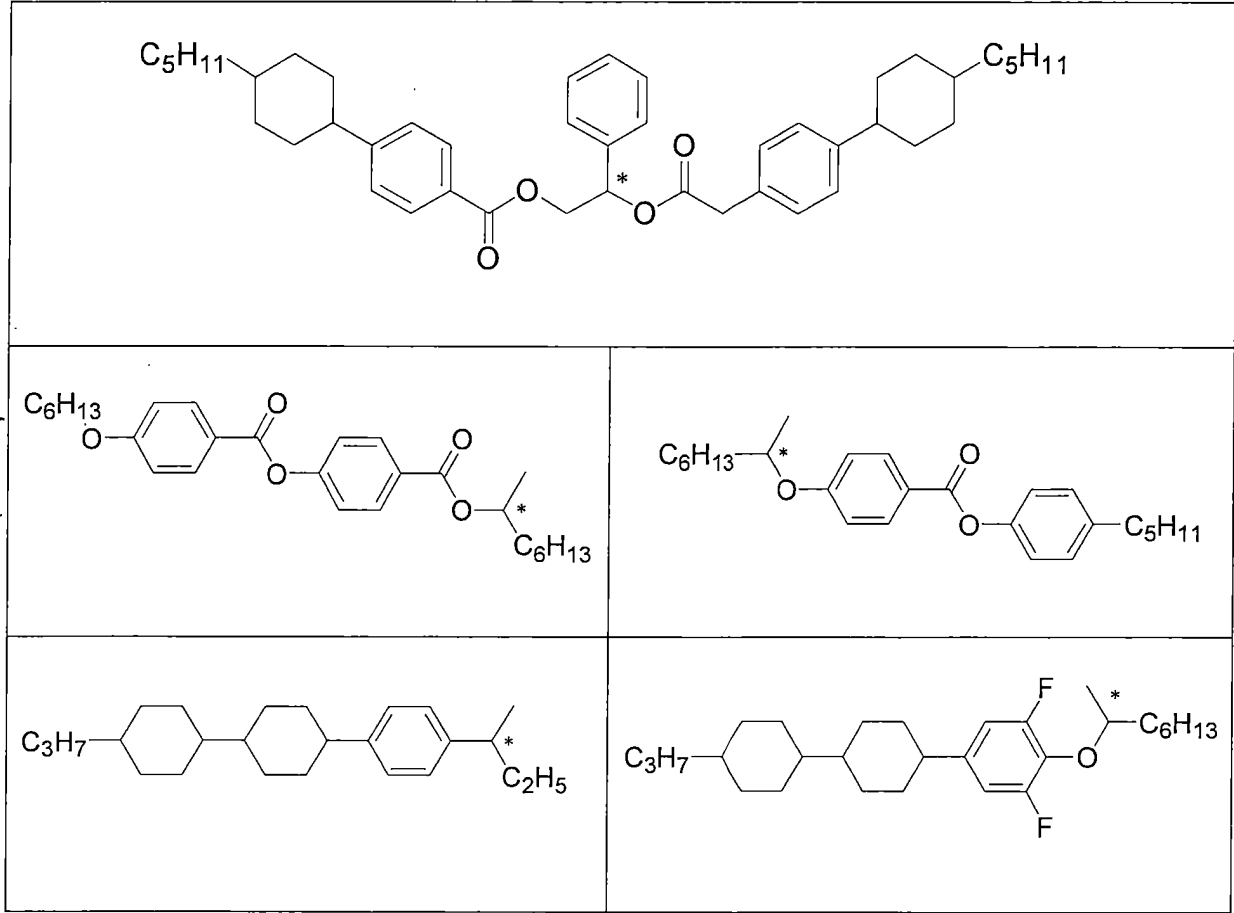


表 二	
註：R ⁹ 至 R ¹¹ 係各自獨立為碳數 1 至 12 的烷基	

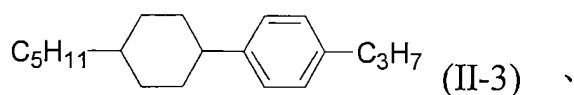
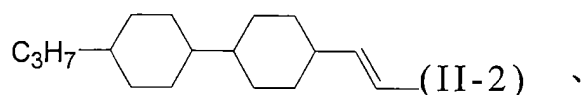
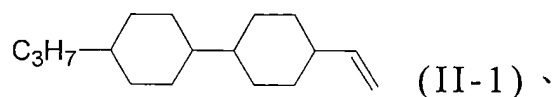
【0030】 前述液晶組成物中，基於液晶組成物的含量為 100

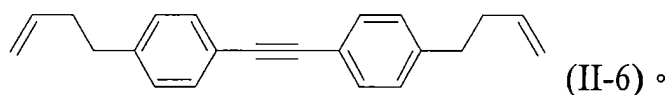
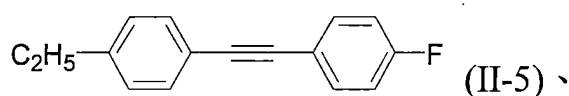
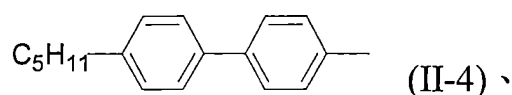
重量百分比，液晶組成物可包含 0.1 重量百分比至 10 重量百分比的結構如式(I)之液晶化合物，5 重量百分比至 50 重量百分比的式(II)化合物，15 重量百分比至 50 重量百分比的式(III)化合物以及 1 重量百分比至 50 重量百分比的式(IV)化合物。較佳地，基於液晶組成物的含量為 100 重量百分比，液晶組成物可包含 0.1 重量百分比至 10 重量百分比的結構如式(I)之液晶化合物，15 重量百分比至 50 重量百分比的式(II)化合物，20 重量百分比至 50 重量百分比的式(III)化合物以及 1 重量百分比至 35 重量百分比的式(IV)化合物。更佳地，基於液晶組成物的含量為 100 重量百分比，液晶組成物可包含 0.1 重量百分比至 10 重量百分比的結構如式(I)之液晶化合物，20 重量百分比至 50 重量百分比的式(II)化合物，25 重量百分比至 50 重量百分比的式(III)化合物以及 10 重量百分比至 31 重量百分比的式(IV)化合物。

【0031】 依據本發明一實施方式，前述液晶組成物中， R^3 、 R^5 與 R^7 可各自獨立為碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基， R^3 、 R^5 與 R^7 中任意一個或多個 -H 可被 -F、-CF₃、-CF₂H 取代，且 R^3 、 R^5 與 R^7 中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O-、-CO-、-COO-、-O-CO- 或 -O-COO- 取代。 R^4 、 R^6 與 R^8 可各自獨立為氫、鹵素、碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基， R^4 、 R^6 與 R^8 中任意一個或多個 -H 可被 -F、-CF₃ 或 -CF₂H 取代，且 R^4 、 R^6 與 R^8 中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O-、-CO-、-COO-、-O-CO- 或 -O-COO- 取代。 A^4 、 A^5 、 A^6 、 A^7 、 A^8 、 A^9 、 A^{10} 、 A^{11} 與 A^{12} 可各自獨立為 1,4-

伸環己基、1,4-伸苯基或 2,5-茚滿基，其中 1,4-伸環己基中任意一個或多個不相鄰的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 取代，且 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基與 2,5-茚滿基中任意一個或多個氫原子可被氟原子取代。 Z^4 、 Z^5 、 Z^6 、 Z^7 、 Z^8 與 Z^9 可各自獨立為單鍵、雙鍵、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_4-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{O}-\text{CO}-$ 。

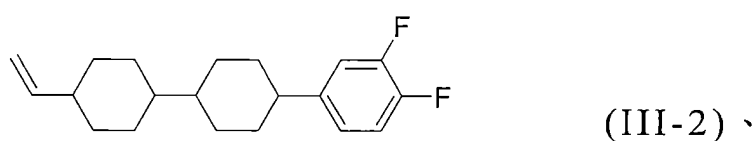
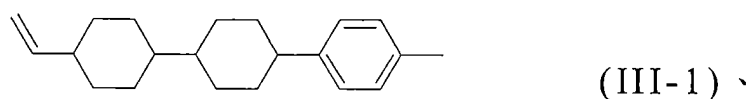
【0032】依據本發明另一實施方式，前述液晶組成物中，式 (II) 化合物中的 R^3 可為碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基， R^4 可為氫、鹵素、碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基，其中， R^3 與 R^4 中任意一個或多個 $-\text{H}$ 可被 $-\text{F}$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{H}$ 取代，且 R^3 與 R^4 中任意一個或多個不相鄰的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-$ 或 $-\text{O}-\text{COO}-$ 取代。 A^4 與 A^5 可各自獨立為 1,4-伸環己基或 1,4-伸苯基，其中 1,4-伸環己基中任意一個或多個不相鄰的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 取代，且 1,4-伸環己基與 1,4-伸苯基中任意一個或多個氫原子可被氟原子取代。 Z^4 可為單鍵、雙鍵、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_4-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{O}-\text{CO}-$ 。例如，式 (II) 化合物可為但不限於結構如式 (II-1) 及式 (II-6) 所示之化合物：

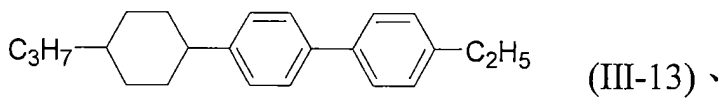
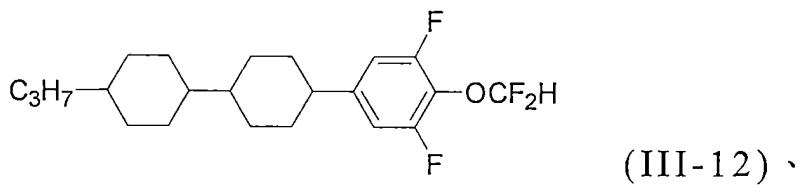
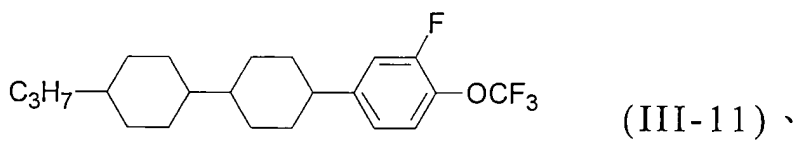
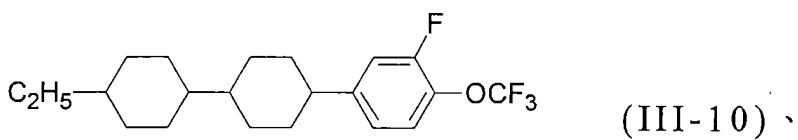
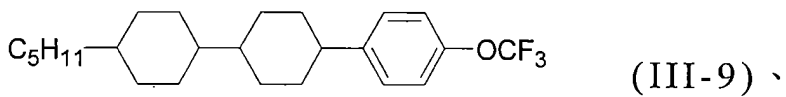
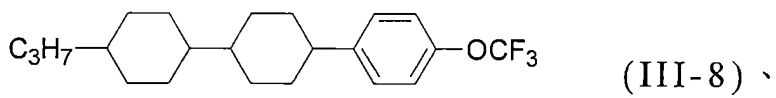
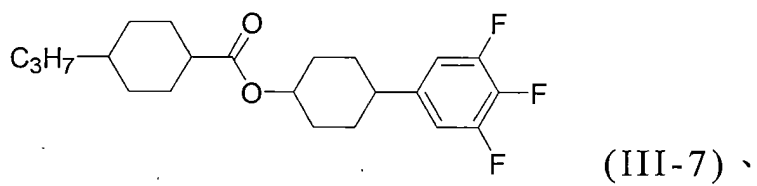
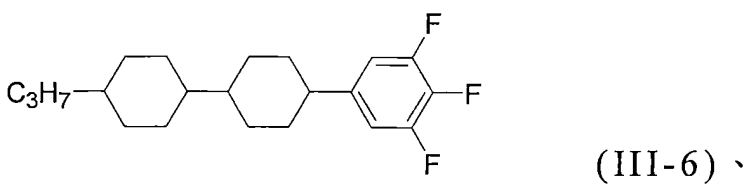
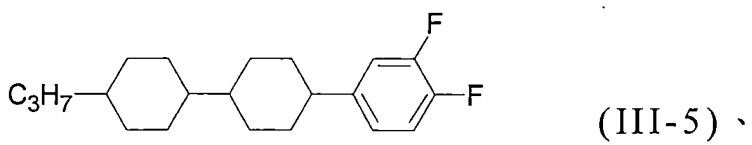
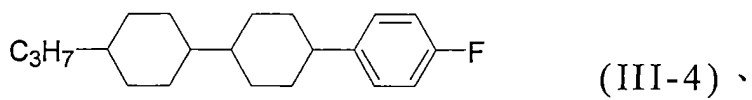
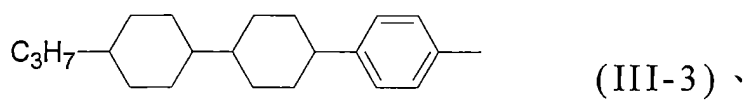


