

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2020年1月9日(09.01.2020)



(10) 国際公開番号

WO 2020/008826 A1

(51) 国際特許分類:

C07C 69/92 (2006.01) C09K 19/32 (2006.01)
C07C 69/94 (2006.01) C09K 19/34 (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01) C09K 19/38 (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01) C09K 19/42 (2006.01)
C09K 19/16 (2006.01) C09K 19/54 (2006.01)
C09K 19/18 (2006.01) C09K 19/56 (2006.01)
C09K 19/20 (2006.01) G02F 1/13 (2006.01)
C09K 19/30 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2019/023312

(22) 国際出願日: 2019年6月12日(12.06.2019)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2018-127256 2018年7月4日(04.07.2018) JP

(71) 出願人: J N C 株式会社(JNC CORPORATION)
[JP/JP]; 〒1008105 東京都千代田区大手町二丁目2番1号 Tokyo (JP). J N C 石油化学株式会社 (JNC PETROCHEMICAL CORPORATOIN)
[JP/JP]; 〒1000004 東京都千代田区大手町二丁目2番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 矢野 智広(YANO Tomohiro); 〒2908551
千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C

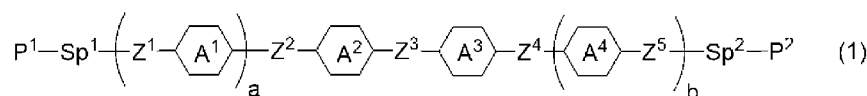
石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP).
近藤 史尚(KONDO Fumitaka); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C 石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 佐郷 弘毅(SAGO Hiroki); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C 石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ,

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

(54) 発明の名称: 化合物、液晶組成物および液晶表示素子



(57) Abstract: Provided is a compound that has at least one of the following characteristics: high chemical stability, high ability to horizontally align liquid crystal molecules, high alignability over a broad range of addition concentrations, suitable reactivity, high solubility in liquid crystal compositions, and so forth. Compounds with formula (1) are provided. In formula (1), a and b are independently 0, 1, or 2 and $0 \leq a + b \leq 3$; ring A¹, ring A², ring A³, and ring A⁴ are independently, for example, 1,4-cyclohexylene; Z¹, Z², Z³, Z⁴, and Z⁵ are independently a single bond or an alkylene having 1 to 10 carbons; Sp¹ and Sp² are independently a single bond or an alkylene having 1 to 10 carbons; and P¹ and P² are independently a prescribed polymerizable group.

(57) 要約: 化学的に高い安定性、液晶分子を水平配向させる高い能力、広い添加濃度範囲における高い配向性、適切な反応性、および液晶組成物への高い溶解度などの少なくとも一つの特性を有する化合物を提供する。以下の式(1)の化合物を提供する。式(1)において、aおよびbは独立して、0、1または2であり、 $0 \leq a + b \leq 3$ であり、環A¹、環A²、環A³および環A⁴は独立して、例えば1,4-シクロヘキシレンであり、Z¹、Z²、Z³、Z⁴およびZ⁵は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンなどであり、Sp¹およびSp²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンなどであり、P¹およびP²は独立して、特定の重合性基である。

DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT,
LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,
SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM,
GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

- 国際調査報告（条約第21条(3)）
- 補正された請求の範囲（条約第19条(1)）

明 細 書

発明の名称：化合物、液晶組成物および液晶表示素子

技術分野

[0001] 本発明は、化合物、液晶組成物および液晶表示素子に関する。さらに詳しくは、一つの分子内に優れた光吸収構造を有する重合性の極性化合物、この化合物を含み、誘電率異方性が正または負の液晶組成物、およびこの組成物を含む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 (p hase 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。2つ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。

[0004]

表1. 組成物とAM素子における特性

番号	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 ¹⁾	応答時間が短い
3	光学異方性が適切である	コントラスト比が大きい
4	正または負に誘電率異方性が大きい	しきい値電圧が低く、消費電力が小さい コントラスト比が大きい
5	比抵抗が大きい	電圧保持率が大きく、コントラスト比が大きい
6	紫外線および熱に安定である	寿命が長い
7	弾性定数が大きい	コントラスト比が大きい、応答時間が短い

1) 液晶表示素子に組成物を注入する時間を短縮できる

[0005]

組成物の光学異方性は、素子のコントラスト比に関連する。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。適切な積の値は動作モードの種類に依存する。この値は、TNのようなモードの素子では約 0.45 μm である。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、正または負に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、初期段階において室温だけでなくネマチック相の上限温度に近

い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。長時間使用したあと、室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。紫外線および熱に対する組成物の安定性は、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、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いるAM素子に好ましい。

[0006] TNモードを有するAM素子においては正の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。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。

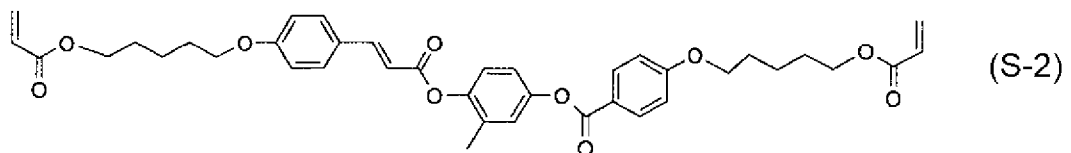
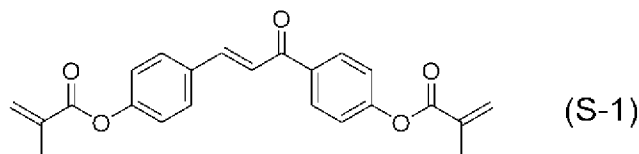
高分子支持配向（PSA；polymer sustained alignment）型のAM素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。高分子支持配向（PSA；polymer sustained alignment）型の液晶表示素子では、重合体を含む液晶組成物が用いられる。まず、少量の重合性化合物を添加した組成物を素子に注入する。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。重合性化合物は重合して、組成物中に重合体の網目構造を生成する。この組成物では、重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。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] ポリイミドのような配向膜の代わりに、シンナメート基を有する低分子化合物やポリビニルシンナメート、カルコン構造を有する低分子化合物、アゾベンゼン構造を有する低分子化合物や dendrimer を用いて液晶の配向を制御する方法が報告されている（特許文献1、2または3）。特許文献1、2または3の方法では、まず、この低分子化合物やポリマーを添加物として液晶組成物に溶解させる。次に、この添加物を相分離させることによってこの低分子化合物やポリマーからなる薄膜を基板上に生成させる。最後に、液晶組成物の上限温度より高い温度で基板に直線偏光を照射する。この直線偏光

によって低分子化合物やポリマー二量化または異性化するとき、その分子が一定方向に配列される。この方法では、低分子化合物やポリマーの種類を選択することにより、IPSやFFSのような水平配向モードの素子とVAのような垂直配向モードの素子とを製造することができる。この方法においては、低分子化合物やポリマーが液晶組成物の上限温度より高い温度で容易に溶解し、室温に戻したとき、この化合物が液晶組成物から容易に相分離することが重要である。ただし、低分子化合物やポリマーと液晶組成物との相溶性を確保するのが困難であった。

[0008] これまでに、配向膜を有しない液晶表示素子において、液晶分子を水平配向させることの出来る化合物として、特許文献2に化合物(S-1)(明細書の段落0034の[化2])、特許文献3には化合物(S-2)(明細書中のP176の化合物[14])等が記載されている。しかし、これらの化合物は液晶分子を十分な配向性で水平配向させるには、高エネルギーの光照射が必要であり、長時間の光照射による製造時間の増加やそれによる液晶へのダメージの懸念があり改善が望まれる。

[0009]



先行技術文献

特許文献

[0010] 特許文献1：国際公開第2015／146369号

特許文献2：国際公開第2017／057162号

特許文献3：国際公開第2017／102068号

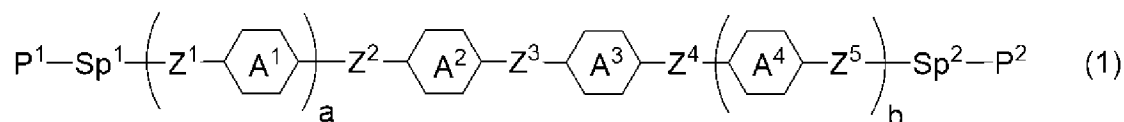
発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0011] 本発明の第一の課題は、化学的に高い安定性、液晶分子を水平配向させる高い能力、広い添加濃度範囲における高い配向性、適切な反応性、および液晶組成物への高い溶解度の少なくとも1つの特性を有し、そして液晶表示素子に用いた場合に電圧保持率が大きいことが期待される化合物を提供することである。第二の課題は、この化合物を含み、そして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、正または負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、大きな弾性定数などの特性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を提供することである。第三の課題は、この組成物を含み、この組成物に紫外線照射することにより極性化合物が素子内で膜を形成した際、その膜が適切な硬度、接触する成分の低い浸透性、高い耐候性、適切な体積抵抗値の少なくとも1つの特性を有し、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命の少なくとも1つの特性を有する液晶表示素子を提供することである。

課題を解決するための手段

[0012] 本発明者らは、以下の式(1)で表される化合物が、上記の課題を解決できることを見出し、発明を完成させた。



(式中の記号の説明は後述する)

発明の効果

[0013] 本発明の第一の長所は、化学的に高い安定性、液晶分子を水平に配向させる高い能力、広い添加濃度範囲における高い配向性、適切な反応性、および液晶組成物への高い溶解度の少なくとも1つを有し、そして液晶表示素子に用いた場合に電圧保持率が大きいことが期待される化合物を提供することであ

る。第二の長所は、この化合物を含み、そして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、正または負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、大きな弾性定数などの特性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を提供することである。第三の長所は、この組成物を含み、この組成物に紫外線照射することにより極性化合物が素子内で膜を形成した際、その膜が適切な硬度、接触する成分の低い浸透性、高い耐候性、適切な体積抵抗値の少なくとも1つの特性を有し、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命の少なくとも1つの特性を有する液晶表示素子を提供することである。本発明の化合物を含む液晶組成物を利用することによって、配向膜の形成工程が不要になるので、製造コストを低減させた液晶表示素子を得ることができる。

発明を実施するための形態

- [0014] 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、その分子構造は棒状 (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目的で添加する化合物である。「極性化合物」は、極性基が基板表面と相互作用することによって液晶分子が配列するのを援助する。
- [0015] 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。液晶性化合物の割合（含有量）は、この液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。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、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。添加物の割合（添加量）は、液晶性化合物の割合と同様に、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。重量百万分率（ppm）が用いられることもある。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重量に基づいて表される。

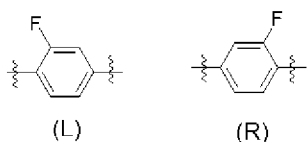
[0016] 式（１）で表される化合物を「化合物（１）」と略することがある。化合物（１）は、式（１）で表される１つの化合物、２つの化合物の混合物、または３つ以上の化合物の混合物を意味する。このルールは、式（２）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物などにも適用される。六角形で囲んだ B^1 、 C^1 、 F などの記号はそれぞれ環 B^1 、環 C^1 、環 F などに対応する。六角形は、シクロヘキサン環やベンゼン環のような六員環またはナフタレン環のような縮合環を表す。この六角形を横切る斜線は、環上の任意の水素が $-S p^1-P^1$ などの基で置き換えられてもよいことを表す。 e などの添え字は、置き換えられた基の数を示す。添え字が０のとき、そのような置き換えはない。

[0017] 末端基 R^{11} の記号を複数の成分化合物に用いた。これらの化合物において、任意の２つの R^{11} が表す２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。例えば、化合物（２）の R^{11} がエチルであり、化合物（３）の R^{11} がエチルであるケースがある。化合物（２）の R^{11} がエチルであり、化合物（３）の R^{11} がプロピルであるケースもある。このルールは、他の末端基、環、結合基などの記号にも適用される。式（８）において、 i が２のとき、２つの環 D^1 が存在する。この化合物において、２つの環 D^1 が表す２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。このルールは、 i が２より大きいときの任意の２つの環 D^1 にも適用される。このルールは、他の環、結合基などの記号にも適用される。