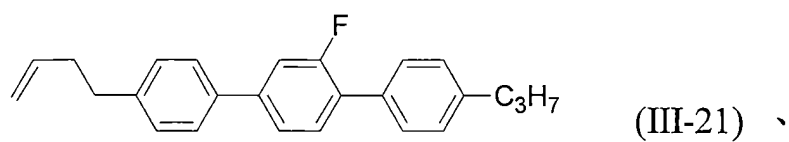
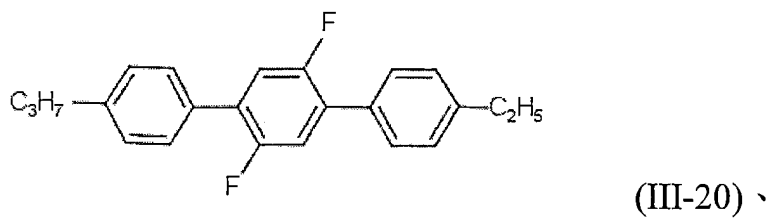
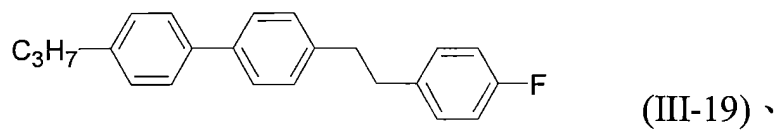
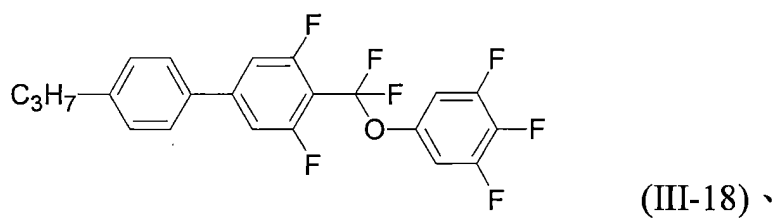
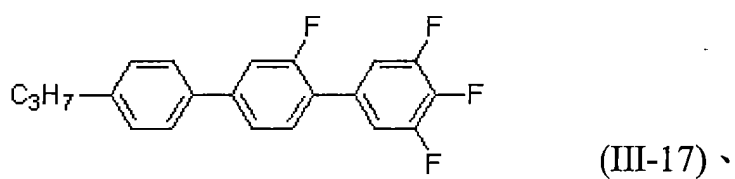
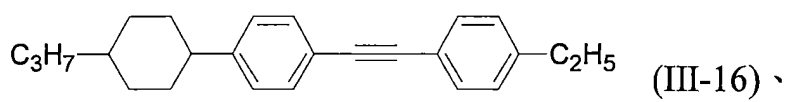
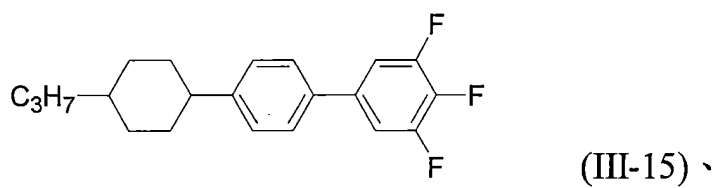
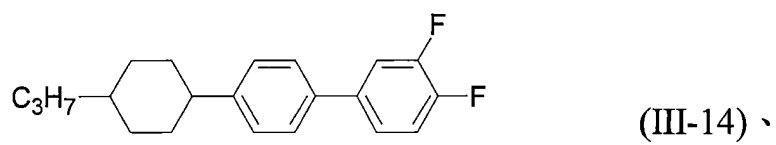


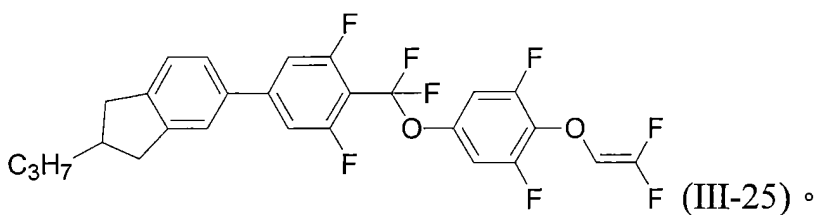
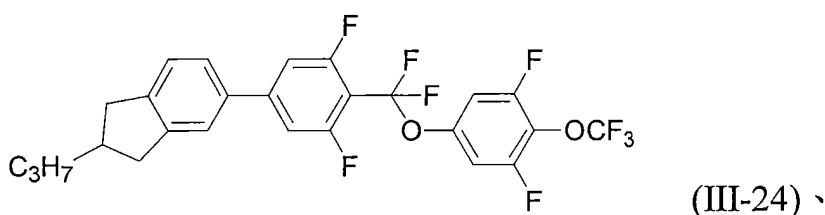
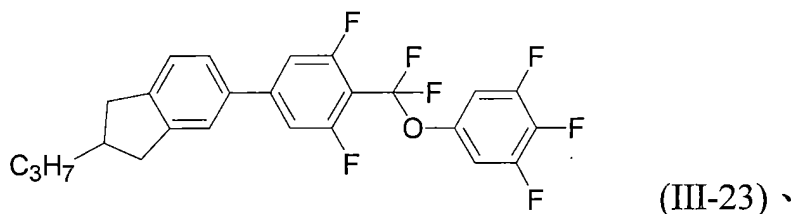
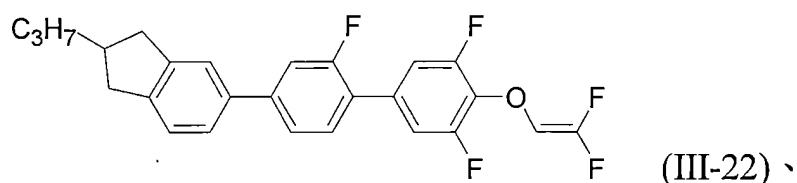
【0033】 上述式(II-1)至式(II-6)所示之化合物可單獨使用，亦可同時使用兩種以上。

【0034】 依據本發明再一實施方式，前述液晶組成物中，式(III)化合物中的 R^5 可為碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基， R^6 可為氫、鹵素、碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基，其中， R^5 與 R^6 中任意一個或多個 -H 可被 -F、-CF₃、-CF₂H 取代，且 R^5 與 R^6 中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O-、-CO-、-COO-、-O-CO- 或 -O-COO- 取代。 A^6 、 A^7 與 A^8 可各自獨立為 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基或 2,5-茚滿基，其中 1,4-伸環己基中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O- 取代，且 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基與 2,5-茚滿基中任意一個或多個氫原子可被氟原子取代。 Z^5 與 Z^6 可各自獨立為單鍵、雙鍵、-CH₂O-、-OCH₂-、-C₂H₄-、-C=C-、-C≡C-、-CF₂O-、-COO- 或 -O-CO-。例如，式(III)化合物可為但不限於結構如式(III-1)至式(III-25)所示之化合物：





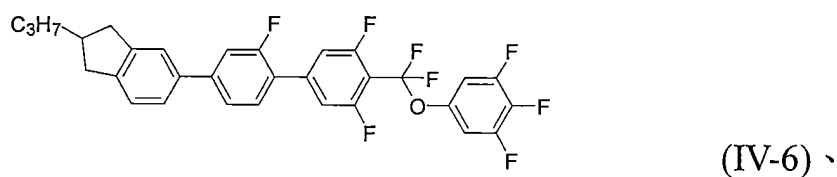
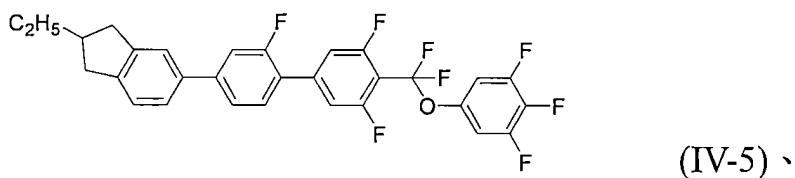
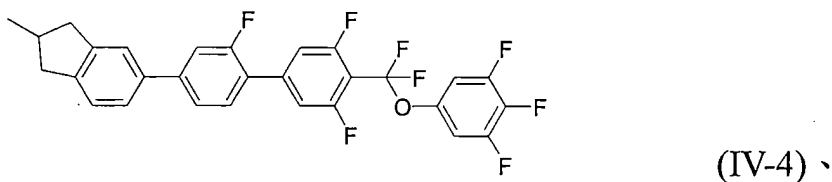
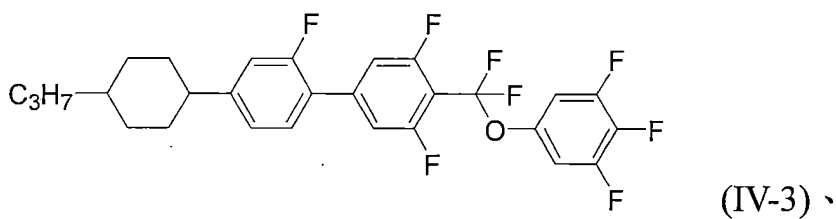
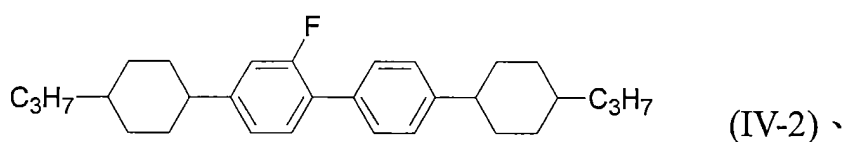
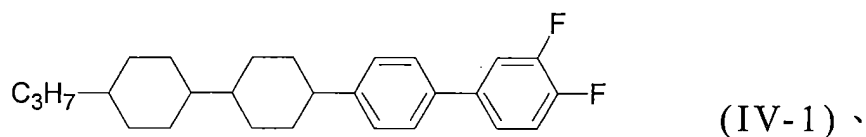


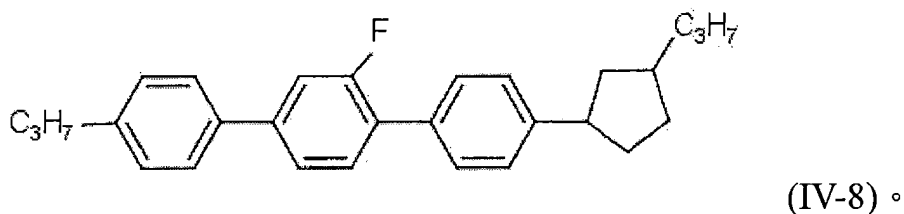
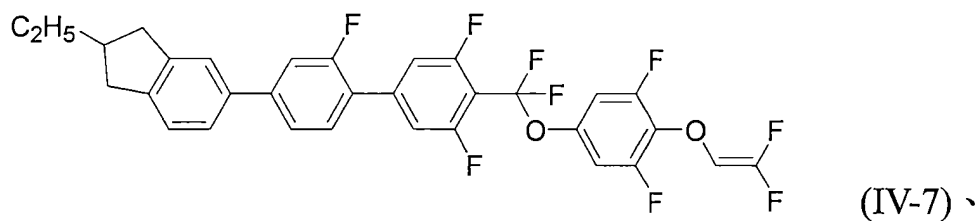


【0035】 上述式(III-1)至式(III-25)所示之化合物可單獨使用，亦可同時使用兩種以上。

【0036】 依據本發明再一實施方式，前述液晶組成物中，式(IV)化合物中的 R^7 可為碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基， R^8 可為氫、鹵素、碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基，其中， R^7 與 R^8 中任意一個或多個 -H 可被 -F、-CF₃、-CF₂H 取代，且 R^7 與 R^8 中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O-、-CO-、-COO-、-O-CO- 或 -O-COO- 取代。 A^9 、 A^{10} 、 A^{11} 與 A^{12} 可各自獨立為 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基、1,3-伸環戊基或 2,5-茚滿基，其中 1,4-伸環己基中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O- 取代，且 1,4-伸環己基、1,4-伸

苯基、1,3-伸環戊基或 2,5-茚滿基中任意一個或多個氫原子可被氟原子取代。 Z^7 、 Z^8 與 Z^9 可各自獨立為單鍵、雙鍵、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_4-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{O}-\text{CO}-$ 。例如，式(IV)化合物可為但不限於結構如式(IV-1)至式(IV-8)所示之化合物：