[0018] 「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

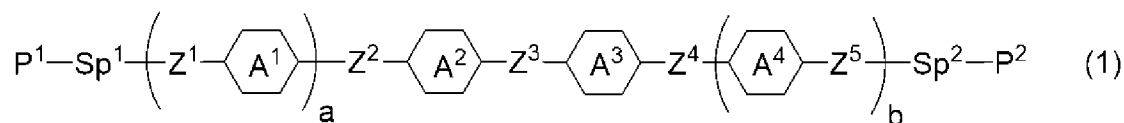
表現は、‘A’の数が1つのとき、‘A’の位置は任意であり、‘A’の数が2つ以上のときも、それらの位置は制限なく選択できる。このルールは、「少なくとも1つの‘A’が、‘B’で置き換えられた」の表現にも適用される。「少なくとも1つのAが、B、C、またはDで置き換えられてもよい」という表現は、少なくとも1つのAがBで置き換えられた場合、少なくとも1つのAがCで置き換えられた場合、および少なくとも1つのAがDで置き換えられた場合、さらに複数のAがB、C、Dの少なくとも2つで置き換えられた場合を含むことを意味する。例えば、少なくとも1つの $-CH_2-$ （または、 $-CH_2CH_2-$ ）が $-O-$ （または、 $-CH=CH-$ ）で置き換えられてもよいアルキルには、アルキル、アルケニル、アルコキシ、アルコシアルキル、アルコシアルケニル、アルケニルオキシアルキルが含まれる。なお、連続する2つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられて、 $-O-O-$ のようになることは好ましくない。アルキルなどにおいて、メチル部分（ $-CH_2-H$ ）の $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられて $-O-H$ になることも好ましくない。

[0019] ハロゲンハロゲンはフッ素、塩素、臭素、またはヨウ素を意味する。好ましいハロゲンは、フッ素または塩素である。さらに好ましいハロゲンはフッ素である。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、一般的に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、ネマチック相の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。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）であってもよいし、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、環から水素を2つ除くことによって生成した非対称な二価基にも適用される。



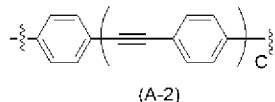
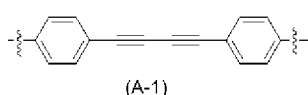
[0020] 本発明は、下記の項などを包含する。

[0021] [1] 式(1)で表される化合物。



式(1)において、

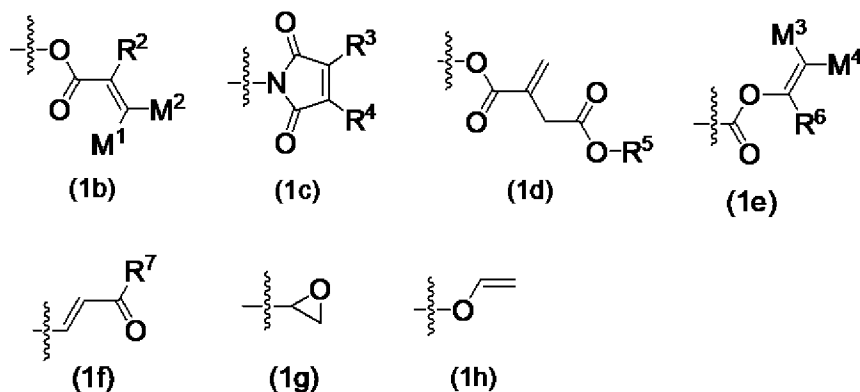
aおよびbは独立して、0、1または2であり、 $0 \leq a+b \leq 3$ であり、環A¹、環A²、環A³および環A⁴は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、アントラセン-2,6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイル、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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、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11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、-Sp¹-P¹、または-Sp²-P²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、aが2のとき、2つの環A¹は異なってもよく、bが2のとき、2つの環A⁴は異なってもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよい。但し、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、 a が2のとき、2つの Z^1 は異なってもよく、 b が2のとき、2つの Z^5 は異なってもよく；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよく、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；



式(1b)～式(1h)において、

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5の

アルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

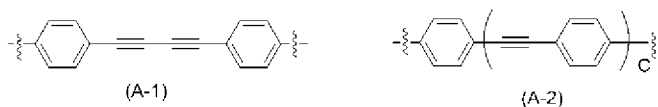
R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、水素または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[0022] [2] 式(1)において、

a および b は独立して、0、1または2であり、 $0 \leq a + b \leq 2$ であり；

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-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、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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、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11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-Sp^1-P^1$ 、または $-Sp^2-P^2$ 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、 a が2のとき、2つの環 A^1 は異なってもよく、 b が

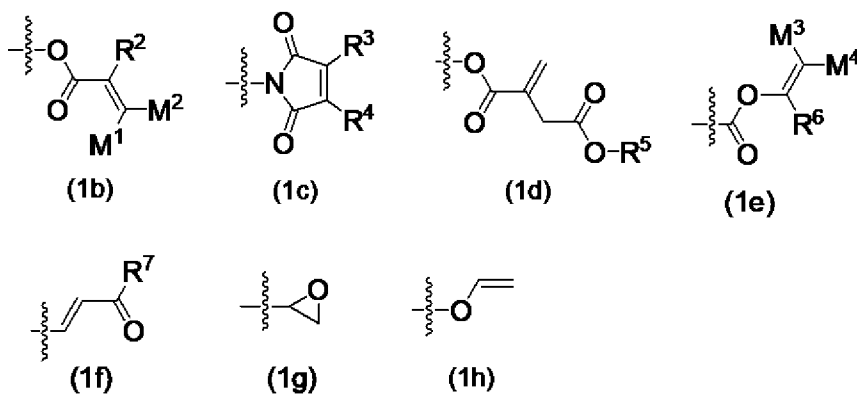
2 のとき、2 つの環 A^4 は異なってもよく、(A-2) において、 c は 2、3、又は 4 である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも 1 つはナフタレン-2, 6-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、(A-1) で表される基または (A-2) で表される基であり；



Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ または $-COCH=CH-$ であり、但し、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 の中で少なくとも 1 つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、 a が 2 のとき、2 つの Z^1 は異なってもよく、2 つの Z^5 は異なってもよく；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ 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く、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合はそれぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式 (1b) ~ 式 (1h) のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；



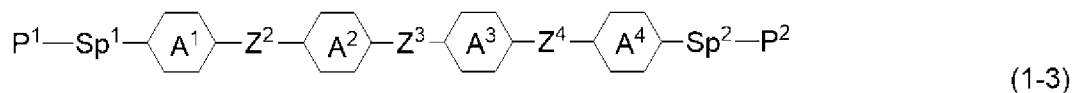
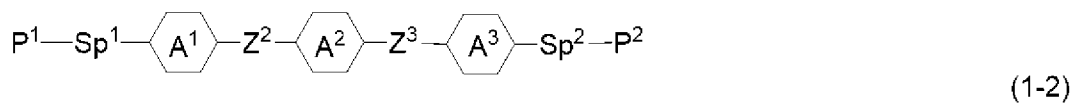
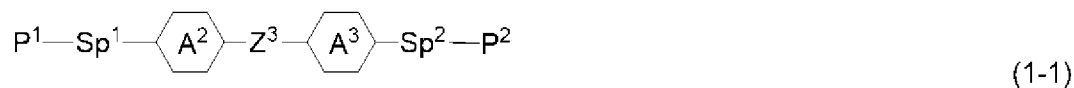
式(1b)～式(1h)において、

M¹、M²、M³およびM⁴は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R²は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの—CH₂—は、—O—で置き換えられてもよく；

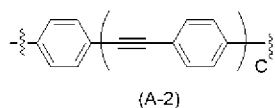
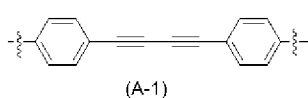
R³、R⁴、R⁵、R⁶、およびR⁷は独立して、水素または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの—CH₂—は、—O—または—S—で置き換えられてもよく、少なくとも1つの—(CH₂)₂—は、—CH=CH—または—C≡C—で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい、[1]に記載の化合物。

[0023] [3] 式(1-1)から式(1-3)のいずれか1つで表される、[1]または[2]に記載の化合物。



式(1-1)から式(1-3)において、

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、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11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-S p^1-P^1$ 、または $-S p^2-P^2$ 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、 a が2のとき、2つの環 A^1 は異なってもよく、 b が2のとき、2つの環 A^4 は異なってもよく、(A-2)において、 c は2、3、又は4である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；

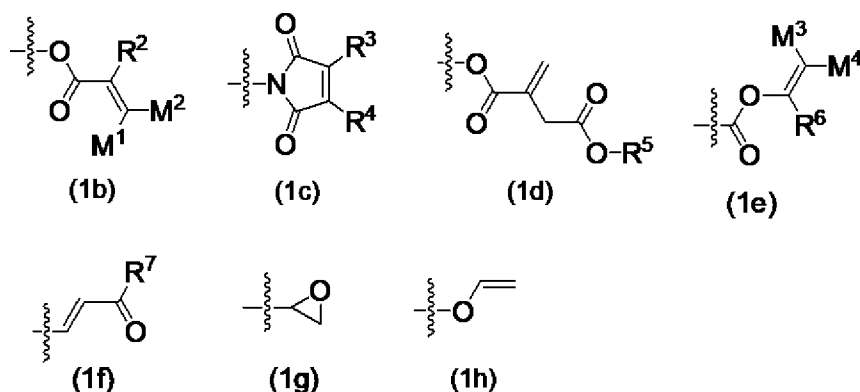


Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

$S p^1$ および $S p^2$ は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、

少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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く、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく、；



式(1b)～式(1h)において、

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

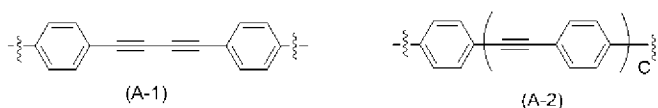
R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[0024] [4] 式(1-1)、式(1-2)および式(1-3)において、

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、フルオレン-2,7

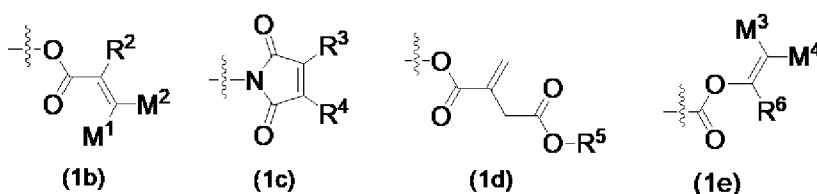
ージイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-S p^1-P^1$ 、または $S p^2-P^2$ で置き換えられてもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴の中で少なくとも1つはナフタレン-2, 6-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

$S p^1$ および $S p^2$ は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、構造内に複数の $S p^1$ または $S p^2$ が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)、式(1c)、式(1d)、または式(1e)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく、；



式(1b)～式(1e)において、

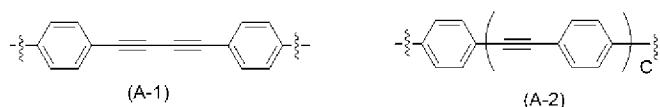
M¹、M²、M³およびM⁴は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R²は水素、ハロゲン、または炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの—CH₂—は、—O—で置き換えられてもよく；

R³、R⁴、R⁵、およびR⁶は独立して、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—(CH₂)₂—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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい、[3]に記載の化合物。

[0025] [5] 式(1-1)、式(1-2)および式(1-3)において、

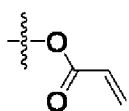
環A¹、環A²、環A³および環A⁴は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



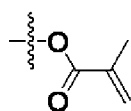
Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

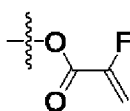
P^1 および P^2 は独立して、式(1b-1)、(1b-2)、(1b-3)、(1b-4)、式(1b-5)、(1c-1)、(1d-1)、(1d-2)または(1e-1)で表される基である[3]に記載の化合物。



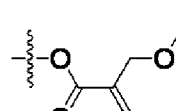
(1b-1)



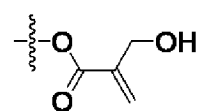
(1b-2)



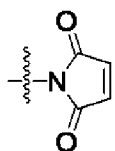
(1b-3)



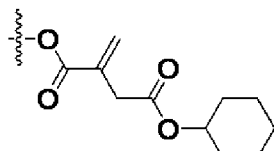
(1b-4)



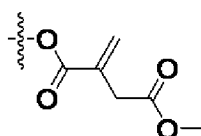
(1b-5)



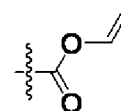
(1c-1)



(1d-1)



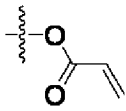
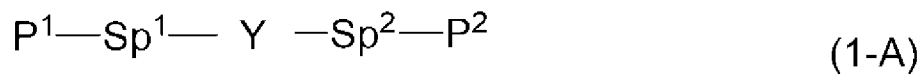
(1d-2)



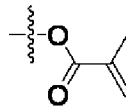
(1e-1)

[0026] [6] 式(1-1)、式(1-2)、または式(1-3)で表される化合物において、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 のいずれか1つは、 $-COO-$ または $-OCO-$ である、[3]に記載の化合物。

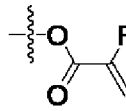
[0027] [7] 式(1-A)で表される、[1]から[6]のいずれか1項に記載の化合物。



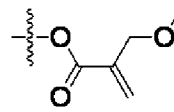
(1b-1)



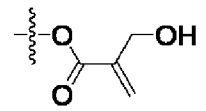
(1b-2)



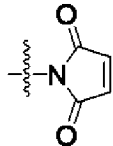
(1b-3)



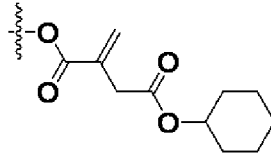
(1b-4)



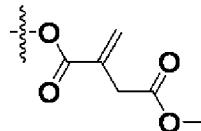
(1b-5)



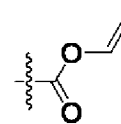
(1c-1)



(1d-1)



(1d-2)

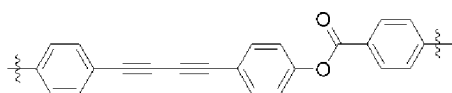


(1e-1)

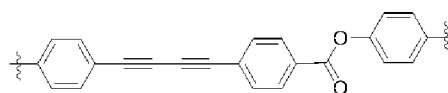
P^1 および P^2 は独立して、式(1b-1)、(1b-2)、(1b-3)、(1b-4)、式(1b-5)、(1c-1)、(1d-1)、(1d-2)または(1e-1)で表される基であり、;

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、;

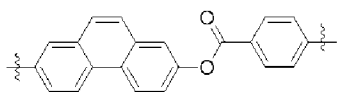
Y は(MES-1-01)から(MES-1-10)のいずれかの式で表される基であり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。



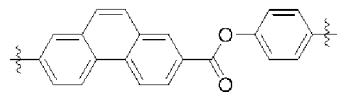
(MES-1-01)



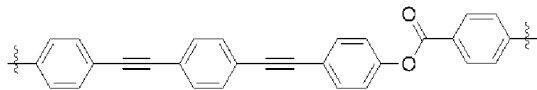
(MES-1-02)



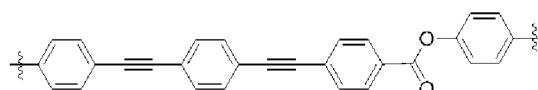
(MES-1-03)



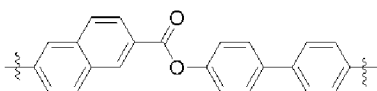
(MES-1-04)



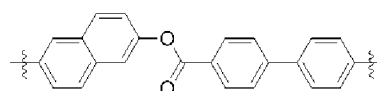
(MES-1-05)



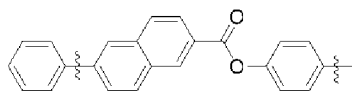
(MES-1-06)



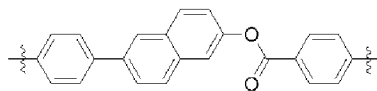
(MES-1-07)



(MES-1-08)



(MES-1-09)

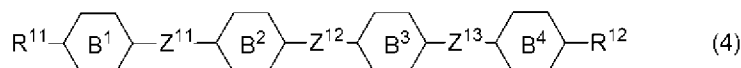
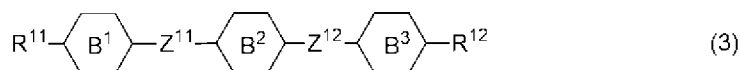
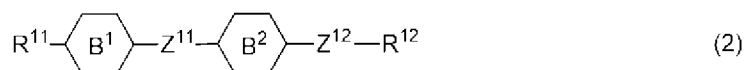


(MES-1-10)

[0028] [8] 式(1-A)で表される化合物において、 $S p^1$ および $S p^2$ が独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよい[7]に記載の化合物。

[0029] [9] [1] から [8] のいずれか1項に記載した化合物の少なくとも1つを含有する液晶組成物。

[0030] [10] 式(2)から式(4)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、[9]に記載の液晶組成物。



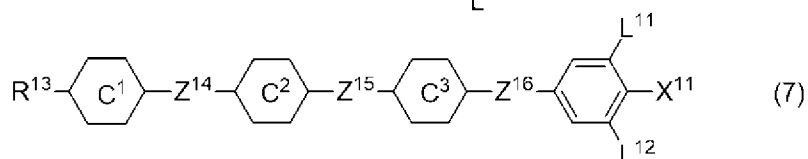
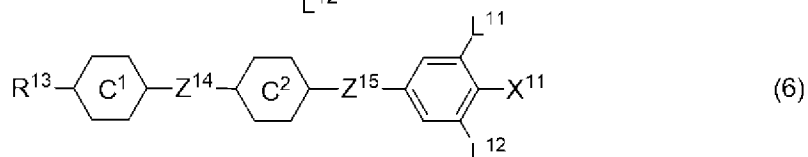
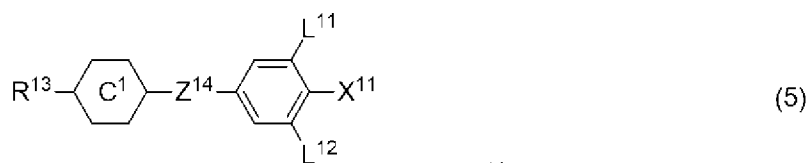
式(2)から式(4)において、

R^{11} および R^{12} は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

環 B^1 、環 B^2 、環 B^3 、および環 B^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

Z^{11} 、 Z^{12} 、および Z^{13} は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、または $-COO-$ である。

[0031] [11] 式(5)から式(7)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、[9]または[10]に記載の液晶組成物。



式(5)から式(7)において、

R^{13} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

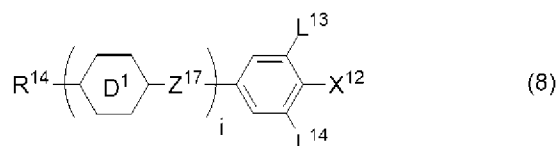
X^{11} は、フッ素、塩素、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、または $-OCF_2CHF_2CF_3$ であり；

環 C^1 、環 C^2 、および環 C^3 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレン、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、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

Z^{14} 、 Z^{15} 、および Z^{16} は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=CF-$ または $-(CH_2)_4-$ であり；

L^{11} および L^{12} は独立して、水素またはフッ素である。

[0032] [12] 式(8)で表される化合物の少なくとも1つの化合物をさらに含有する、[9]から[11]のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(8)において、

R^{14} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{12} は $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ であり；

環 D^1 は、1,4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレン、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、またはピリミジン-2,5-

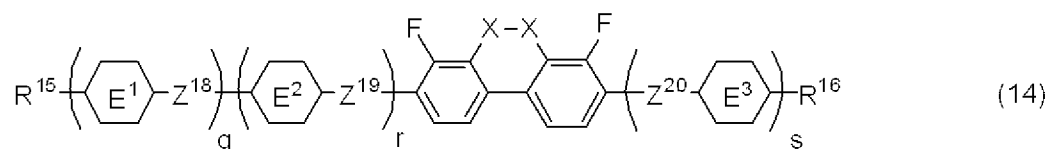
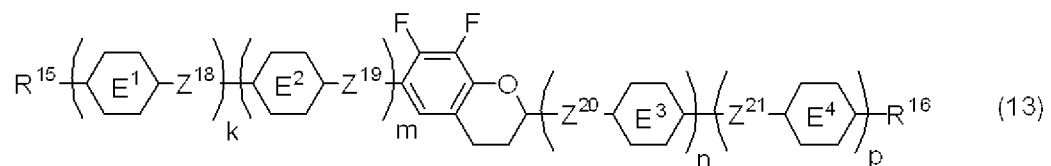
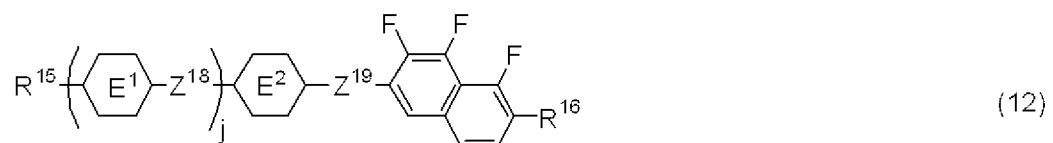
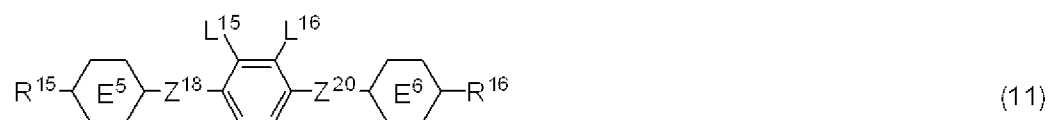
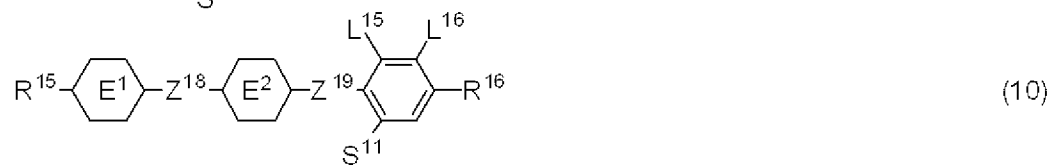
ジイルであり；

Z^{17} は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

L^{13} および L^{14} は独立して、水素またはフッ素であり；

i は、1、2、3、または4である。

[0033] [13] 式(9)から式(15)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、[9]から[12]のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(9)から式(15)において、

R^{15} および R^{16} は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

R^{17} は、水素、フッ素、炭素数1から10のアルキル、または炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

環 E^1 、環 E^2 、環 E^3 、および環 E^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2,6-ジイルであり；

環 E^5 および環 E^6 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2,6-ジイルであり；

Z^{18} 、 Z^{19} 、 Z^{20} 、および Z^{21} は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-OCF_2CH_2CH_2-$ であり；

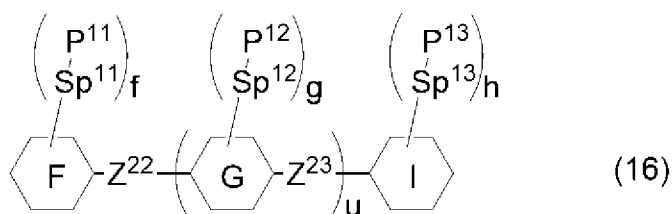
L^{15} および L^{16} は独立して、フッ素または塩素であり；

S^{11} は、水素またはメチルであり；

X は、 $-CHF-$ または $-CF_2-$ であり；

j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q 、 r 、および s は独立して、0または1であり、 k 、 m 、 n 、および p の和は、1または2であり、 q 、 r 、および s の和は、0、1、2、または3であり、 t は、1、2、または3である。

[0034] [14] 式(16)で表される化合物の少なくとも1つの重合性化合物を含む、[9]から[13]のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(16)において、

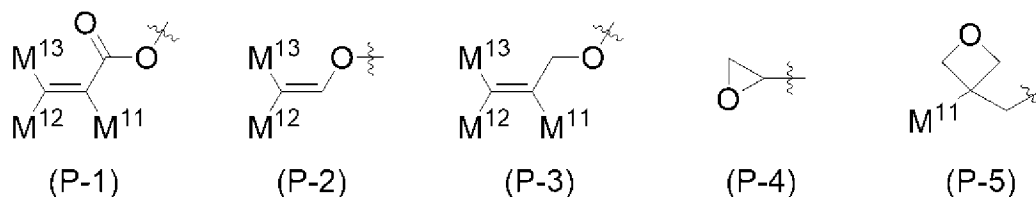
環Fおよび環Iは独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1,3-ジオキサソ-2-イル、ピリミジソ-2-イル、またはピリジソ-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、ハロゲン、炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から12のアルキルで置き換えられてもよく；