【0037】 上述式 (IV-1) 至式 (IV-8) 所示之化合物可單獨使用，亦可同時使用兩種以上。

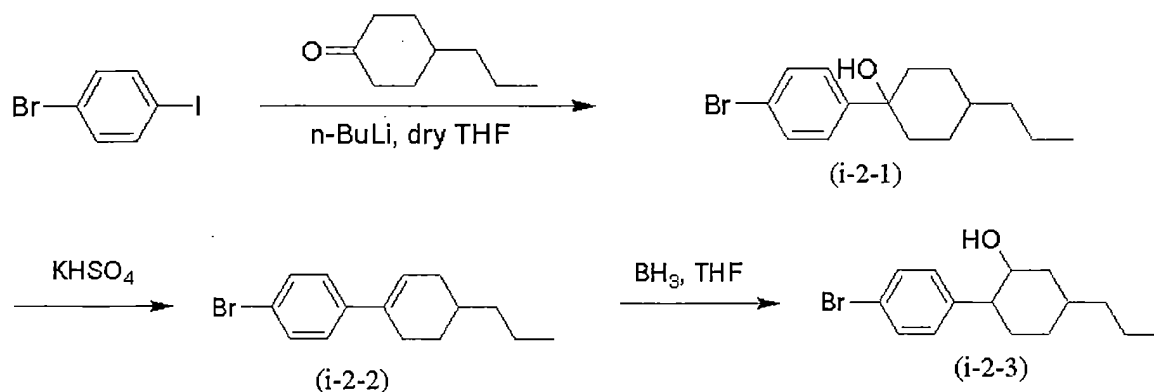
液晶顯示元件

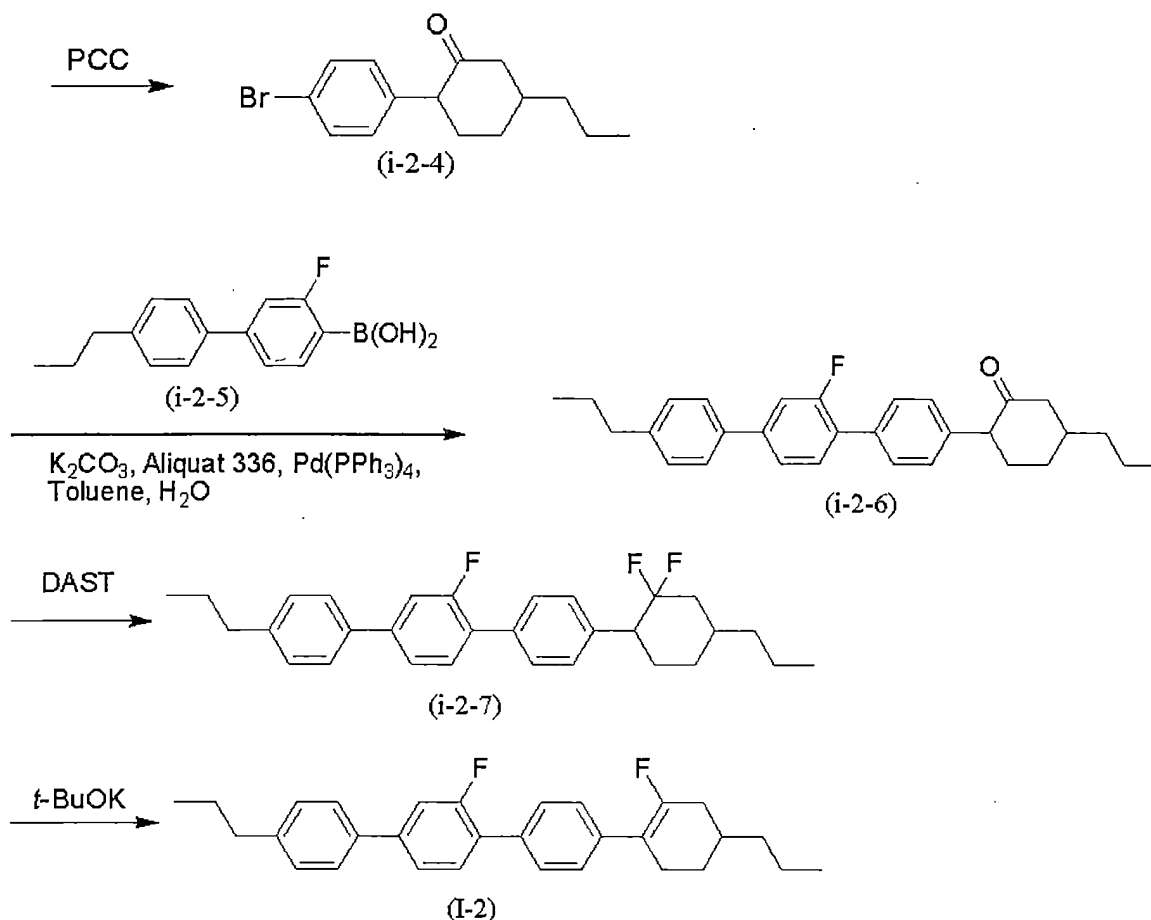
【0038】 本發明之液晶顯示元件包含前述之液晶組成物。關於液晶顯示元件的結構與製造方法係習用，在此不與贅述。

液晶化合物之製備方法

<式 (I-2) 之液晶化合物之製備方法>

【0039】 式 (I-2) 之液晶化合物可利用合成流程 1 所示之製備方法而得到：





合成流程 1

【0040】 合成流程 1 中化合物 (i-2-1) 的製備方法如下：將 10 克 (35 mmol) 的 1-溴-4-碘苯 (1-bromo-4-iodobenzene) 用無水四氫呋喃 (dry THF) 溶解後，置於乾燥 250mL 雙頸瓶中，在氮氣環境和低溫 -78°C 下，將 17mL (42 mmol) 的正丁基鋰 (n-BuLi) 緩慢注射進雙頸瓶中，低溫下反應一小時後，再將 5 克 (35 mmol) 的 4-丙基環己基酮 (4-propylcyclohexanone) 緩慢注入，反應一小時。反應完全後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 8 克化合物 (i-2-1)，產率 76%。

【0041】 合成流程 1 中化合物(i-2-2)的製備方法如下：將 8 克(27 mmol)化合物(i-2-1)置於 250mL 雙頸瓶中，加入 0.5 克硫酸氫鉀(KHSO_4)，在 110°C 下反應五小時。反應完成後，抽氣過濾除去固體，收集濾液，以減壓濃縮儀除去溶劑，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 6 克化合物(i-2-2)，產率 80%。

【0042】 合成流程 1 中化合物(i-2-3)的製備方法如下：將 0.5 克(1.7 mmol)化合物(i-2-2)置於 100mL 雙頸瓶中，在氮氣環境下，以無水四氫呋喃溶解後，在 0°C 下用針筒緩慢注入 3.6mL、1M 之 BH_3/THF (BH_3 溶解於四氫呋喃中， BH_3 的含量為 3.6 mmol)，在 0°C 下反應一小時，待反應回到室溫後反應一小時，用針筒緩慢注入 2 mL 乙醇後，加熱迴流反應三十分鐘，用針筒緩慢注入 3M、2mL 氫氧化鈉水溶液，再注入 30 wt%、1mL H_2O_2 ，持續加熱迴流兩小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，先以正己烷將未反應的化合物(i-2-2)沖出，再用乙酸乙酯將產物，即化合物(i-2-3)沖出。

【0043】 合成流程 1 中化合物(i-2-4)的製備方法如下：將化合物(i-2-3)用二氯甲烷溶解，緩慢加入溶解於二氯甲烷的 0.5 克氯鉻酸吡啶鹽(Pyridinium Chlorochromate, PPC)，加熱迴流反應 14 小時。反應完成後，以二氯甲烷和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，先以正己烷將未反應的化合物(i-2-3)沖出，再用沖提液比例為乙

酸乙酯：正己烷為 1：10 將產物，即化合物(i-2-4)沖出。

【0044】 合成流程 1 中化合物(i-2-6)的製備方法如下：將 0.9 克(3 mmol)的化合物(i-2-4)、0.78 克(3 mmol)的化合物(i-2-5)、1.26 克(9 mmol)的碳酸鉀(K_2CO_3)和 0.5 毫升的界面活性劑氯化甲基三辛基銨(Aliquat 336)置入 250mL 雙頸瓶中，以 50 毫升甲苯(Toluene)和 10 毫升蒸餾水溶解後，在氮氣環境下，加入 0.1 克(0.09 mmol)的四(三苯基膦)鉀(Tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0), $Pd(PPh_3)_4$)，在 90℃ 下，反應 14 小時。反應完成後，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 1.1 克化合物(i-2-6)，產率 84%。

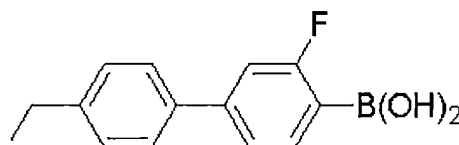
【0045】 合成流程 1 中化合物(i-2-7)的製備方法如下：將 1.1 克(2.5 mmol)的化合物(i-2-6)溶解於二氯甲烷中，在氮氣環境下，緩慢滴入二乙胺基三氟化硫(Diethylaminosulfur trifluoride, DAST)，在 50℃ 下加熱迴流反應 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和 5%氫氧化鉀水溶液萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 0.8 克化合物(i-2-7)，產率 71%。

【0046】 反應方程式 1 中化合物(I-2)的製備方法如下：將 0.8 克(1.7 mmol)的化合物(i-2-7)溶解於四氫呋喃中，加入 0.45 克(4 mmol)的叔丁醇鉀(potassium tert-butoxide, t-BuOK)，加熱迴流反應 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，

除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷，得 0.2 克的式 (I-2) 的液晶化合物，產率 27%。請參照第 1 圖，其係液晶化合物 (I-2) 之 $^1\text{H-NMR}$ 光譜圖，由第 1 圖可確認液晶化合物 (I-2) 的結構無誤。

<式(I-1)之液晶化合物之製備方法>

【0047】 式(I-1)之液晶化合物與式(I-2)之液晶化合物之製備方法差異在於製備化合物(i-2-6)時，將其中的 0.78 克(3 mmol)的化合物(i-2-5)置換為 0.75 克(3 mmol)的化合物(i-1-5)，其他製備方法皆與式(I-2)之液晶化合物相同。化合物(i-1-5)結構如下：

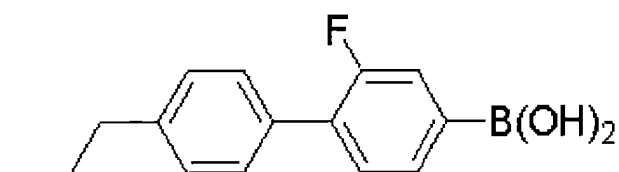


(i-1-5)

請參照第 2 圖，其係液晶化合物 (I-1) 之 $^1\text{H-NMR}$ 光譜圖，由第 2 圖可確認液晶化合物 (I-1) 的結構無誤。

<式(I-3)之液晶化合物之製備方法>

【0048】 式(I-3)之液晶化合物與式(I-2)之液晶化合物之製備方法差異在於製備化合物(i-2-6)時，將其中的 0.78 克(3 mmol)的化合物(i-2-5)置換為 0.78 克(3 mmol)的化合物(i-3-5)，其他製備方法皆與式(I-2)之液晶化合物相同。化合物(i-3-5)結構如下：

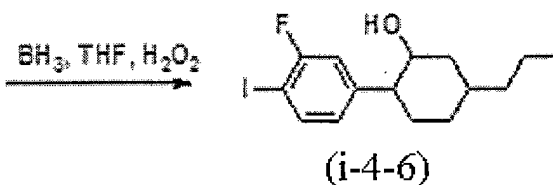
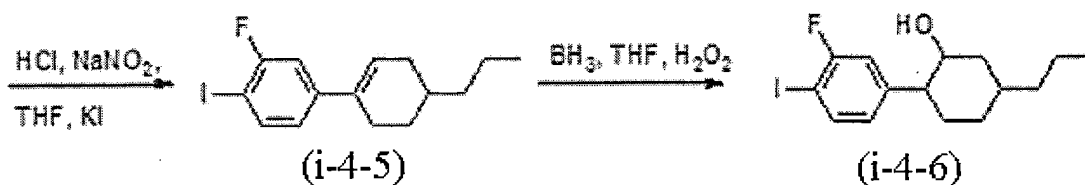
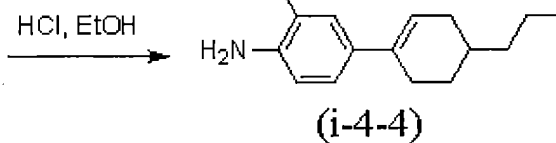
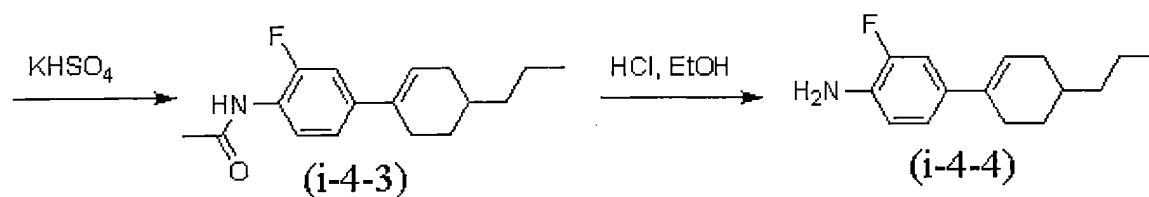
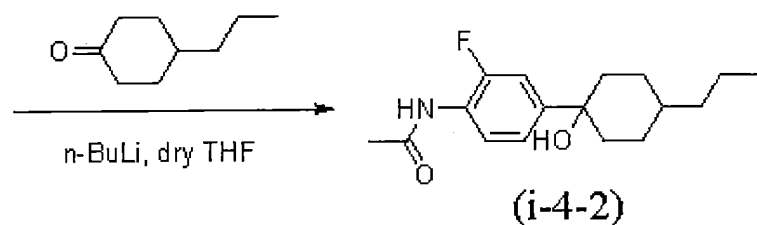
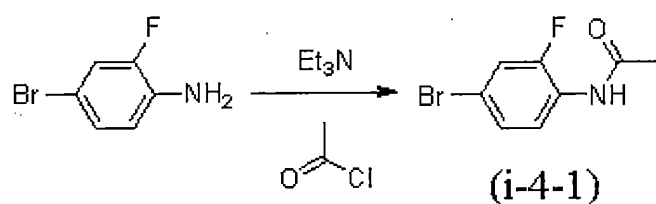


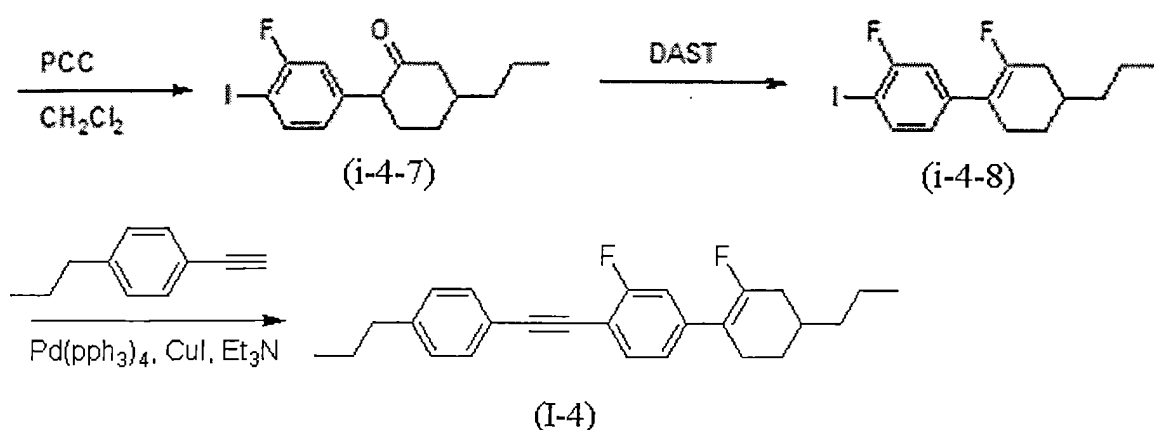
(i-3-5)

請參照第 3 圖，其係液晶化合物 (I-3) 之 $^1\text{H-NMR}$ 光譜圖，
由第 3 圖可確認液晶化合物 (I-3) 的結構無誤。

<式 (I-4) 之液晶化合物之製備方法>

【0049】 式 (I-4) 之液晶化合物可利用合成流程 2 所示之製備方法而得到：





合成流程 2

【0050】 合成流程 2 中化合物(i-4-1)的製備方法如下：將 15 克 (78.9 mmol) 的 4- 溴 -2- 氟 苯 胺 (4-bromo-2-fluorobenzenamine) 溶解於 150mL 的三乙胺 (triethylamine, Et_3N)，在冰浴下緩慢滴加入 15mL (236.8 mmol)的乙醯氯(acetyl chloride)，在冰浴下反應 1 小時，反應完全後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去大部分溶劑後，加入正己烷洗去不純物，抽氣過濾收集固體。得淡黃色固體的化合物 (i-4-1)13.7 克，產率 74.8%。