環G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、ピリミジソ-2,5-ジイル、またはピリジソ-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、ハロゲン、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つの水素がハロゲン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；

Z²²およびZ²³は独立して、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-、-CO-、-COO-、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-、-C(CH₃)=CH-、-CH=C(CH₃)-、または-C(CH₃)=C(CH₃)-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^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} は独立して、式（P-1）から式（P-5）で表される基の群から選択された重合性基であり；



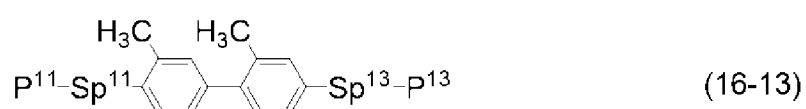
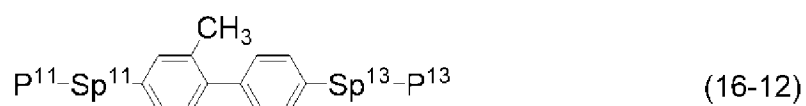
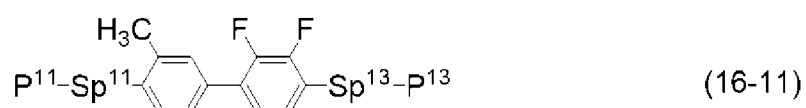
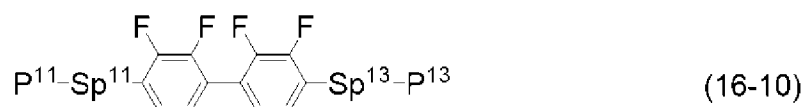
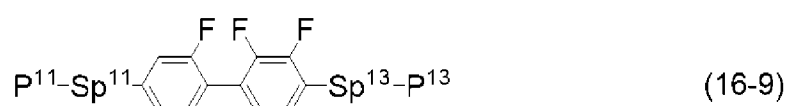
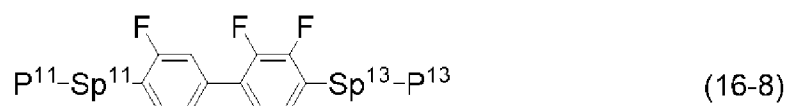
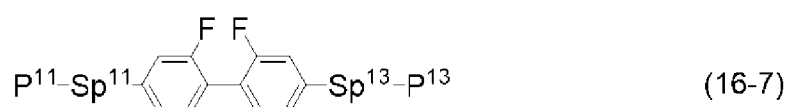
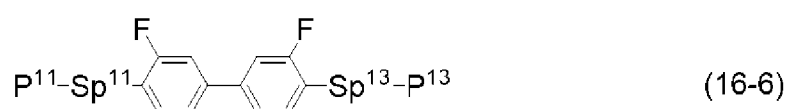
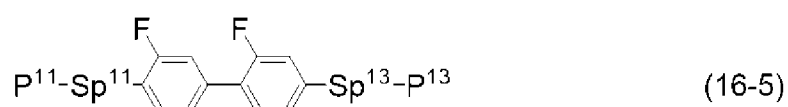
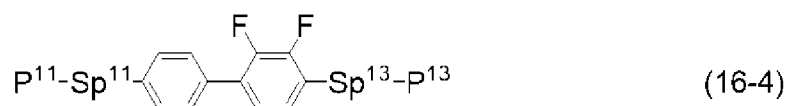
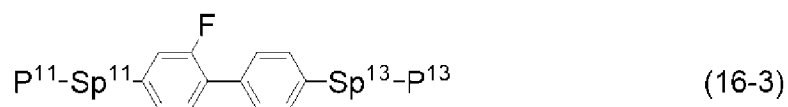
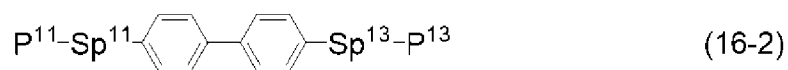
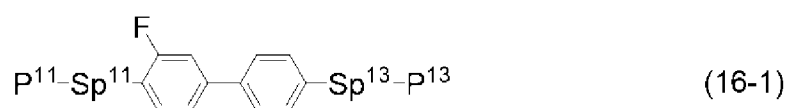
M^{11} 、 M^{12} 、および M^{13} は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

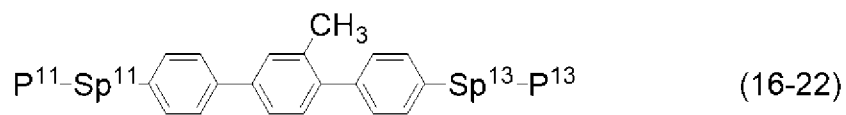
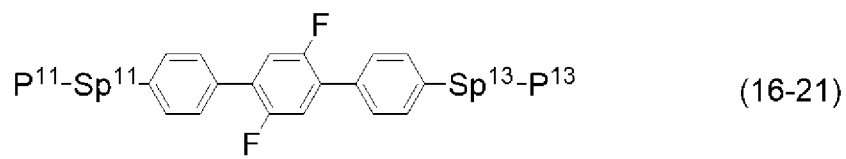
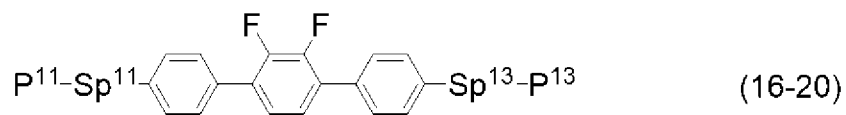
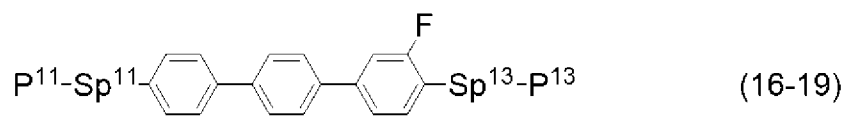
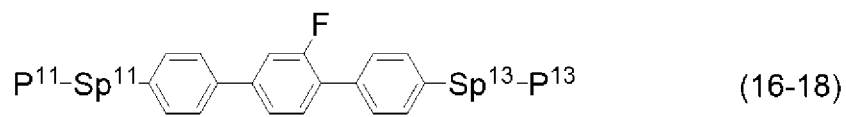
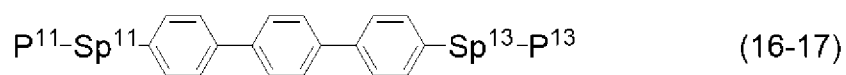
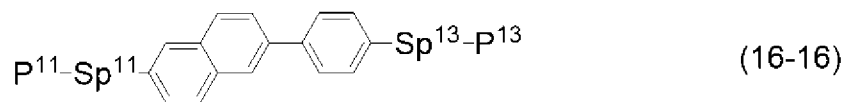
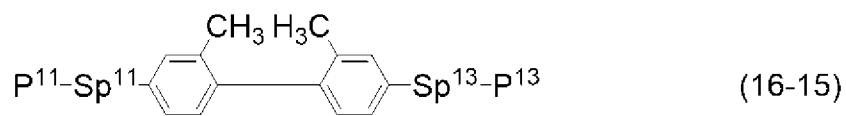
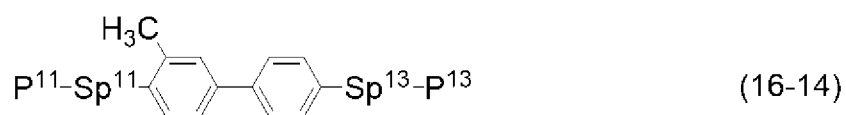
$S p^{11}$ 、 $S p^{12}$ 、および $S p^{13}$ は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

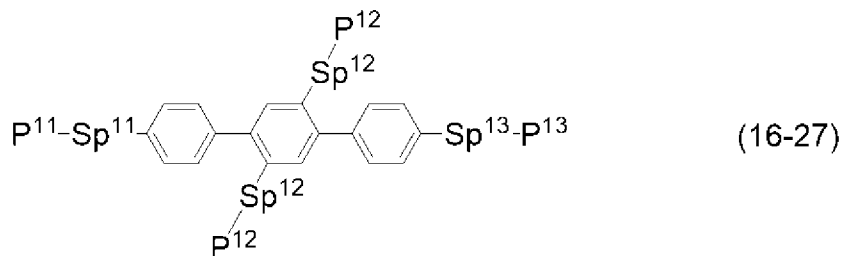
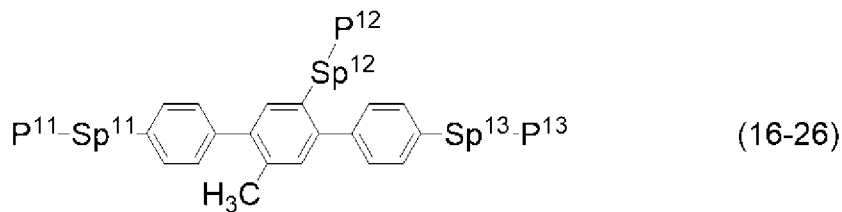
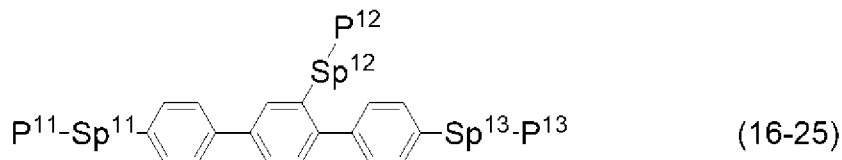
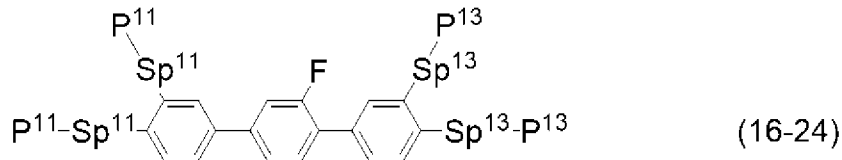
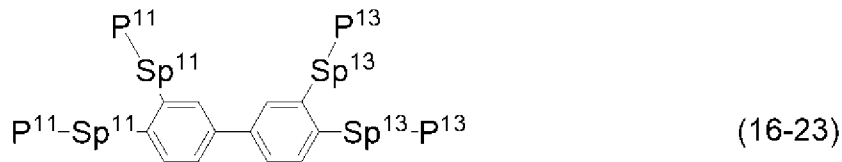
u は、0、1、または2であり；

f 、 g 、および h は独立して、0、1、2、3、または4であり、そして f 、 g 、および h の和は2以上である。

[0035] [15] 式（16-1）から式（16-27）で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの重合性化合物を含有する、[9]から[14]のいずれか1項に記載の液晶組成物。

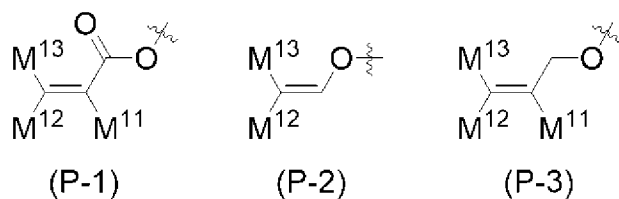






式(16-1)から式(16-27)において、

P^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} は独立して、式(P-1)から式(P-3)で表される基の群から選択された重合性基であり、ここで M^{11} 、 M^{12} 、および M^{13} は独立して、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つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり：



Sp^{11} 、 Sp^{12} 、および Sp^{13} は独立して、単結合または炭素数1から1

O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、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。

[0036] [16]

式(1)および式(16)以外の重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、および消泡剤の少なくとも1つをさらに含有する、[9]から[15]のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0037] [17] [9]から[16]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。

[0038] 本発明は、次の項も含む。(a) 重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤のような添加物の少なくとも2つをさらに含有する上記の液晶組成物。(b) 上記の液晶組成物に化合物(1)または化合物(16)とは異なる重合性化合物を添加することによって調製した重合性組成物。(c) 上記の液晶組成物に化合物(1)と化合物(16)とを添加することによって調製した重合性組成物。(d) 重合性組成物を重合させることによって調製した液晶複合体。(e) この液晶複合体を含有する高分子支持配向型の素子。(f) 上記の液晶組成物に化合物(1)と化合物(16)と、化合物(1)または化合物(16)とは異なる重合性化合物とを添加することによって調製した重合性組成物を使用することによって作成した高分子支持配向型の素子。

化合物(1)の態様、化合物(1)の合成、液晶組成物、および液晶表示素子について順に説明する。

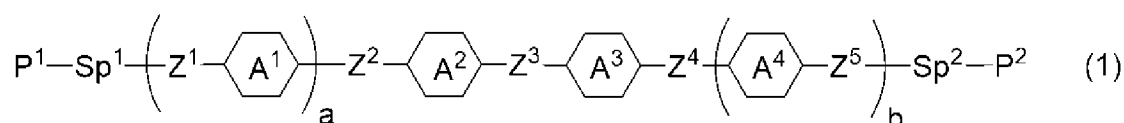
[0039] 1. 化合物(1)の態様

本発明の実施形態にかかる化合物(1)は、少なくとも1つの優れた光吸収構造から構成されるメソゲン部位と、重合性基を有する極性化合物である

ことを特徴とする。化合物（１）は、フェナントレン、ナフタレン、トランなどの構造を分子内に持つことにより、高い光吸収特性および比較的長波長領域の光を吸収する特性を持ち、それらが存在しない化合物と比較し、短時間または低エネルギーの光照射で十分な特性を発現する。

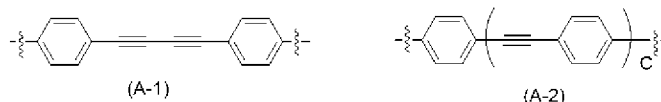
[0040] 化合物（１）の用途の一つは、液晶表示素子に使われる液晶組成物用の添加物である。化合物（１）は液晶分子の配向を水平に制御する目的で添加される。このような添加物は、素子に密閉された条件下では化学的に安定であり、液晶組成物への高い溶解度を有し、そして液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きいことが好ましい。化合物（１）は、このような特性をかなりの程度で充足する。

[0041] 化合物（１）の好ましい例について説明をする。化合物（１）における R^1 、 $Z^1 \sim Z^5$ 、 $A^1 \sim A^4$ 、 Sp^1 、 Sp^2 、 P^1 、 P^2 、 a および b の好ましい例は、化合物（１）の下位式にも適用される。化合物（１）において、これらの基の種類を適切に組み合わせることによって、特性を任意に調整することが可能である。化合物の特性に大きな差異がないので、化合物（１）は、 2H （重水素）、 ^{13}C などの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。



[0042] 環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサソ－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、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、（A－１）で表される基ま

たは (A-2) で表される基であり、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11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-S p^1-P^1$ 、または $-S p^2-P^2$ 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、aが2のとき、2つの環A¹は異なっているとしてもよく、bが2のとき、2つの環A⁴は異なっているとしてもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



[0043] 好ましい環A¹、A²、A³およびA⁴は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-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、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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、好ましいcは1または2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11のアルコキシ、または炭素数2から11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。さらに好ましくは、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、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、または炭素数1から5のアルキルで置き換えられてもよい。特に好ましくは、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、またはペル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、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。

[0044] Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよい。但し、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、 $-COCH=CH-$ のいずれかであり、 a が2のとき、2つの Z^1 は異なってもよく、2つの Z^5 は異なってもよい。

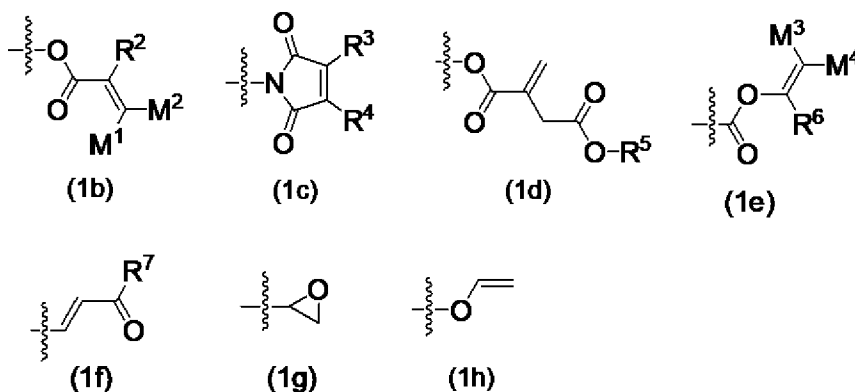
好ましい Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ である。さらに好ましくは、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ である。特に好ましくは、単結合である。

[0045] Sp^1 および Sp^2 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよい。

好ましい $S p^1$ および $S p^2$ は独立して、単結合、炭素数 1～6 のアルキレン、1 つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数 1～6 のアルキレン、または $-O-C-O-$ である。さらに好ましくは、炭素数 1～6 のアルキレン、または $-O-C-O-$ である。

[0046] P^1 および P^2 は独立して、式 (1b) ～式 (1h) のいずれかで表される基である。

[0047] 好ましい P^1 および P^2 は独立して、(1b)、(1c)、(1d)、および (1e) のいずれかで表される基である。



[0048] 好ましい M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルである。さらに好ましくは、水素である。

[0049] R^2 は水素、ハロゲン、または炭素数 1 から 5 のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも 1 つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよい。

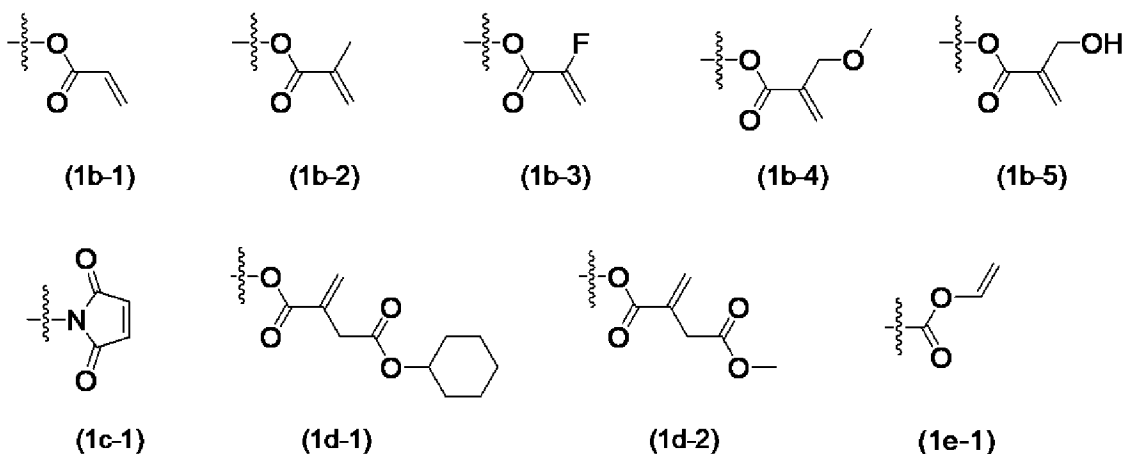
[0050] 好ましい R^2 は、水素、フッ素、メチル、エチル、メトキシメチル、またはトリフルオロメチルである。さらに好ましくは、水素である。

[0051] R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、水素、または炭素数 1 から 5 の直鎖状、分岐状または環状のアルキルであり、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 $-(CH_2)_2-$ 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 つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[0052] 好ましい R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、水素、炭素数 1～1

0の直鎖状アルキル、炭素数2～10の直鎖状アルケニル、炭素数1～10の直鎖状アルコキシ、または炭素数3～6の環状アルキルである。さらに好ましくは、水素、炭素数2～6の直鎖状アルキル、炭素数2～6の直鎖状アルケニル、炭素数1～5の直鎖状アルコキシ、または炭素数4～6の環状アルキルである。

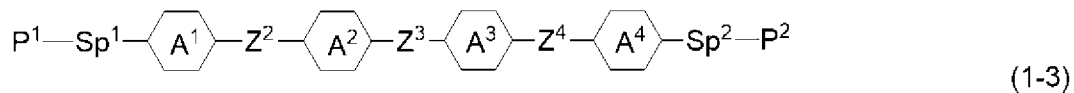
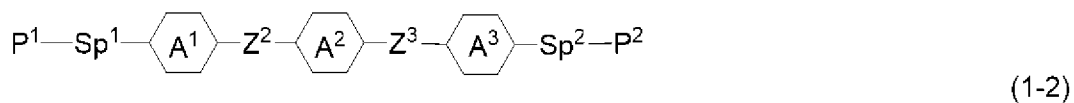
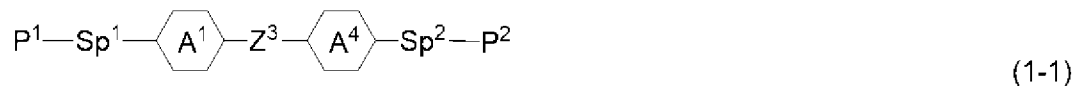
[0053] さらに好ましい基は、式(1b-1)、(1b-2)、(1b-3)、(1b-4)、式(1b-5)、(1c-1)、(1d-1)、(1d-2)または(1e-1)で表される基である。



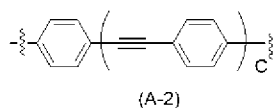
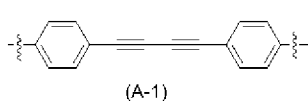
式(1b)～式(1h)において、 M^1 および M^2 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。

[0054] aおよびbは独立して、0、1または2であり、好ましくは、 $0 \leq a + b \leq 2$ である。

[0055] 化合物(1)の好ましい例は、式(1-1)～(1-3)である。



式(1-1)から式(1-3)において、
 環A¹、環A²、環A³および環A⁴は独立して、1,4-シクロヘキシレン、
 1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-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、(A-1)で
 表される基または(A-2)で表される基であり、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11のアルコキシ、炭素数2から
 11のアルケニルオキシ、-S p¹-P¹、または-S p²-P²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、aが2のとき、2つの環A¹は異なっているも
 よく、bが2のとき、2つの環A⁴は異なっているもよく、(A-2)におい
 て、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴
 の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,
 7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であ
 り；



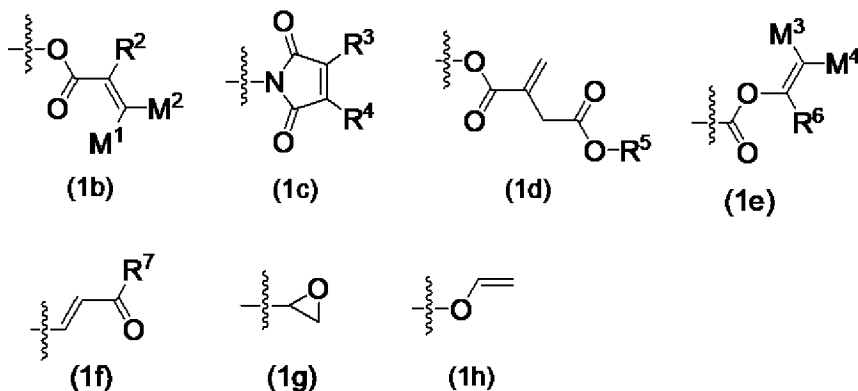
これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1か
 ら12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から11のア
 ルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、-S p¹-P¹、または-
 S p²-P²で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つ
 の水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z²、Z³およびZ⁴は独立して、単結合、-(CH₂)₂-, -CH=CH-,
 -C≡C-, -COO-, -OCO-, -CF₂O-, -OCF₂-, -C
 H₂O-, -OCH₂-, -CF=CF-, -CH=CHCOO-, -OCO
 CH=CH-, -CH=CHCO-または-COCH=CH-であり、ただ
 しZ²、Z³およびZ⁴の中で少なくとも1つは、-COO-, -OCO-, -

$\text{CH}=\text{CHCOO}-$ 、 $-\text{OCOCH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCO}-$ 、または $-\text{COCH}=\text{CH}-$ であり；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCOO}-$ 、または $-\text{OCO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ 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く、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく、；