【0051】 合成流程 2 中化合物(i-4-2)的製備方法如下：將 10 克(43.0 mmol)化合物(i-4-1)用無水四氫呋喃溶解後，置於乾燥 250mL 雙頸瓶中，在氮氣環境和低溫下，將 3.5mL、2.5M 正丁基鋰(86.1 mmol)緩慢注射進雙頸瓶中，低溫下反應一小時後，再將 6.6 克(47.3 mmol)的 4-丙基環己基酮 (4-propylcyclohexanone)緩慢注入，反應一小時。反應完全後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後

收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為乙酸乙酯與正己烷混合液，比例為 1：3，除去未反應的化合物(i-4-1)後，改變沖提液為乙酸乙酯，將得到深褐色液體，直接進行下一步驟。

【0052】 合成流程 2 中化合物(i-4-3)的製備方法如下：將上一步驟得到的化合物(i-4-2)置於 250mL 雙頸瓶中，加入 3 克的硫酸氫鉀(KHSO_4)，在 110°C 下反應五小時。反應完成後，抽氣過濾除去固體，收集濾液，以減壓濃縮儀除去溶劑，再以管柱層析法純化，沖提液為乙酸乙酯與正己烷混合液，比例為 1：3。得 2.5 克化合物(i-4-3)，產率 21%。

【0053】 合成流程 2 中化合物(i-4-4)的製備方法如下：將 2.5 克(9 mmol)的化合物(i-4-3)溶解於乙醇(EtOH)中，緩慢加入鹽酸，加熱迴流 3 小時，反應完成後，讓反應回到室溫，緩慢加入氫氧化鈉水溶液直到反應呈中性或是弱鹼，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，得 2 克深褐色液體，產率 95%。

【0054】 合成流程 2 中化合物(i-4-5)的製備方法如下：將 1.27 克(5.46 mmol)的化合物(i-4-4)溶解於 30 mL 四氫呋喃中，緩慢滴加入 25 mL 鹽酸，在 0°C 時，緩慢滴加入溶於蒸餾水中的 0.75 克(10.9 mmol)的亞硝酸鈉，在 0°C 下反應 1 小時後，在 0°C 下緩慢滴加入溶於蒸餾水中的 1.8 克 (10.9 mmol)的碘化鉀，反應 1 小時後，在室溫下加入 5mL 飽和硫代硫酸鈉水溶液，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法

純化，沖提液為正己烷。得透明液體 0.64 克，產率 35%。

【0055】 合成流程 2 中化合物(i-4-6)的製備方法如下：將 1.8 克(5.2 mmol)化合物(i-4-5)置於 50mL 雙頸瓶中，在氮氣環境下，以無水四氫呋喃溶解後，在 0℃ 下用針筒緩慢注入 30mL、1M 的 BH_3/THF ，在室溫下反應 3 小時，用針筒緩慢注入 3M、10mL 氫氧化鈉水溶液，再注入 30 wt%、7mL H_2O_2 ，持續加熱迴流 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，先以正己烷將未反應的化合物(i-4-5)沖出，再用乙酸乙酯將產物沖出。得黃色液體，直接進行下一步驟。

【0056】 合成流程 2 中化合物(i-4-7)的製備方法如下：將化合物(i-4-6)用 20 mL 二氯甲烷溶解，緩慢加入溶解於二氯甲烷的 2 克的氯鉻酸吡啶鹽(Pyridinium Chlorochromate, PPC)，加熱迴流反應 5 小時。反應完成後，以矽藻土(Celite)進行快速管柱層析法純化，以二氯甲烷和乙酸乙酯做為沖提液。以減壓濃縮儀除去溶劑，得到褐色液體，直接進行下一步驟。

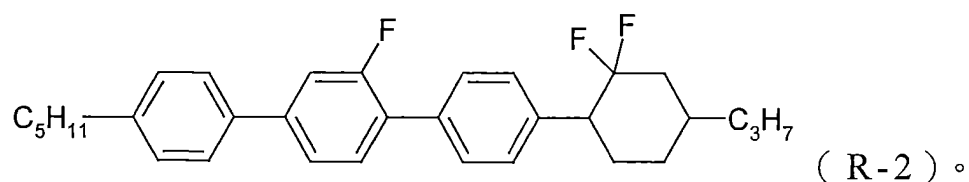
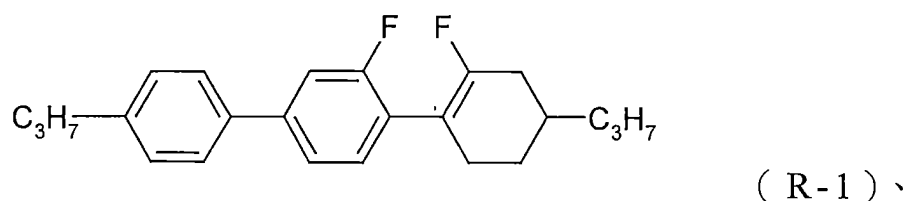
【0057】 合成流程 2 中化合物(i-4-8)的製備方法如下：將化合物(i-4-7)溶解於二氯甲烷中，在氮氣環境下，緩慢滴入 2mL 的二乙胺基三氟化硫(Diethylaminosulfur trifluoride, DAST)，在 50℃ 下加熱迴流反應 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和 5%氫氧化鉀水溶液萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提

液為正己烷。得 0.3 克化合物(i-4-8)，產率 15%。

【0058】 合成流程 2 中化合物(I-4)的製備方法如下：將 0.3 克(0.82 mmol)的化合物(i-4-8)溶解於三乙胺(Et_3N)中，除氧氣(degas)後，在氮氣環境下，加入 0.01 克碘化銅(0.033 mmol)和 0.03 克 (0.016 mmol) 的四 (三 苯 基 磷) 鈀 (Tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$)，最後再加入 0.13 克 (0.91 mmol) 的 1-乙炔基-4-丙基苯 (1-ethynyl-4-propylbenzene)，在 90°C 下，反應 14 小時。反應完成後，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 0.03 克最終產物，產率 9%。請參照第 4 圖，其係液晶化合物 (I-4) 之 $^1\text{H-NMR}$ 光譜圖，由第 4 圖可確認液晶化合物 (I-4) 的結構無誤。

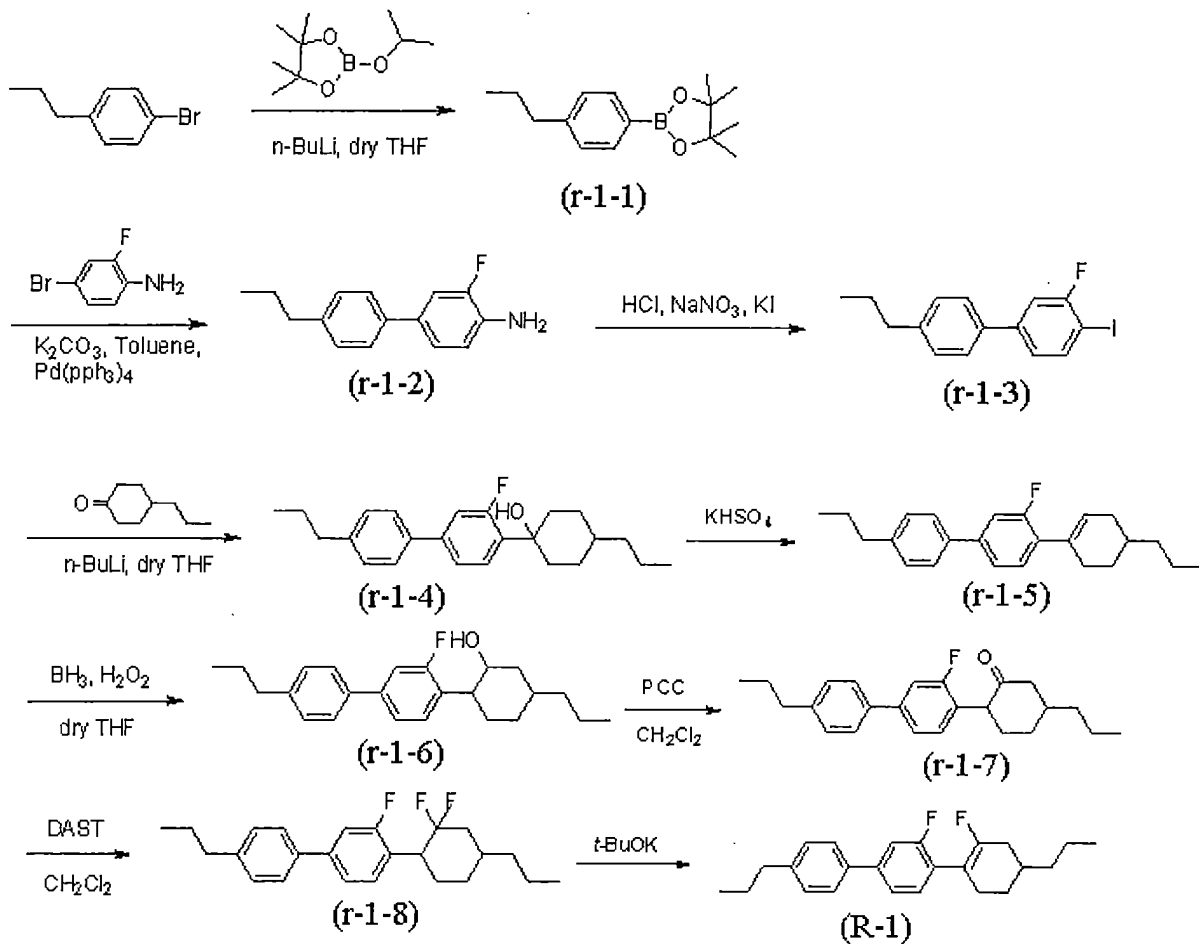
<比較例之液晶化合物>

【0059】 比較例之液晶化合物為結構如式 (R-1) 及式 (R-2) 所示之液晶化合物：



<式(R-1)之液晶化合物之製備方法>

【0060】 式(R-1)之液晶化合物可利用合成流程 3 所示之製備方法而得到：



合成流程 3

【0061】 合成流程 3 中化合物(r-1-1)的製備方法如下：將 20 克(100.4 mmol)的對溴丙苯(1-bromo-4-propylbenzene)用無水四氫呋喃溶解後，置於乾燥的 500 mL 雙頸瓶中，在氮氣環境和低溫下，將 52 mL、2.5 M(130 mmol)的正丁基鋰緩慢注射進雙頸瓶中，低溫下反應一小時後，再將 25 mL(100 mmol)的 2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼烷

(2-isopropoxy-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane)緩慢注入，反應一小時。反應完全後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷，除去未反應的對溴丙苯後，改變沖提液為乙酸乙酯，將得到 15.32 克淺黃色液體，產率 62%。

【0062】合成流程 3 中化合物(r-1-2)的製備方法如下：將 15 克(60 mmol)的化合物(r-1-1)、11.5 克(12.6 mmol)的 4-溴-2-氟苯胺、7.3 克(37.7 mmol)的氫氧化鈉和 0.5 毫升的界面活性劑氯化甲基三辛基銨置入 500 mL 的雙頸瓶中，以 150 mL 的甲苯和 30 mL 的蒸餾水溶解後，在氮氣環境下，加入 0.05 克(0.05 mmol)的四(三苯基膦)鈀，在 90℃ 下，反應 5 小時。反應完成後，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 5.7 克白色固體，產率 42%。

【0063】合成流程 3 中化合物(r-1-3)的製備方法如下：將 5 克(22 mmol)化合物(r-1-2)溶解於 30 mL 的四氫呋喃中，緩慢滴加入 15 mL 的鹽酸，在 0℃ 時，緩慢滴加入溶於蒸餾水中的 3.1 克(44 mmol)亞硝酸鈉，在 0℃ 下反應 1 小時後，在 0℃ 下緩慢滴加入溶於蒸餾水中的 7.5 克(44 mmol)碘化鉀，反應 1 小時後，在室溫下加入 5 mL 的飽和硫代硫酸鈉水溶液，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得透明液體 5.3 克，產率 70%。

【0064】 合成流程 3 中化合物(r-1-4)的製備方法如下：將 3 克(8.8 mmol)化合物(r-1-3)用無水四氫呋喃溶解後，置於乾燥的 250mL 雙頸瓶中，在氮氣環境和低溫下，將 5.3 mL、2.5 M(13.2 mmol)的正丁基鋰緩慢注射進雙頸瓶中，低溫下反應一小時後，再將 1.2 克(8.8 mmol)的 4-丙基環己基酮緩慢注入，反應一小時。反應完全後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷，除去未反應的化合物(r-1-3)後，改變沖提液為乙酸乙酯，將得到深褐色液體 2.1 克，直接進行下一步驟。

【0065】 合成流程 3 中化合物(r-1-5)的製備方法如下：將上一步驟得到的化合物(r-1-4)置於 250mL 的雙頸瓶中，加入 3 克的 KHSO_4 ，在 110°C 下反應五小時。反應完成後，抽氣過濾除去固體，收集濾液，以減壓濃縮儀除去溶劑，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 1.4 克的化合物(r-1-5)，產率 47%。

【0066】 合成流程 3 中化合物(r-1-6)的製備方法如下：將 1.4 克(4.2 mmol)的化合物(r-1-5)置於 50mL 的雙頸瓶中，在氮氣環境下，以無水四氫呋喃溶解後，在 0°C 下用針筒緩慢注入 10mL、1M 的 BH_3/THF ，在室溫下反應 3 小時，用針筒緩慢注入 3M、6mL 的氫氧化鈉水溶液，再注入 30 wt%、3mL 的 H_2O_2 ，持續加熱迴流 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，先以正己烷將未反

應的化合物(r-1-5)沖出，再用乙酸乙酯將產物沖出。得黃色液體，直接進行下一步驟。

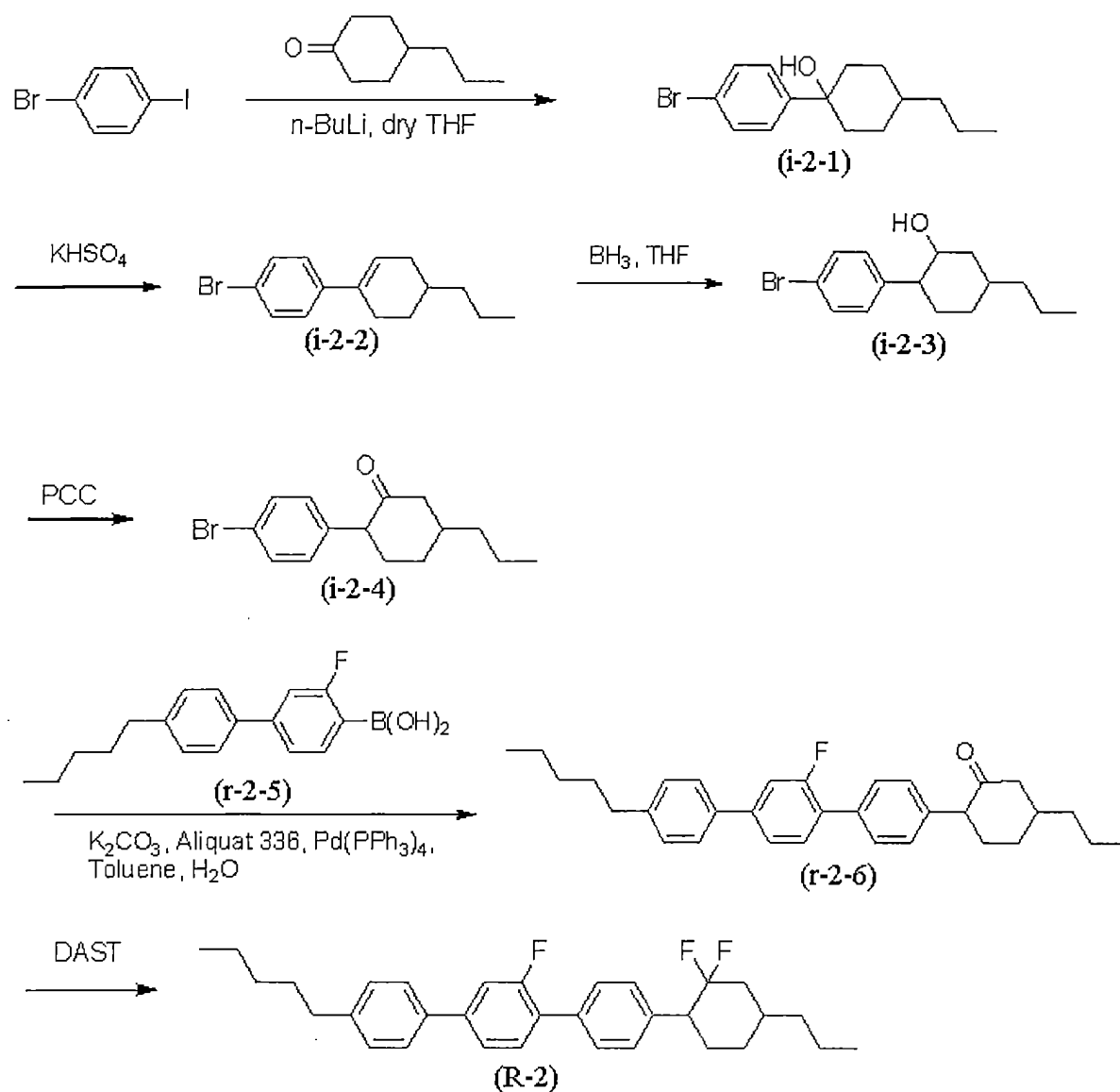
【0067】 合成流程 3 中化合物(r-1-7)的製備方法如下：將化合物(r-1-6)用 20 mL 的二氯甲烷溶解，緩慢加入溶解於二氯甲烷的 2 克氯鉻酸吡啶鹽，加熱迴流反應 5 小時。反應完成後，以矽藻土進行快速管柱層析法純化，以二氯甲烷和乙酸乙酯做為沖提液。以減壓濃縮儀除去溶劑，得到褐色液體，直接進行下一步驟。

【0068】 合成流程 3 中化合物(r-1-8)的製備方法如下：將化合物(r-1-7)溶解於二氯甲烷中，在氮氣環境下，緩慢滴入 2 mL 的 DAST，在 50℃ 下加熱迴流反應 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和 5 wt% 氫氧化鉀水溶液萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 0.2 克的化合物(r-1-8)，產率 12%。

【0069】 合成流程 3 中化合物(R-1)的製備方法如下：將 0.2 克(1.7 mmol)化合物(r-1-8)溶解於四氫呋喃中，加入 0.1 克叔丁醇鉀，加熱迴流反應 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 0.1 克化合物(R-1)，產率 53%。請參照第 5 圖，其係液晶化合物(R-1)之 $^1\text{H-NMR}$ 光譜圖，由第 5 圖可確認液晶化合物(R-1)的結構無誤。

<式(R-2)之液晶化合物之製備方法>

【0070】 式(R-2)之液晶化合物可利用合成流程 4 所示之製備方法而得到：



合成流程 4

【0071】 合成流程 4 中化合物(i-2-1)至(i-2-4)的製備方法與合成流程 1 中化合物(i-2-1)至(i-2-4)的製備方法相同，在此不予贅述。

【0072】 合成流程 4 中化合物(r-2-6)的製備方法如下：將 0.51 克(1.7 mmol)的化合物(i-2-4)、0.49 克(1.7 mmol)的化

合物(r-2-5)、0.71 克碳酸鉀(5.1 mmol)和 0.5 毫升介面活性劑氯化甲基三辛基銨置入 250mL 的雙頸瓶中，以 50 mL 的甲苯和 10 mL 的蒸餾水溶解後，在氮氣環境下，加入 0.1 克(0.09 mmol)的四(三苯基膦)鈀，在 90℃ 下，反應 14 小時。反應完成後，以乙酸乙酯和蒸餾水萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 0.5 克化合物(r-2-6)，產率 64%。

【0073】 合成流程 4 中化合物(R-2)的製備方法如下：將 0.5 克(1 mmol)的化合物(r-2-6)溶解於二氯甲烷中，在氮氣環境下，緩慢滴入 DAST，在 50℃ 下加熱迴流反應 14 小時。反應完成後，以減壓濃縮儀除去溶劑，以乙酸乙酯和 5%氫氧化鉀水溶液萃取後收集有機層，除去溶劑後，以管柱層析法純化，沖提液為正己烷。得 0.3 克化合物(R-2)，產率 62%。請參照第 6 圖，其係液晶化合物(R-2)之 $^1\text{H-NMR}$ 光譜圖，由第 6 圖可確認液晶化合物(R-2)的結構無誤。

液晶化合物之評價方法

【0074】 (一)相變化溫度(Phase Transfer Temperature, PT, 單位為℃)：使用差示掃描量熱儀(DSC)系統，將液晶化合物置於鋁盤上精秤 0.5 mg 至 40 mg，藉由液晶化合物因相變化而出現的吸熱峰及放熱峰的起始點來確定相變化溫度。相變化的表示方式為：結晶相標示為 C，近晶相標示為 S，向列相標示為 N，液相標示為 I。相變化溫度的表示方式，如「C63N138I」表示由結晶相至向列相的相變溫度

(T_c)爲 63°C ，由向列相至液相的相變溫度(T_{NI})爲 138°C ，又例如「C107N>250I」表示由結晶相至向列相的相變溫度(T_c)爲 107°C ，由向列相至液相的相變溫度(T_{NI})大於 250°C (超過儀器的偵測範圍)。

【0075】 (二)向列相的溫度範圍(ΔT ，單位爲 $^{\circ}\text{C}$)：將相變化溫度的測量所得的結果，代入以下公式計算： $\Delta T = T_{NI} - T_c$ ，即可得到向列相的溫度範圍，當 ΔT 數值越大，表示向列相的溫度範圍越寬廣。

【0076】 (三)光學異向性(Δn)：以單方向擦拭主稜鏡的表面，在主稜鏡上滴加少量液晶化合物，於 25°C 下，使用波長 589 nm 的濾光光片，以目鏡上安裝有偏光板的阿貝折射儀進行測定。當偏光方向與擦拭方向平行時，測定折射率爲 $n_{\parallel}$ ；當偏光方向與擦拭方向垂直時，測定折射率爲 $n_{\perp}$ 。光學異向性(Δn)由 $n_{\parallel}$ 與 $n_{\perp}$ 的差值而得，以大於、等於 0.2 爲優，小於 0.2 且大於、等於 0.1 爲佳，以小於 0.1 爲差。

液晶化合物之評價結果

【0077】 將前述液晶化合物之製備方法中所得之本發明之液晶化合物 (I-1) ~ 液晶化合物 (I-4)，以及比較例之液晶化合物 (R-1) 與液晶化合物 (R-2)，進行相變化溫度、向列相的溫度範圍以及光學異向性等測量，並將結果記載於表三。

表三			
液晶化合物	PT($^{\circ}\text{C}$)	$\Delta T(^{\circ}\text{C})$	Δn

I-1	C107N>250I	>143	0.2570
I-2	C95N267I	172	0.2942
I-3	C115N242I	127	0.2757
I-4	C47N169I	122	0.2412
R-1	C50N86I	36	0.1632
R-2	C91N221I	130	0.1909

【0078】由表三之結果可知，比較例液晶化合物（R-1）的向列相的溫度範圍狹窄且光學異向性不佳，比較例液晶化合物（R-2）的向列相的溫度範圍雖然寬廣，但光學異向性不佳，而本發明之液晶化合物（I-1）～液晶化合物（I-4）不僅具有優良的光學異向性，且兼具寬廣的向列相的溫度範圍，故有利於擴大應用範圍，此外，本發明之液晶化合物的向列相至液相的相變溫度普遍較高，亦即具有較高的澄清點，其中，液晶化合物（I-4）的向列相的下限溫度為47℃，更有利於低溫儲存。

液晶組成物之評價方法

【0079】（一）由向列相至液相的相變溫度(T_{NI} ，澄清點)：使用差示掃描量熱儀(DSC)系統，將液晶組成物置於鋁盤上精秤 0.5 mg 至 40 mg，藉由液晶組成物因相變化而出現的吸熱峰及放熱峰的起始點來確定相變化溫度。

【0080】（二）介電係數異方性($\Delta \epsilon$)：將液晶化合物裝入間隔平均為 8 μm 的 TN 液晶盒中，於溫度 25℃ 下，對該 TN 液晶盒施加 10V 的電壓(1KHz,正弦波)，在平行於液晶分子長

軸方向所測得的平均介電常數為 $\epsilon_{\parallel}$ ，垂直於液晶分子長軸所測得的平均介電常數為 $\epsilon_{\perp}$ ，介電異方性($\Delta\epsilon$)為 $\epsilon_{\parallel}$ 與 $\epsilon_{\perp}$ 之間的差值，一般 TN 型液晶顯示器採用平行配向技術，為了實現低電壓驅動，以大於、等於 8 為優，小於 8 且大於、等於 3 為佳。

【0081】 (三)光學異向性(Δn)：以單方向擦拭主稜鏡的表面，在主稜鏡上滴加少量液晶組成物，於 25℃ 下，使用波長 589 nm 的濾光光片，以目鏡上安裝有偏光板的阿貝折射儀進行測定。當偏光方向與擦拭方向平行時，測定折射率為 $n_{\parallel}$ ；當偏光方向與擦拭方向垂直時，測定折射率為 $n_{\perp}$ 。光學異向性(Δn)由計算 $n_{\parallel}$ 與 $n_{\perp}$ 的差值而得，以大於、等於 0.2 為優，小於 0.2 且大於、等於 0.1 為佳，以小於 0.1 為差。

【0082】 (四)低溫儲存(Low Temperature Storage，LTS，單位為小時)：將 0.3 mL 的液晶組成物置於容量為 7 mL 的樣品瓶中，以 -30℃ 冷藏後析出或固化的時間。

液晶組成物之實施例與比較例

【0083】 製備實施例 1~8 的液晶組成物以及比較例 1'~6' 的液晶組成物。實施例 1~8 的液晶組成物以及比較例 1'~6' 的液晶組成物的成份列於表四至表六。

表四						
化合物種類		化合物的含量(單位：wt%)				
		實施例	實施例	比較例	比較例	比較例

		1	2	1'	2'	3'
	(I-1)	2				
	(I-4)		2			
	(R-1)					2
(II)	(II-1)	35.5	35.5	35.5	35.5	35.5
	(II-4)	5	5	5	5	5
(III)	(III-3)	4	4	4	4	4
	(III-5)	6	6	6	6	6
	(III-9)	9	9	9	9	9
	(III-14)	9	9	9	9	9
	(III-16)	4	4	4	4	4
	(III-17)	6.5	6.5	6.5	6.5	6.5
	(III-21)			2		
	(III-23)	7	7	7	7	7
(IV)	(IV-5)	6	6	6	6	6
	(IV-6)	6	6	6	6	6
	(IV-8)				2	

表五					
化合物種類		化合物的含量(單位：wt%)			
		實施例 3	比較例 4'	比較例 5'	比較例 6'
	(I-2)	6			
	(R-1)				4
(II)	(II-1)	35.5	35.5	35.5	35.5

	(II-4)	5	5	5	5
(III)	(III-3)	4	4	4	2
	(III-5)	6	6	6	6
	(III-9)	9	9	9	9
	(III-14)	9	9	9	9
	(III-16)		6		4
	(III-17)	6.5	6.5	6.5	6.5
	(III-23)	7	7	7	7
(IV)	(IV-5)	6	6	6	6
	(IV-6)	6	6	6	6
	(IV-8)			6	

表 六						
化合物種類		化合物的含量(單位：wt%)				
		實施例 4	實施例 5	實施例 6	實施例 7	實施例 8
	(I-4)	6	0.5	1	0.5	10
(II)	(II-1)	30	34.9	40	23	19
	(II-2)		3.4	4	12.5	5
	(II-3)			4		
	(II-4)	5			5	2
	(II-5)		2.8			
	(II-6)		5.9			
(III)	(III-1)	4				5