式(1b)～式(1h)において

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

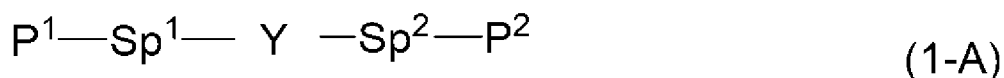
R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、水素、または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2$

)₂—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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[0056] 式(1-1)、式(1-2)、または式(1-3)で表される化合物において、Z²、Z³、またはZ⁴のいずれか1つは、—COO—または—OCO—であることが好ましい。

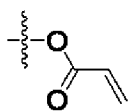
また、式(1-1)、式(1-2)、または式(1-3)で表される化合物において、Z²、Z³、またはZ⁴のいずれか1つは、—CH=CHCOO—、—OCOCH=CH—、—CH=CH—、—CH=CHCO—、または—COCH=CH—であることが好ましい。

[0057] 化合物(1)は、式(1-A)で表される化合物であることが好ましい。

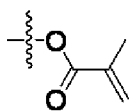


P¹およびP²は独立して、式(1b-1)、(1b-2)、(1b-3)、(1b-4)、式(1b-5)、(1c-1)、(1d-1)、(1d-2)または(1e-1)で表される基であり、

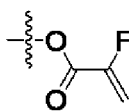
Sp¹およびSp²は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの—CH₂—は、—O—、—COO—、—OCOO—、または—OCO—で置き換えられてもよく、少なくとも1つの—(CH₂)₂—は、—CH=CH—で置き換えられてもよく；



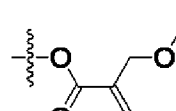
(1b-1)



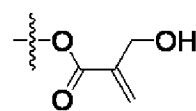
(1b-2)



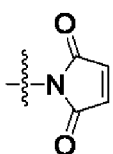
(1b-3)



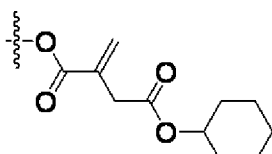
(1b-4)



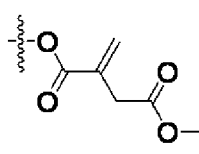
(1b-5)



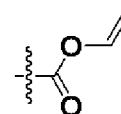
(1c-1)



(1d-1)



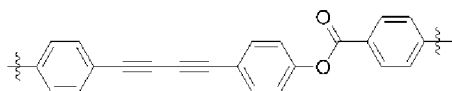
(1d-2)



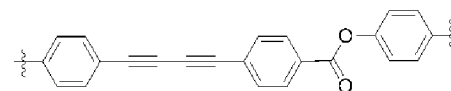
(1e-1)

Yは(MES-1-01)から(MES-1-10)のいずれかの式で表

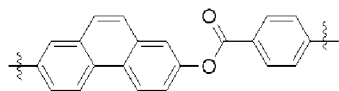
される基であり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。



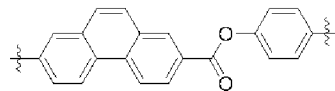
(MES-1-01)



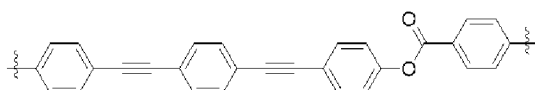
(MES-1-02)



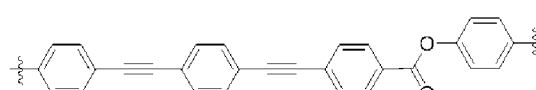
(MES-1-03)



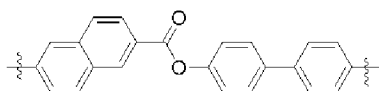
(MES-1-04)



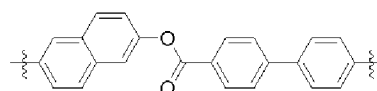
(MES-1-05)



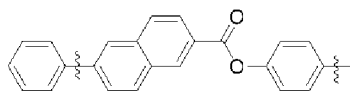
(MES-1-06)



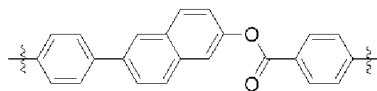
(MES-1-07)



(MES-1-08)



(MES-1-09)



(MES-1-10)

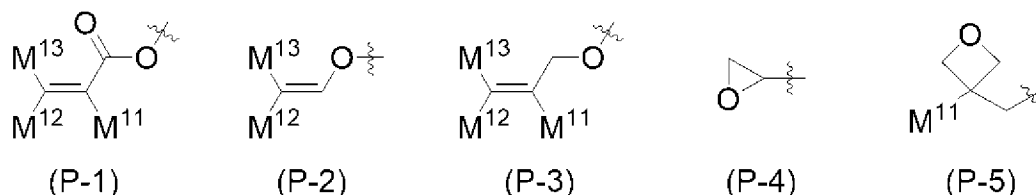
[0058] また、化合物（１）の具体的な例は、後述の実施例の中で述べる。

[0059] 式（２）から（１５）は、液晶組成物の成分化合物を示している。化合物（２）から（４）は小さな誘電率異方性を有する。化合物（５）から（７）は、正に大きな誘電率異方性を有する。化合物（８）はシアノ基を有するので正により大きな誘電率異方性を有する。化合物（９）から（１６）は、負に大きな誘電率異方性を有する。これらの化合物の具体的な例は、後で述べる。

[0060] 化合物（１６）において、 P^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} は独立して、重合性基である。

[0061] 好ましい P^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} は、式（ $P-1$ ）から式（ $P-5$ ）で表される基の群から選択された重合性基である。さらに好ましい P^{11} 、 P^{12} 、

および P^{13} は、基（P-1）、基（P-2）、または基（P-3）である。
特に好ましい基（P-1）は、 $-OCO-CH=CH_2$ または $-OCO-C(CH_3)=CH_2$ である。基（P-1）から基（P-5）の波線は、結合する部位を示す。



[0062] 基（P-1）から基（P-5）において、M¹¹、M¹²、およびM¹³は独立して、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つの水素がハロゲン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M¹¹、M¹²、およびM¹³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M¹¹はメチルであり、さらに好ましいM¹²およびM¹³は水素である。

[0063] S p¹¹、S p¹²、およびS p¹³は独立して、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、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。

[0064] 好ましいS p¹¹、S p¹²、およびS p¹³は、単結合である。

[0065] 環Fおよび環Iは独立して、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、ハロゲン、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つの水素がハロゲン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。

[0066] 好ましい環Fおよび環Iは、フェニルである。環G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、ハロゲン、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つの水素がハロゲン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。特に好ましい環G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。

[0067] Z^{22} および Z^{23} は独立して、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、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い。

[0068] 好ましい Z^{22} および Z^{23} は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ である。さらに好ましい Z^{22} および Z^{23} は、単結合である。

[0069] uは、0、1、または2である。

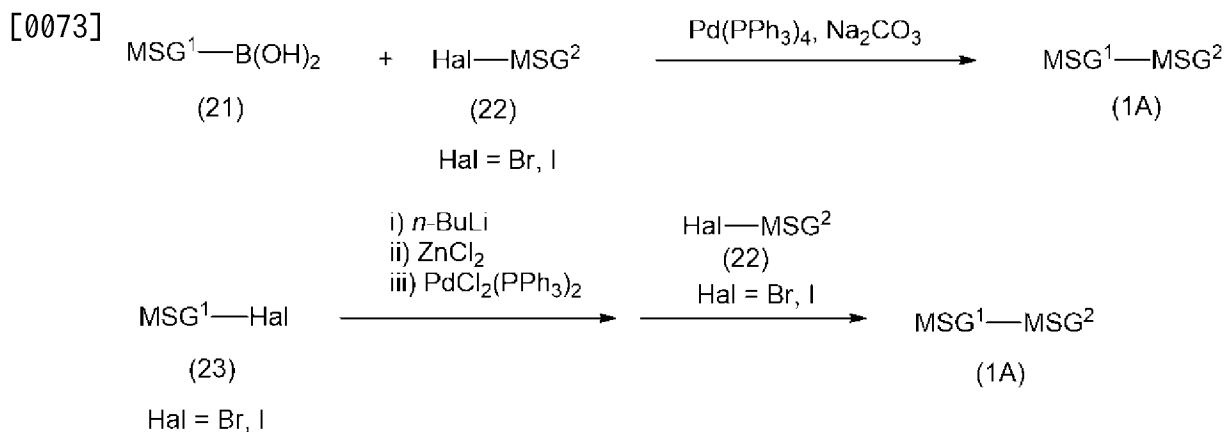
[0070] 好ましいuは、0または1である。f、g、およびhは独立して、0、1、2、3、または4であり、そして、f、g、およびhの和は、1以上である。好ましいf、g、またはhは、1または2である。

[0071] 2. 化合物(1)の合成

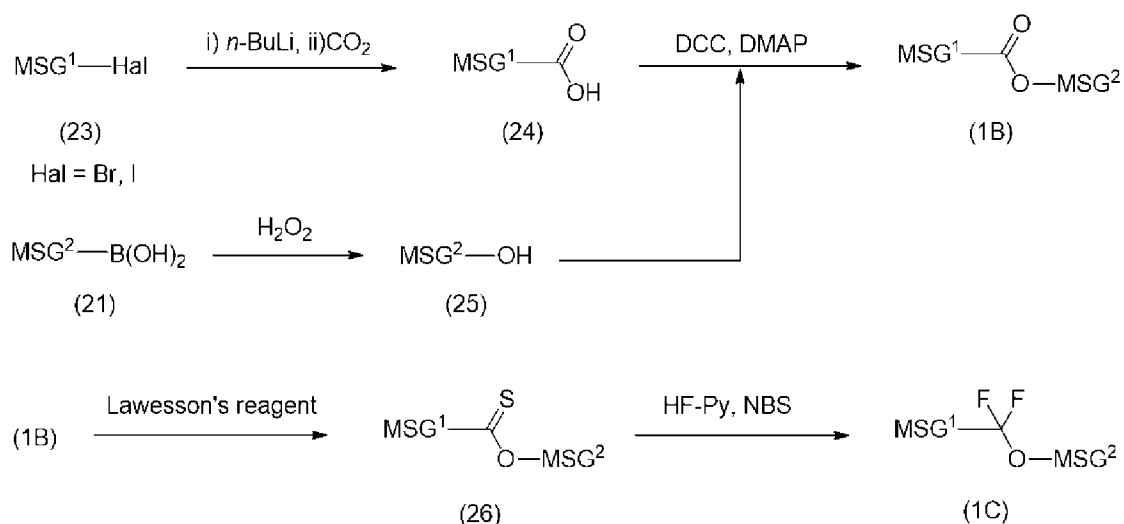
化合物（１）の合成法について説明する。化合物（１）は、有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成できる。合成法を記載しなかった化合物は、「オーガニック・シンセシス」(Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc)、「オーガニック・リアクションズ」(Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc)、「コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス」(Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press)、「新実験化学講座」(丸善)などの成書に記載された方法によって合成する。

[0072] ２－１．結合基 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 の生成

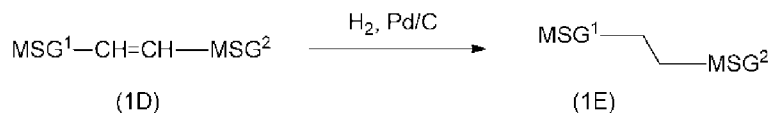
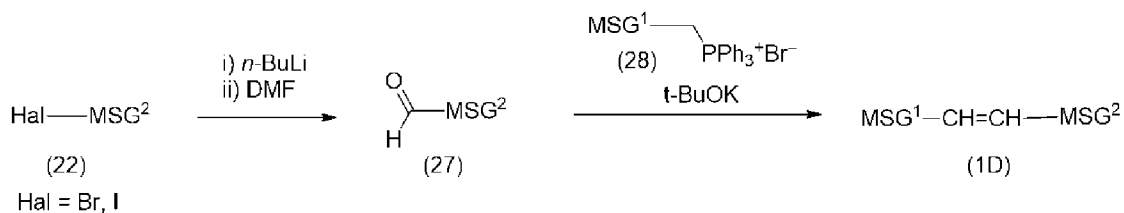
化合物（１）における結合基を生成する方法の例は、下記のスキームのとおりである。このスキームにおいて、 MSG^1 （または MSG^2 ）は、少なくとも１つの環を有する一価の有機基である。複数の MSG^1 （または MSG^2 ）が表す一価の有機基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。化合物（１Ａ）～（１Ｊ）は、化合物（１）または化合物（１）の中間体に相当する。