	(III-2)			2	6	
	(III-3)			3		
	(III-4)	1	6.1			
	(III-5)					6
	(III-6)			6		
	(III-7)				5	6
	(III-8)	4	7.3			
	(III-10)			6		
	(III-11)				7	
	(III-12)	2				5
	(III-13)	5		6		
	(III-14)	5	8.9			5
	(III-15)			4		6
	(III-17)					6
	(III-18)			2		
	(III-19)				5	
	(III-20)				5	
	(III-21)	2				6
	(III-22)	3		4		
	(III-23)	5	4			
	(III-24)	6	6.8			5
	(III-25)	2				
(IV)	(IV-1)	4	5.1	3	6	8
	(IV-2)	2			7	6

	(IV-3)				6	
	(IV-4)		3.8	5		
	(IV-5)	7	3.2			
	(IV-6)	7	5.3	7	6	
	(IV-7)		2	3	6	

【0084】 將實施例 1~8 的液晶組成物以及比較例 1'~6'的液晶組成物進行由向列相至液相的相變溫度、介電係數異方性、光學異向性、低溫儲存等性質量測，並將結果記錄於表七 A 與表七 B 中。

表七 A							
性質	實施例 1	實施例 2	比較例 1'	比較例 2'	比較例 3'	實施例 3	比較例 4'
T _{NI}	77.62	74.59	75.51	75.34	73.43	78.79	75.76
Δε	6.54	6.68	6.7	6.74	6.74	6.86	6.79
Δn	0.1152	0.1139	0.1146	0.1134	0.1118	0.1144	0.114
LTS	120	288	24	24	72	216	120

表七 B							
性質	比較例 5'	比較例 6'	實施例 4	實施例 5	實施例 6	實施例 7	實施例 8
T _{NI}	70.22	71.98	86.43	74.84	75.05	97.3	113.17
Δ ε	6.66	6.75	8.03	7.22	6.06	6.26	5.54
Δn	0.1095	0.1131	0.1308	0.1144	0.0988	0.118	0.1376

LTS	96	48	>240	>200	>200	72	144
-----	----	----	------	------	------	----	-----

【0085】 由實施例 1 與比較例 3'以及實施例 3 與比較例 6'的性質量測結果可知，藉由液晶化合物(I-1)或液晶化合物(I-2)比液晶化合物(R-1)多了一個苯環，除了可提高液晶組成物的光學異向性，及由向列相至液相的相變溫度變高(亦即具有較高澄清點)，並可提升液晶組成物於低溫的儲存能力。

【0086】 在組成成份較接近的實施例 1、實施例 2 與比較例 1'～比較例 3'的性質量測結果可知，藉由於液晶組成物中添加本發明之液晶化合物(I-1)或液晶化合物(I-4)，可有效提升向列相組成物於低溫的儲存能力。

【0087】 在組成成份較接近的實施例 3 與比較例 4'～比較例 6'的性質量測結果可知，藉由於液晶組成物中添加本發明之液晶化合物(I-2)，除了可提升光學異向性、介電係數異方性、由向列相至液相的相變溫度，並可有效提升向列相組成物於低溫的儲存能力。

【0088】 此外，本發明之液晶組成物的由向列相至液相的相變溫度、介電係數異方性、光學異向性、低溫儲存等性質皆為優或佳，當應用於液晶顯示元件，可提升液晶顯示元件的成像品質。

【0089】 雖然本發明已以實施方式揭露如上，然其並非用以限定本發明，任何熟習此技藝者，在不脫離本發明之精神和範圍內，當可作各種之更動與潤飾，因此本發明之保護範圍當視後附之申請專利範圍所界定者為準。

【符號說明】

無。

發明摘要

※申請案號：103103614

※申請日：103.1.29

※IPC分類：

C09K19/12(2006.01)
 C09K19/18(2006.01)
 C09K19/20(2006.01)
 C09K19/30(2006.01)
 C09K19/32(2006.01)
 C09K19/34(2006.01)
 G02F1/1333(2006.01)

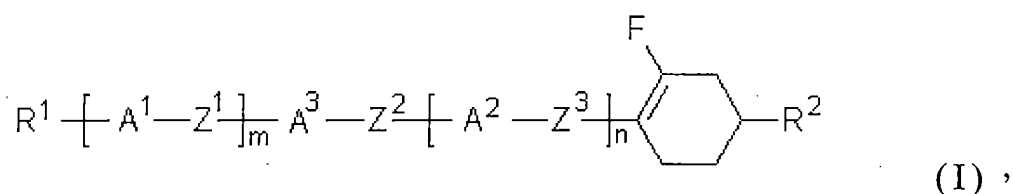
【發明名稱】(中文/英文)

液晶化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件

LIQUID CRYSTAL COMPOUND, LIQUID CRYSTAL
 COMPOSITION AND LIQUID CRYSTAL DISPLAY DEVICE
 HAVING THEREOF

【中文】

一種液晶化合物，其具有如式(I)所示之一結構：



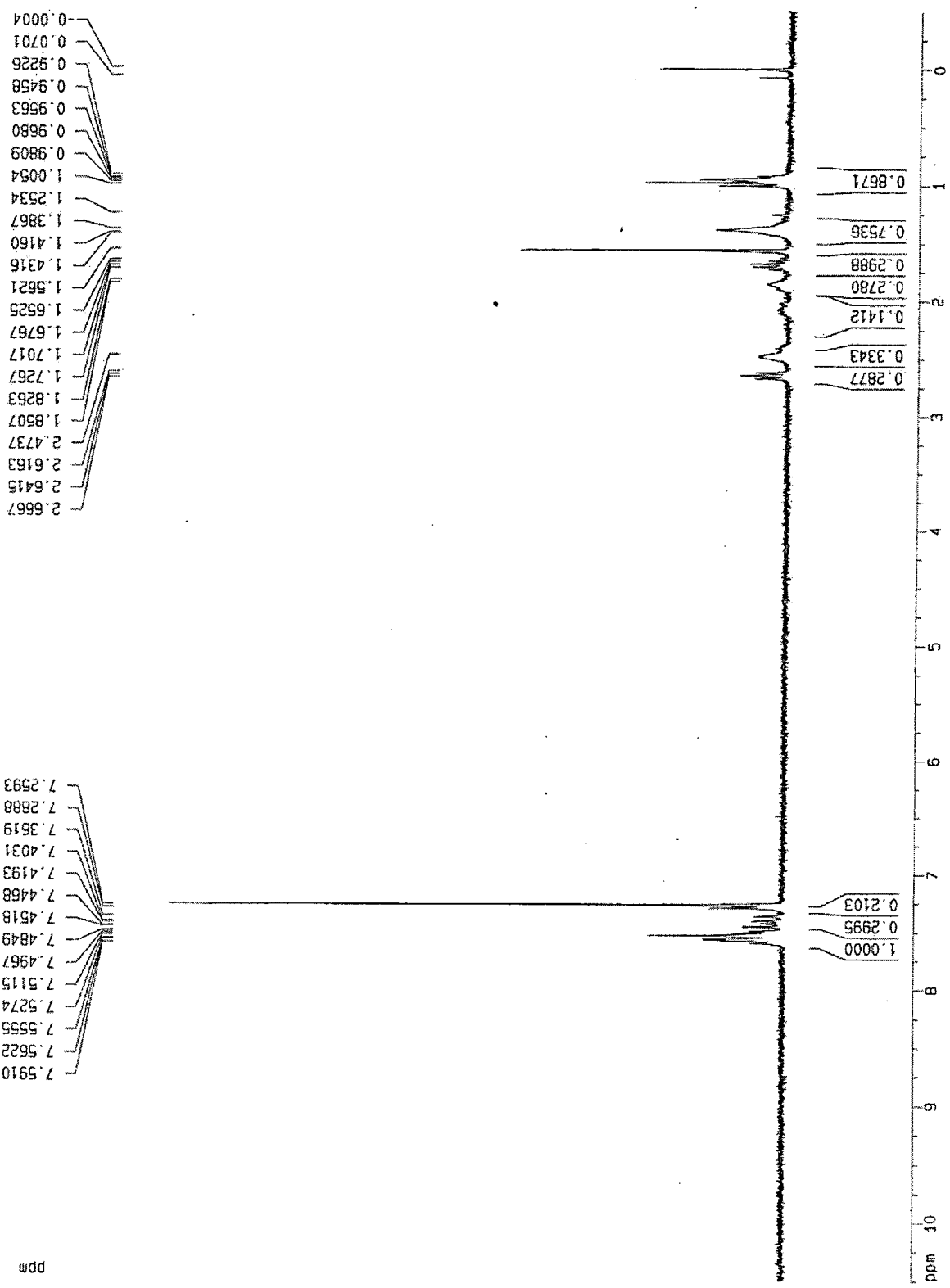
其中 R^1 、 R^2 、 A^1 、 A^2 、 A^3 、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 m 與 n 的定義係如內文所定義，此液晶化合物具有高光學異向性以及廣向列相溫度範圍，藉此，有利於液晶化合物的保存及擴大其應用範圍。

【英文】

A liquid crystal compound has a structure of formula (I), wherein R^1 、 R^2 、 A^1 、 A^2 、 A^3 、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 m and n are defined in the specification. The liquid crystal compound is

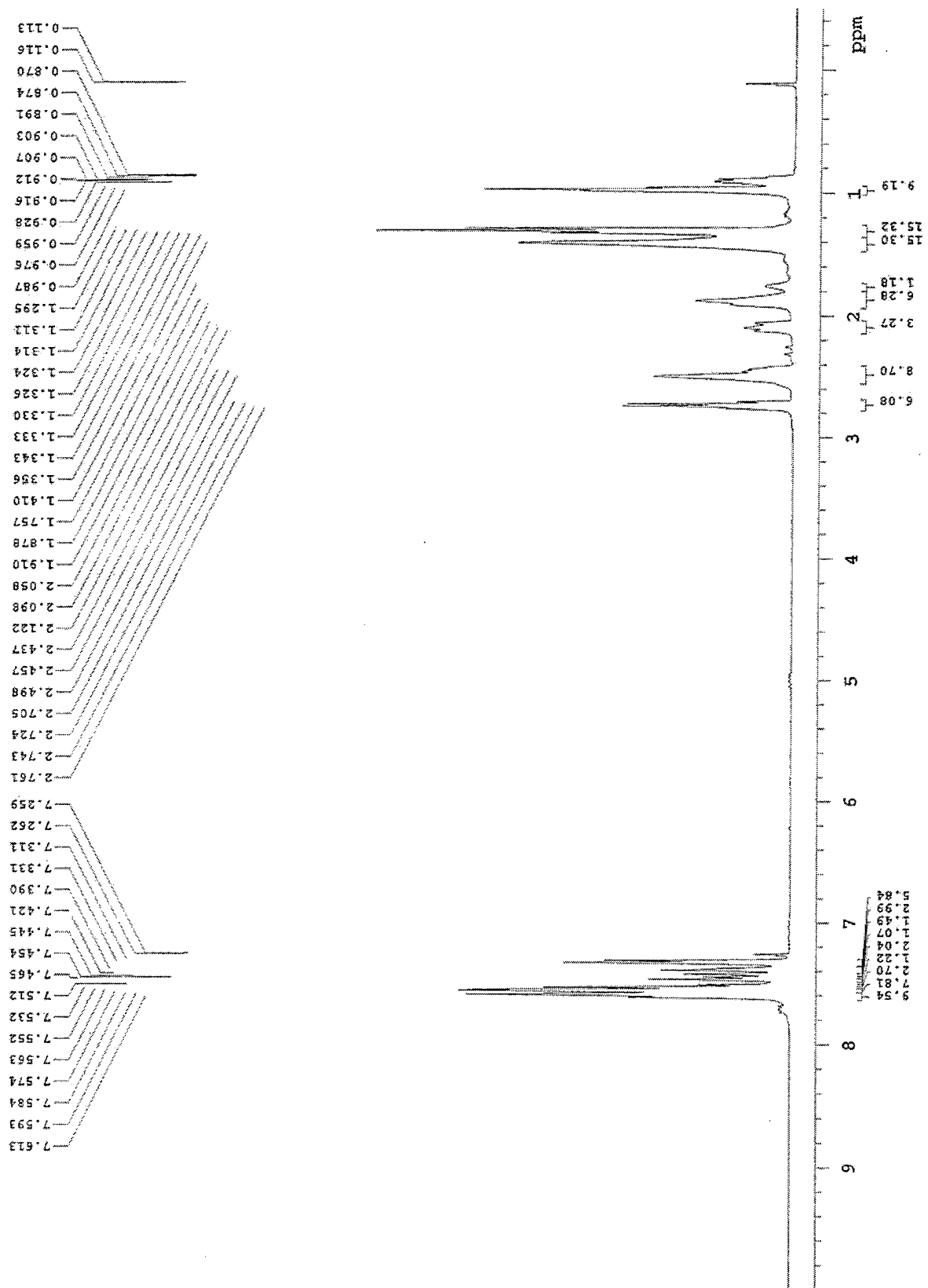
featured with high optical anisotropy and wide temperature range of nematic phase. It is favorable for preserving the liquid crystal compound and broadening the application thereof.

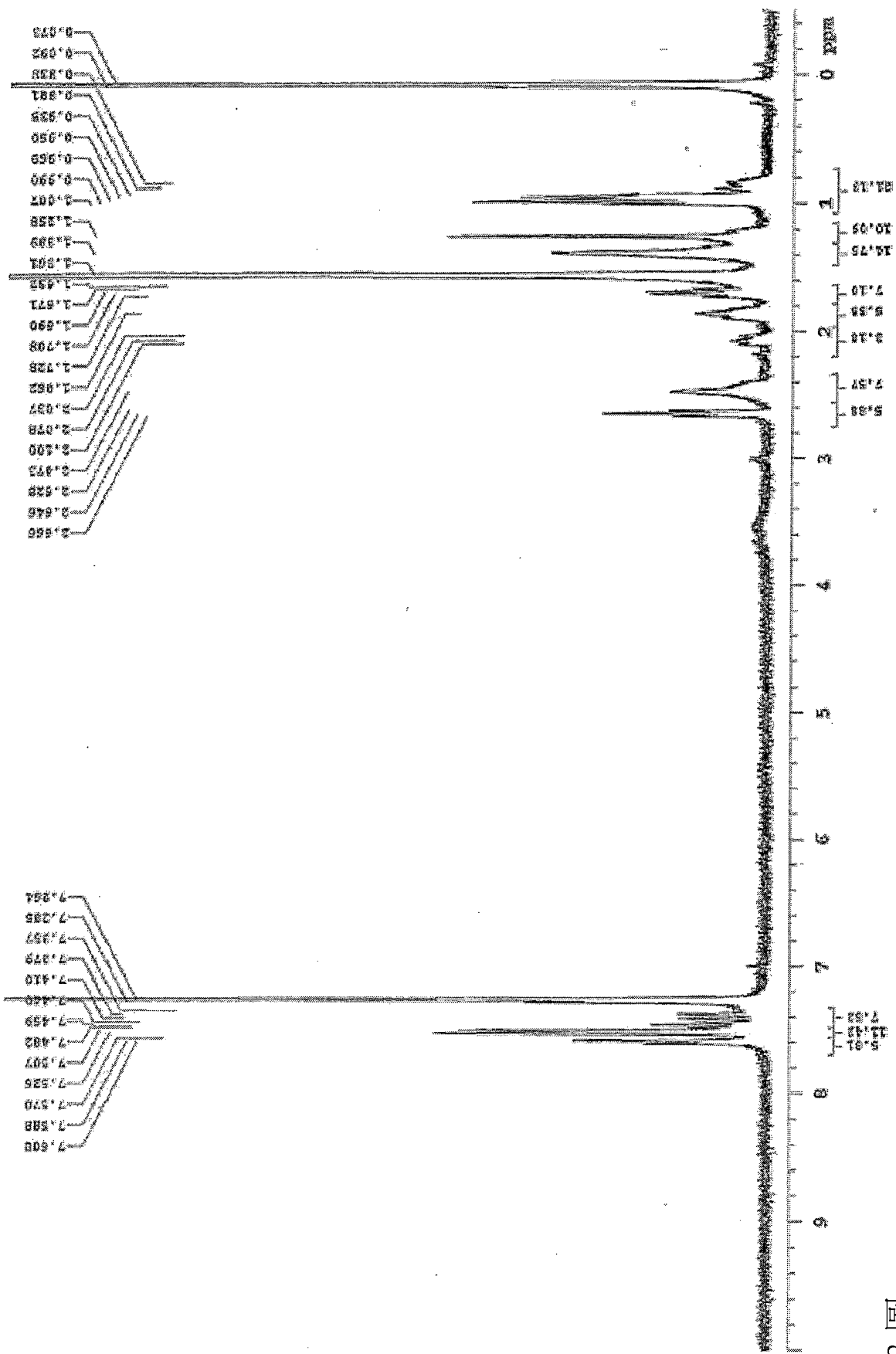
圖式



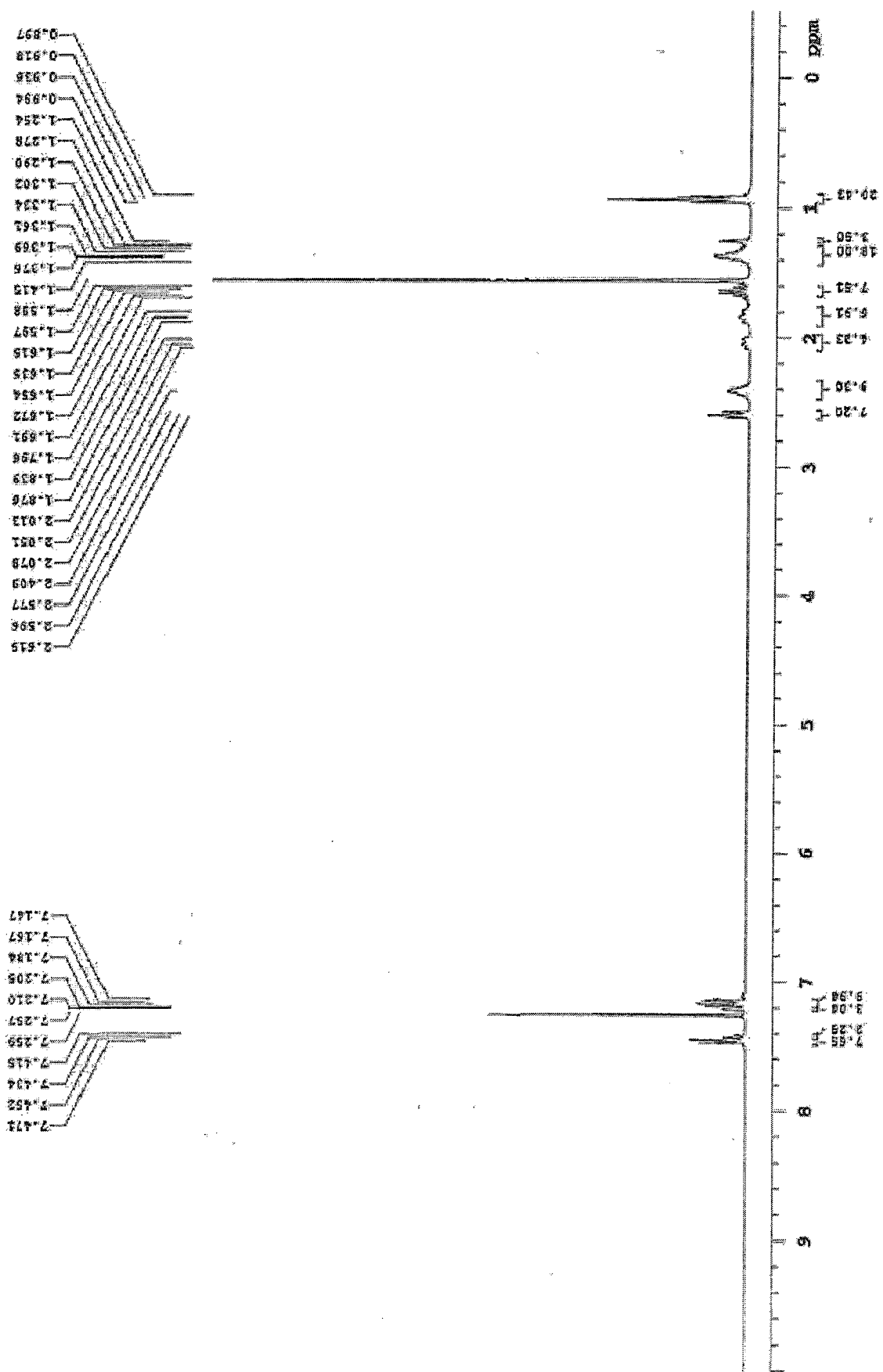
第 1 圖

第2圖



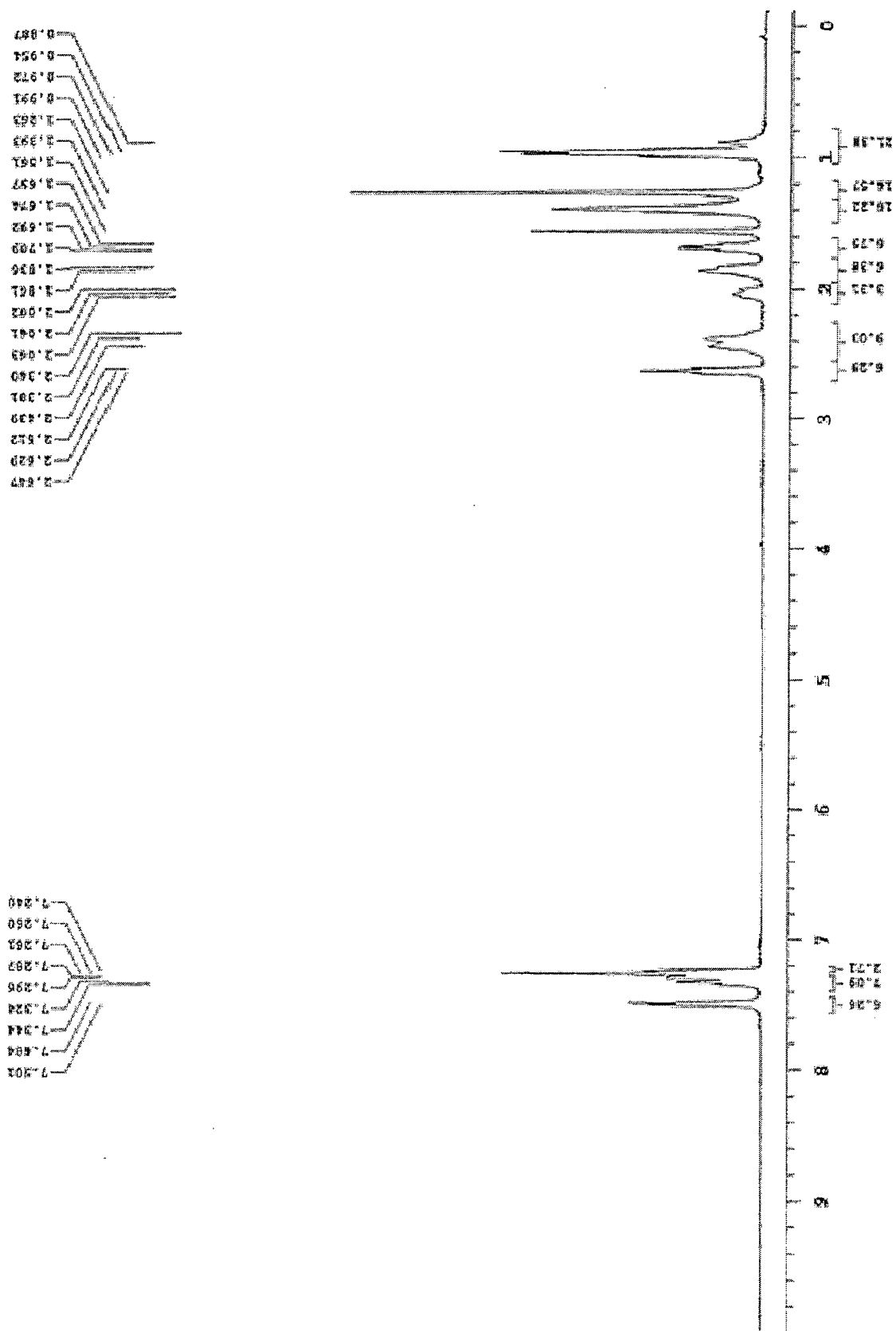


第3圖

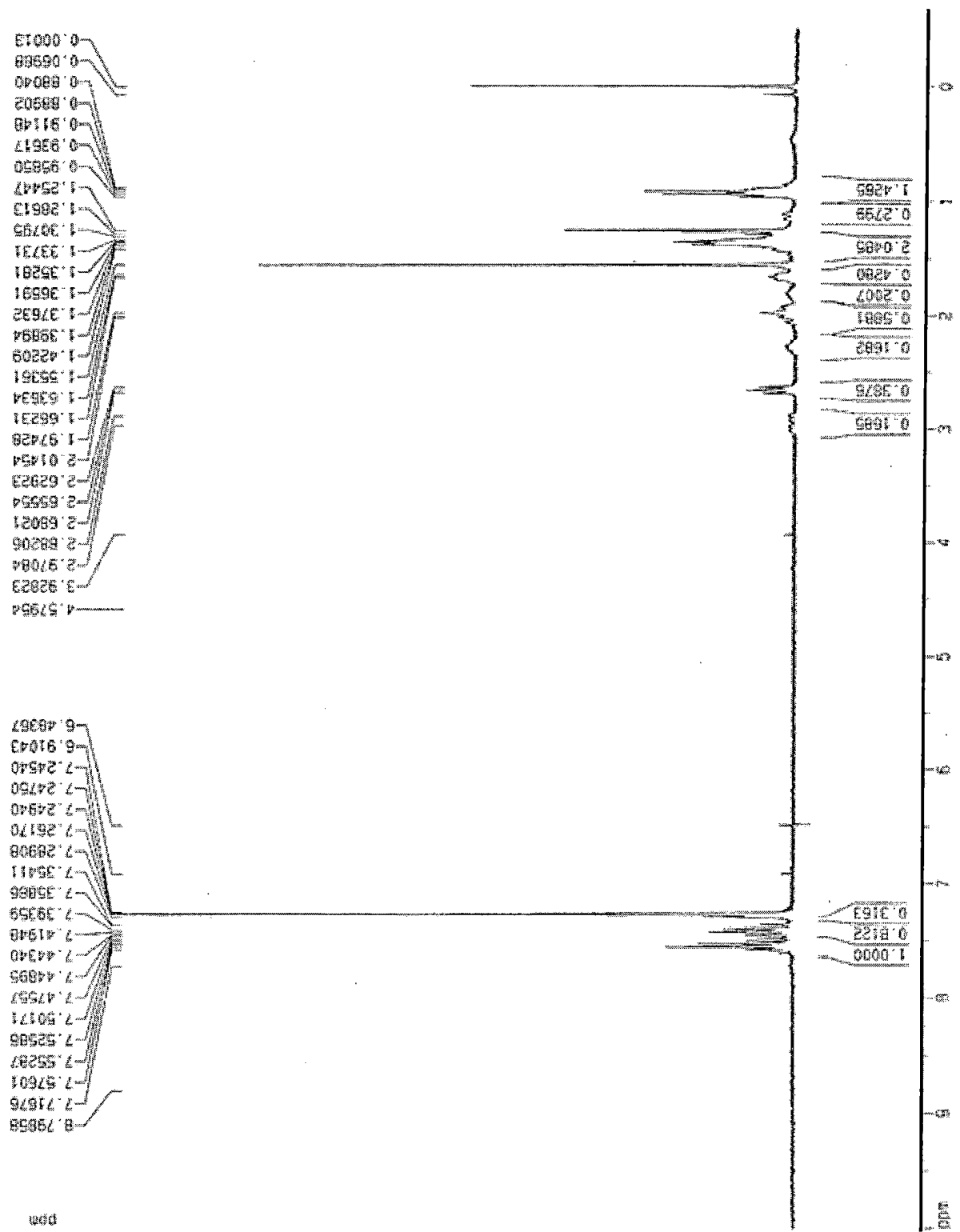


第4圖

第5圖



第 9 圖



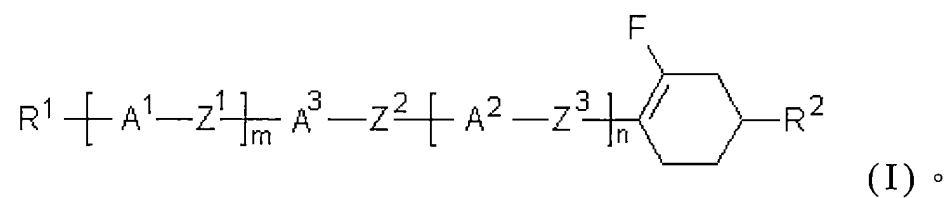
【代表圖】

【本案指定代表圖】：第 1 圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

無。

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



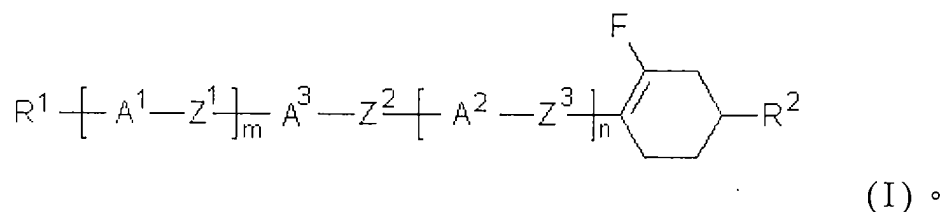
【發明內容】

【0006】 本發明之一目的是在提供一種液晶化合物，其具有高光學異向性、高澄清點與寬廣的向列相溫度範圍，藉此，有利於液晶化合物的保存及擴大其應用範圍。

【0007】 本發明之另一目的是在提供一種液晶組成物，其包含前述之液晶化合物，有利於低溫儲存，並有利於提升液晶顯示元件的成像品質及擴大其應用範圍。

【0008】 本發明之再一目的是在提供一種液晶顯示元件，其包含前述之液晶組成物，故可具有較佳地成像品質及擴大其應用範圍。

【0009】 依據本發明之一態樣之一實施方式是在提供一種液晶化合物，其具有如式(I)所示之一結構：



【0010】 式(I)中， R^1 與 R^2 係各自獨立為 -H、-F、未經取代的碳數 1 至 10 的直鏈烷基或支鏈烷基、經鹵素取代的碳數 1 至 10 的直鏈烷基或支鏈烷基、未經取代的碳數 2 至 10 的直鏈烯基或支鏈烯基，或經鹵素取代的碳數 2 至 10 的直鏈烯基或支鏈烯基， R^1 與 R^2 中任意的 -CH₂- 可被 -O-、-CO-、-COO- 或 -C≡C- 取代，其前提是氧原子彼此不直接連接。

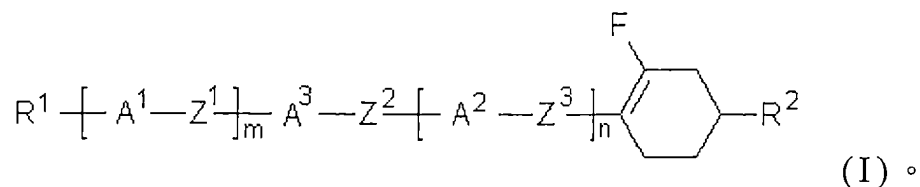
【0011】 A^1 與 A^2 係各自獨立為 1,4-伸苯基、1,4-伸環己基、1,3-伸環戊基、2,5-伸四氫吡喃基或 1,4-雙環[2.2.2]伸辛基，其中，1,4-伸苯基中任意一個或任意兩個不相鄰的 -CH-

第 6 圖係液晶化合物 (R-2) 之 $^1\text{H-NMR}$ 光譜圖。

【實施方式】

液晶化合物

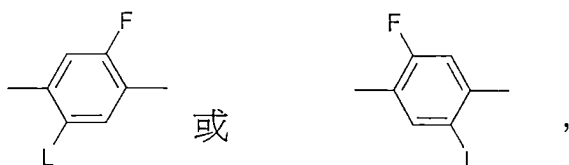
【0017】 本發明之液晶化合物具有如式(I)所示之一結構：



【0018】 式(I)中， R^1 與 R^2 係各自獨立為 $-\text{H}$ 、 $-\text{F}$ 、未經取代的碳數 1 至 10 的直鏈烷基或支鏈烷基、經鹵素取代的碳數 1 至 10 的直鏈烷基或支鏈烷基、未經取代的碳數 2 至 10 的直鏈烯基或支鏈烯基，或經鹵素取代的碳數 2 至 10 的直鏈烯基或支鏈烯基， R^1 與 R^2 中任意的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 取代，其前提是氧原子彼此不直接連接。

【0019】 A^1 與 A^2 係各自獨立為 1,4-伸苯基、1,4-伸環己基、1,3-伸環戊基、2,5-伸四氫吡喃基或 1,4-雙環[2.2.2]伸辛基，其中，1,4-伸苯基中任意一個或任意兩個不相鄰的 $-\text{CH}-$ 可被 $-\text{N}-$ 取代，且 1,4-伸苯基中任意一個氫原子可被氟原子取代，1,4-伸環己基中任意一個或任意兩個不相鄰的 $-\text{CH}_2-$ 可被 $-\text{O}-$ 或 $-\text{S}-$ 取代，且 1,4-伸環己基中任意一個氫原子可被氟原子取代。

【0020】 A^3 為



其中 L 為氫原子或氟原子。

【0021】 Z^1 、 Z^2 與 Z^3 係各自獨立為單鍵、-O-、-CO-、-COO-、-C≡C-、-CH=CH-、-CH₂CH₂-、-CF₂CF₂-、-CF=CH-、-CH=CF-。m 為 1 或 2。n 為 0、1 或 2，且當 Z^1 為單鍵時， $n \neq 0$ 。

【0022】 依據本發明一實施方式，前述液晶化合物中， A^1 與 A^2 可各自獨立為 1,4-伸苯基、1,4-伸環己基、1,3-伸環戊基或 2,5-伸四氫吡喃基，其中，1,4-伸苯基中任意一個或任意兩個不相鄰的 -CH- 可被 -N- 取代，且 1,4-伸苯基中任意一個氫原子可被氟原子取代，1,4-伸環己基中任意一個或任意兩個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O- 或 -S- 取代，且 1,4-伸環己基中任意一個氫原子可被氟原子取代，n 可為 1 或 2。

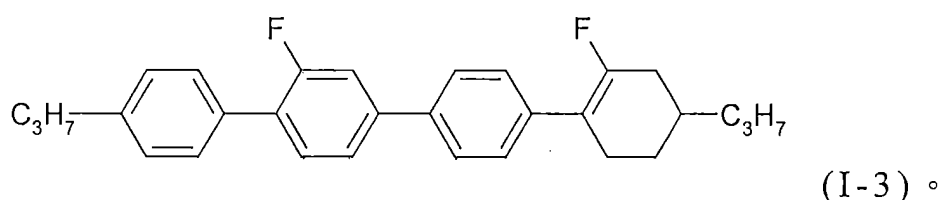
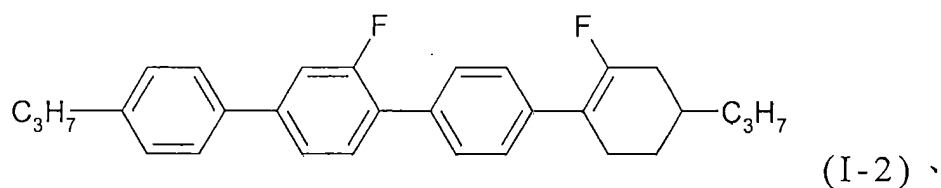
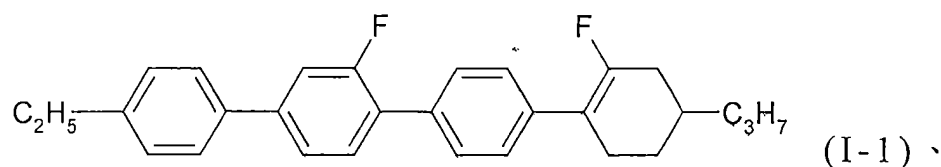
【0023】 依據本發明另一實施方式，前述液晶化合物中， A^1 與 A^2 可各自獨立為 1,4-伸苯基、1,4-伸環己基或 2,5-伸四氫吡喃基，且 1,4-伸苯基中任意一個氫原子可被氟原子取代，1,4-伸環己基中任意一個或任意兩個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O- 或 -S- 取代，且 1,4-伸環己基中任意一個氫原子可被氟原子取代， Z^1 、 Z^2 與 Z^3 可為單鍵，m 可為 1，n 可為 1。