[0074]



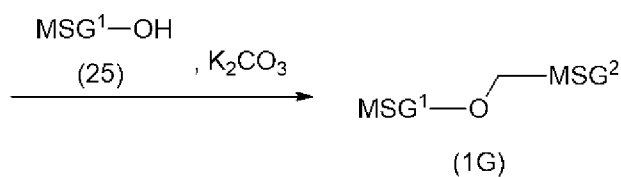
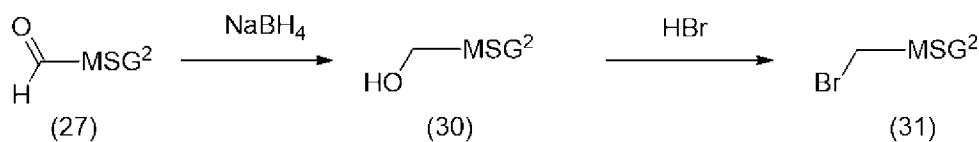
[0075]



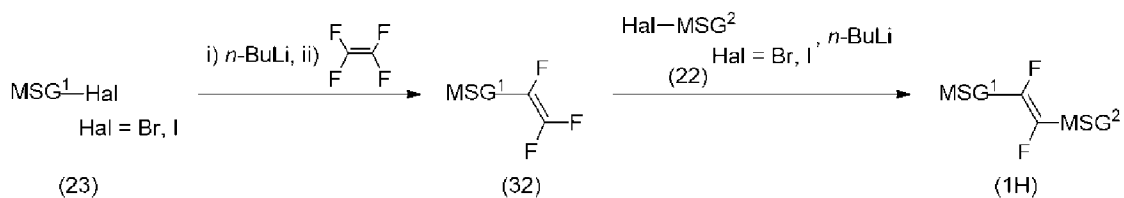
[0076]

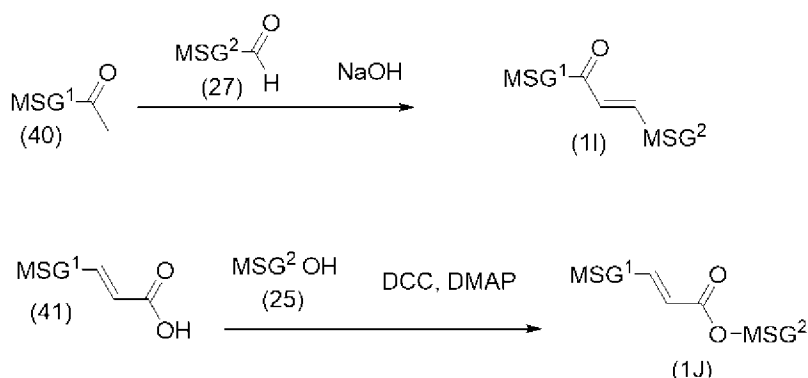


[0077]



[0078]





[0079] (I) 単結合の生成

アリールホウ酸 (21) と化合物 (22) を、炭酸塩、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム触媒の存在下で反応させ、化合物 (1A) を合成する。この化合物 (1A) は、化合物 (23) に *n*-ブチルリチウムを、次いで塩化亜鉛を反応させ、ジクロロビス (トリフェニルホスフィン) パラジウム触媒の存在下で化合物 (22) を反応させても合成される。

[0080] (II) -COO- と -OCO- の生成

化合物 (23) に *n*-ブチルリチウムを、次いで二酸化炭素を反応させ、カルボン酸 (24) を得る。このカルボン酸 (24) と、化合物 (21) から誘導したフェノール (25) とを DCC (1,3-ジシクロヘキシルカルボジイミド) と DMAP (4-ジメチルアミノピリジン) の存在下で脱水させて -COO- を有する化合物 (1B) を合成する。この方法によって -OCO- を有する化合物も合成する。

[0081] (III) -CF₂O- と -OCF₂- の生成

化合物 (1B) をローソン試薬で硫黄化し、化合物 (26) を得る。化合物 (26) をフッ化水素ピリジン錯体と NBS (N-ブロモスクシンイミド) でフッ素化し、-CF₂O- を有する化合物 (1C) を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827. を参照。化合物 (1C) は化合物 (26) を DAST ((ジエチルアミノ) サルファートリフルオリド) でフッ素化しても合成される。W. H. Bunelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768. を参照。この方法によって -OCF₂- を有する化合物も合成する。

[0082] (IV) -CH=CH- の生成

化合物(22)をn-ブチルリチウム、次いでDMF(N,N-ジメチルホルムアミド)と反応させてアルデヒド(27)を得る。ホスホニウム塩(28)とカリウムtert-ブトキシドを反応させて発生させたリンイリドを、アルデヒド(27)と反応させて化合物(1D)を合成する。反応条件によってはシス体が生成するので、必要に応じて公知の方法によりシス体をトランス体に異性化する。

[0083] (V) $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ の生成

化合物(1D)をパラジウム炭素触媒の存在下で水素化し、化合物(1E)を合成する。

[0084] (VI) $-\text{C}\equiv\text{C}-$ の生成

ジクロロパラジウムとヨウ化銅の触媒存在下で、化合物(23)に2-メチル-3-ブチン-2-オールを反応させたのち、塩基性条件下で脱保護して化合物(29)を得る。ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウムとハロゲン化銅との触媒存在下、化合物(29)を化合物(22)と反応させて、化合物(1F)を合成する。

[0085] (VII) $-\text{CH}_2\text{O}-$ と $-\text{OCH}_2-$ の生成

化合物(27)を水素化ホウ素ナトリウムで還元して化合物(30)を得る。これを臭化水素酸で臭素化して化合物(31)を得る。炭酸カリウムの存在下、化合物(25)と化合物(31)を反応させて、化合物(1G)を合成する。この方法によって $-\text{OCH}_2-$ を有する化合物も合成する。

[0086] (VIII) $-\text{CF}=\text{CF}-$ の生成

化合物(23)をn-ブチルリチウムで処理したあと、テトラフルオロエチレンを反応させて化合物(32)を得る。化合物(22)をn-ブチルリチウムで処理したあと化合物(32)と反応させて、化合物(1H)を合成する。

[0087] (IX) $-\text{CH}=\text{CHCO}-$ と $-\text{COCH}=\text{CH}-$ の生成

化合物(40)と化合物(27)をNaOH存在下で、アルドール縮合反応をし化合物(1I)を合成する。

[0088] (X) $-\text{CH}=\text{CHCOO}-$ と $-\text{OCOCH}=\text{CH}-$ の生成

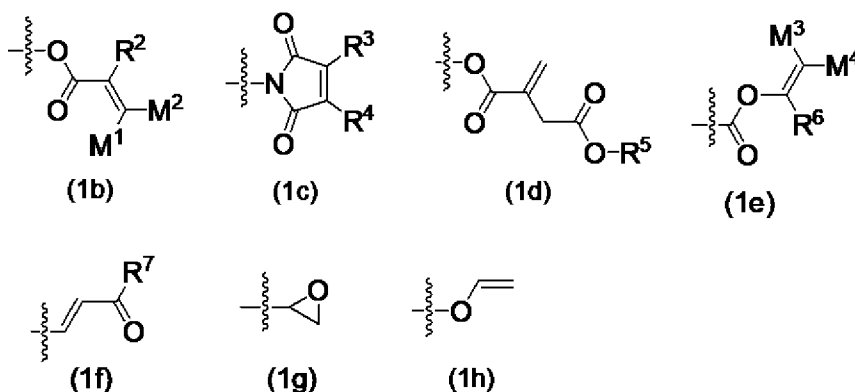
ケイ皮酸(41)と、化合物(25)をDCC(1,3-ジシクロヘキシルカルボジイミド)とDMAP(4-ジメチルアミノピリジン)の存在下で脱水させて化合物(1J)を合成する。

[0089] 2-2. 環 A^1 、 A^2 、 A^3 および A^4 の生成

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、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2-メチル-1,4-フェニレン、2-エチル-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-ジオキサソ-2,5-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-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、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-ジイルなどの環に関しては出発物が市販されているか、または合成法がよく知られている。(A-1)で表される基および(A-2)で表される基は、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ の生成を参考に合成できる。

[0090] 2-3. 連結基 S_{p^1} または S_{p^2} 、および重合性基 P^1 または P^2 の生成

重合性基 P^1 または P^2 の好ましい例は、アクリロイルオキシ(1b)、マレイミド(1c)、イタコン酸エステル(1d)、ビニルエステル(1e)、オキシラニル(1f)、またはビニルオキシ(1h)である。



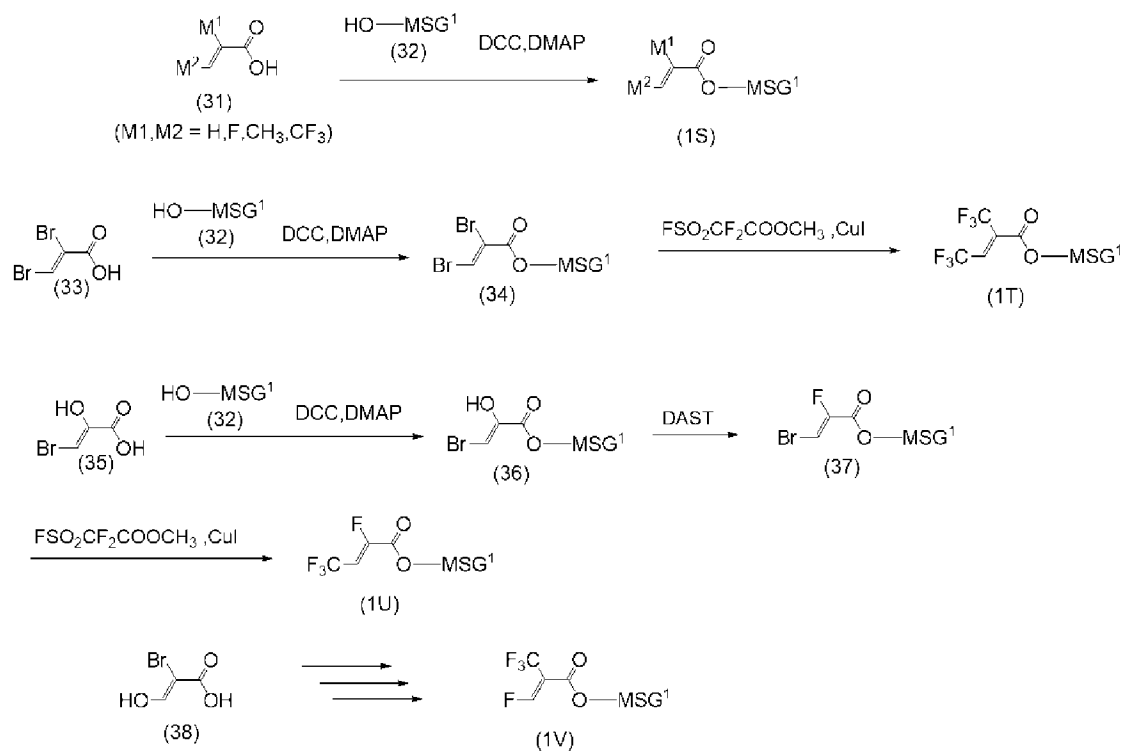
[0091] この重合性基が連結基 S_{p^1} または S_{p^2} で環に結合した化合物を合成する

方法の例は、下記のとおりである。まず、連結基 $S p^1$ または $S p^2$ が単結合である例を示す。

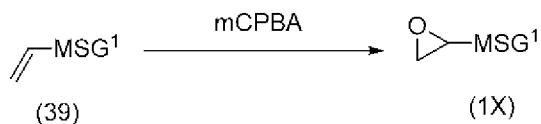
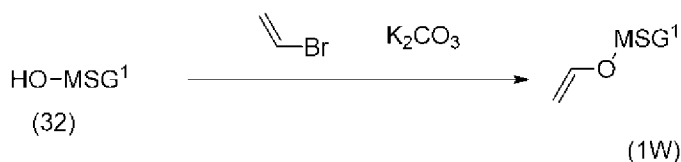
[0092] (1) 単結合である化合物の合成