【0024】 依據本發明再一實施方式，前述液晶化合物中， A^1 與 A^2 可為 1,4-伸苯基，且 1,4-伸苯基中任意一個氫原子可被氟原子取代， Z^1 、 Z^2 與 Z^3 可為單鍵，m 可為 1，n 可為 1。

【0025】 本發明之液晶化合物可具有但不限於如式(I-1)、式(I-2)、式(I-3)或式(I-4)所示之一結構：

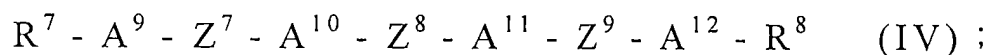
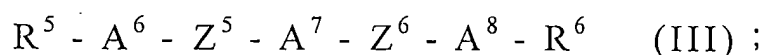
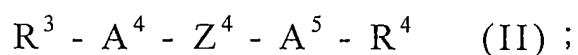
申請專利範圍

1. 一種液晶化合物，其具有如式(I-1)、式(I-2)或式(I-3)所示之一結構：



2. 一種液晶組成物，其包含如請求項 1 所述之液晶化合物。

3. 如請求項 2 所述之液晶組成物，其更包含結構如式(II)、式(III)及式(IV)所示之化合物之至少一者：



其中，該 R^3 、該 R^5 與該 R^7 係各自獨立為碳數 1 至 15 的烷基或碳數 2 至 15 的烯基，該 R^3 、該 R^5 與該 R^7 中任意一個或多個 -H 可被 -F、-CF₃、-CF₂H 取代，且該 R^3 、該 R^5

與該 R^7 中任意一個或多個不相鄰的 $-CH_2-$ 可被 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-O-CO-$ 或 $-O-COO-$ 取代；

該 R^4 、該 R^6 與該 R^8 係各自獨立為氫、鹵素、碳數 1 至 15 的烷基或碳數 2 至 15 的烯基，該 R^4 、該 R^6 與該 R^8 中任意一個或多個 $-H$ 可被 $-F$ 、 $-CF_3$ 或 $-CF_2H$ 取代，且該 R^4 、該 R^6 與該 R^8 中任意一個或多個不相鄰的 $-CH_2-$ 可被 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-O-CO-$ 或 $-O-COO-$ 取代；

該 A^4 、該 A^5 、該 A^6 、該 A^7 、該 A^8 、該 A^9 、該 A^{10} 、該 A^{11} 與該 A^{12} 係各自獨立為 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基、1,3-伸環戊基或 2,5-茛滿基，其中該 1,4-伸環己基中任意一個或多個不相鄰的 $-CH_2-$ 可被 $-O-$ 取代，且該 1,4-伸環己基、該 1,4-伸苯基、該 1,3-伸環戊基與該 2,5-茛滿基中任意一個或多個氫原子係可被氟原子取代；以及

該 Z^4 、該 Z^5 、該 Z^6 、該 Z^7 、該 Z^8 與該 Z^9 係各自獨立為單鍵、雙鍵、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-C_2H_4-$ 、 $-C_4H_8-$ 、 $-CF_2-CF_2-$ 、 $-C=C-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-O-CO-$ 。

4. 如請求項 3 所述之液晶組成物，其包含結構如式 (II)、式 (III) 和式 (IV) 所示之化合物。

5. 如請求項 4 所述之液晶組成物，基於該液晶組成物的含量為 100 重量百分比，該液晶組成物包含：

0.1 重量百分比至 10 重量百分比的該液晶化合物；

5 重量百分比至 50 重量百分比的該式 (II) 化合物；

15 重量百分比至 50 重量百分比的該式(III)化合物；以及

1 重量百分比至 50 重量百分比的該式(IV)化合物。

6. 如請求項 3 所述之液晶組成物，其中該 R^3 、該 R^5 與該 R^7 係各自獨立為碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基，該 R^3 、該 R^5 與該 R^7 中任意一個或多個 -H 可被 -F、-CF₃、-CF₂H 取代，且該 R^3 、該 R^5 與該 R^7 中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O-、-CO-、-COO-、-O-CO- 或 -O-COO- 取代；

該 R^4 、該 R^6 與該 R^8 係各自獨立為氫、鹵素、碳數 1 至 7 的烷基或碳數 2 至 7 的烯基，該 R^4 、該 R^6 與該 R^8 中任意一個或多個 -H 可被 -F、-CF₃ 或 -CF₂H 取代，且該 R^4 、該 R^6 與該 R^8 中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O-、-CO-、-COO-、-O-CO- 或 -O-COO- 取代；

該 A^4 、該 A^5 、該 A^6 、該 A^7 、該 A^8 、該 A^9 、該 A^{10} 、該 A^{11} 與該 A^{12} 係各自獨立為 1,4-伸環己基、1,4-伸苯基、1,3-伸環戊基或 2,5-茛滿基，其中該 1,4-伸環己基中任意一個或多個不相鄰的 -CH₂- 可被 -O- 取代，且該 1,4-伸環己基、該 1,4-伸苯基與該 2,5-茛滿基中任意一個或多個氫原子係可被氟原子取代；以及

該 Z^4 、該 Z^5 、該 Z^6 、該 Z^7 、該 Z^8 與該 Z^9 係各自獨立為單鍵、雙鍵、-CH₂O-、-OCH₂-、-C₂H₄-、-C=C-、-C≡C-、-CF₂O-、-COO- 或 -O-CO-。

7. 一種液晶顯示元件，包含如請求項 2 至 6 中任一項所述之液晶組成物。