$S p^1$ または $S p^2$ が単結合である化合物の合成方法は、下記のスキームのとおりである。このスキームにおいて、 MSG^1 は、少なくとも 1 つの環を有する一価の有機基である。化合物 (1S) から (1Z) は、化合物 (1) に相当する。重合性基がアクリレート誘導体の場合は、対応するアクリル酸と $HO-MSG^1$ とのエステル化によって合成する。ビニルオキシは、 $HO-MSG^1$ と臭化ビニルのエーテル化により合成する。オキシラニルは、末端 2 重結合の酸化により合成する。マレイミド基は、アミノ基と無水マレイン酸との反応により合成する。イタコン酸エステルは、対応するイタコン酸と $HO-MSG^1$ とのエステル化によって合成する。ビニルエステルは、酢酸ビニルと $HOOC-MSG^1$ とのエステル交換反応により合成する。

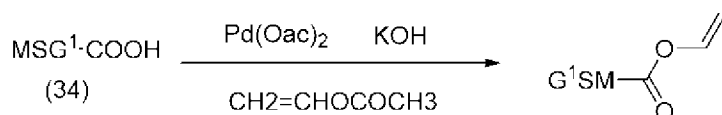
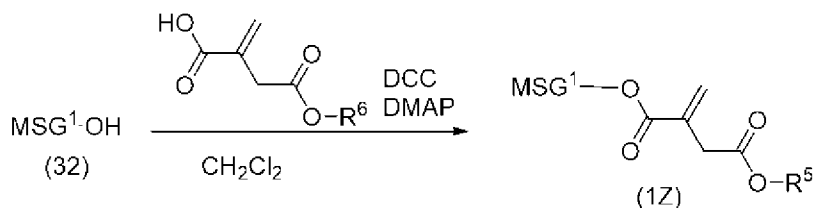
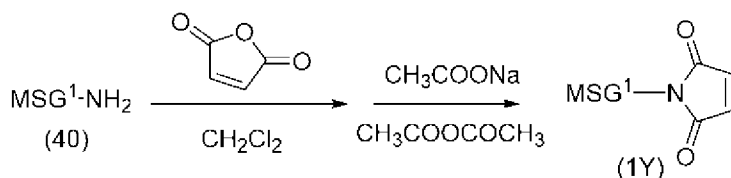
[0093]



[0094]



[0095]

[0096] 連結基 S p^1 または S p^2 が単結合である化合物の合成法を以上に述べた。

その他の連結基を生成する方法は、結合基 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 の合成法を参考に合成できる。

[0097] 2-4. 合成例

化合物 (1) を合成する方法の例は、次のとおりである。これらの化合物において、MES は、少なくとも 1 つの環を有するメソゲン基である。 P^1 、 M^1 、 M^2 、 S p^1 、および S p^2 の定義は、前記と同一である。

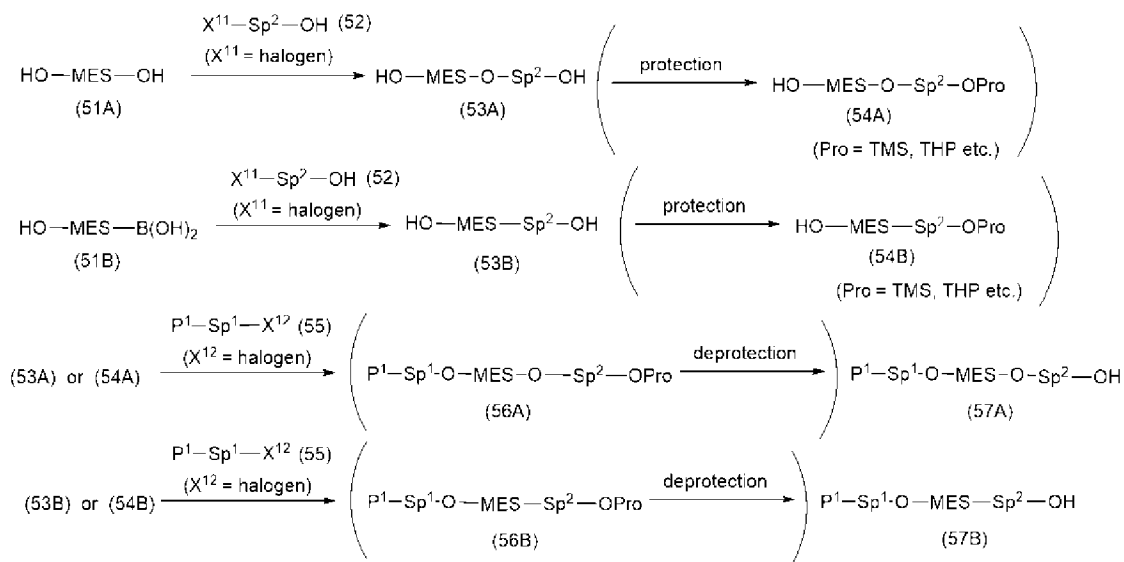
化合物 (51A)、および化合物 (51B) は、市販されているか、もしくは適切な環構造を有するメソゲン (MES) を出発物として一般的な有機合成法に従って合成することができる。

MES と S p^1 がエーテル結合で連結している化合物を合成する場合は、化合物 (51A) を出発物として、化合物 (52) および水酸化カリウムなどの塩基を用いてエーテル化を行うことにより、化合物 (53A) を得ること

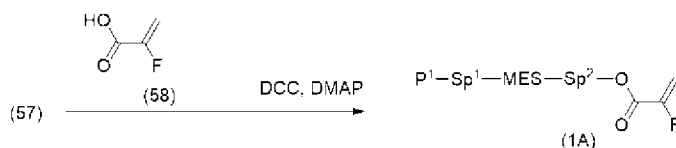
ができる。またMESとSp¹が単結合で連結している化合物を合成する場合は、化合物(51B)を出発物として、化合物(52)、パラジウムなどの金属触媒、および塩基を使用してクロスカップリング反応を行うことによって、化合物(53B)を得ることができる。化合物(53A)または(53B)は必要に応じてTMS、THPなどの保護基を作用させた化合物(54A)または(54B)に誘導する場合がある。

その後、化合物(53A)、(53B)、(54A)または化合物(54B)から、化合物(55)および水酸化カリウムなどの塩基の存在下で再度エーテル化を行うことにより、化合物(57A)または(57B)を得ることができる。この際、前段階で保護基を作用させた場合は、脱保護反応によって保護基を取り除く。

[0098]



P²が式(1b-3)で表される基である化合物(1A)は、化合物(57)より以下の方法で合成できる。化合物(57)から、化合物(58)、DCCおよびDMAPの存在下でエステル化反応を行うことにより化合物(1A)に誘導できる。



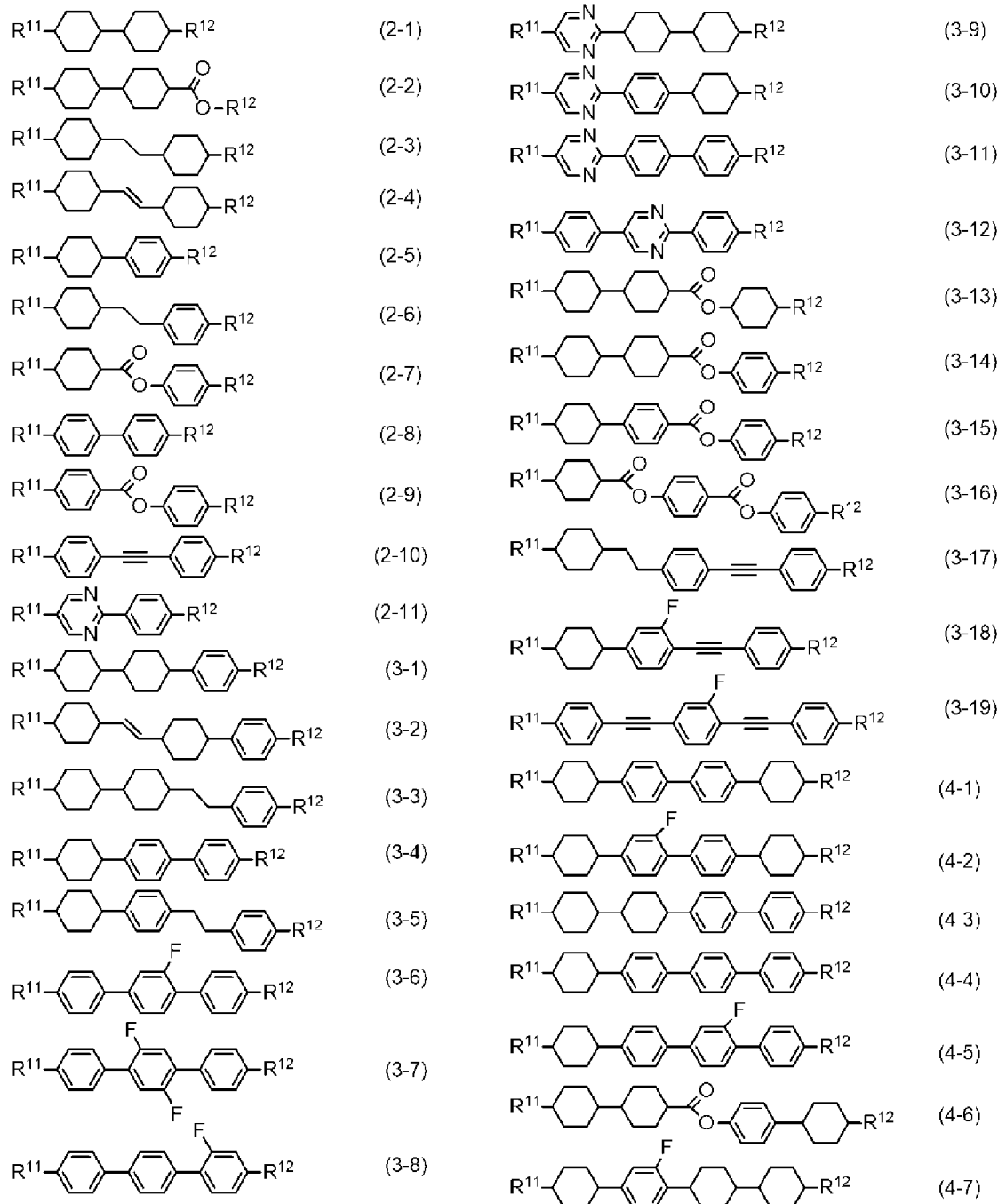
[0099] 3. 液晶組成物

本発明の実施形態にかかる液晶組成物は、化合物（１）を成分Ａとして含む。化合物（１）は、素子の基板との非共有結合的な相互作用によって、液晶分子の配向の制御に寄与することができる。この組成物は、化合物（１）を成分Ａとして含み、以下に示す成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥから選択された液晶性化合物をさらに含むことが好ましい。成分Ｂは、化合物（２）から（４）である。成分Ｃは化合物（５）から（７）である。成分Ｄは、化合物（８）である。成分Ｅは、化合物（９）から（１６）である。この組成物は、化合物（２）から（１６）とは異なる、その他の液晶性化合物を含んでもよい。この組成物を調製するときには、正または負の誘電率異方性の大きさなどを考慮して成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥを選択することが好ましい。成分を適切に選択した組成物は、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性（すなわち、大きな光学異方性または小さな光学異方性）、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、熱または紫外線に対する安定性、および適切な弾性定数（すなわち、大きな弾性定数または小さな弾性定数）を有する。

[0100] 化合物（１）の好ましい割合は、紫外線に対して高い安定性を維持するために液晶組成物の重量に基づいて、通常、約０．０１重量％以上であり、液晶組成物へ溶解させるために、通常、約１０重量％以下である。さらに好ましい割合は、液晶組成物の重量に基づいて、約０．１重量％から約５重量％の範囲である。最も好ましい割合は、液晶組成物の重量に基づいて、約０．５重量％から約３重量％の範囲である。

[0101] 成分Ｂは、２つの末端基がアルキルなどである化合物である。成分Ｂの好ましい例として、化合物（２－１）から（２－１１）、化合物（３－１）から（３－１９）、および化合物（４－１）から（４－７）を挙げることができる。成分Ｂの化合物において、 R^{11} および R^{12} は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルまたはアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよい。

[0102]

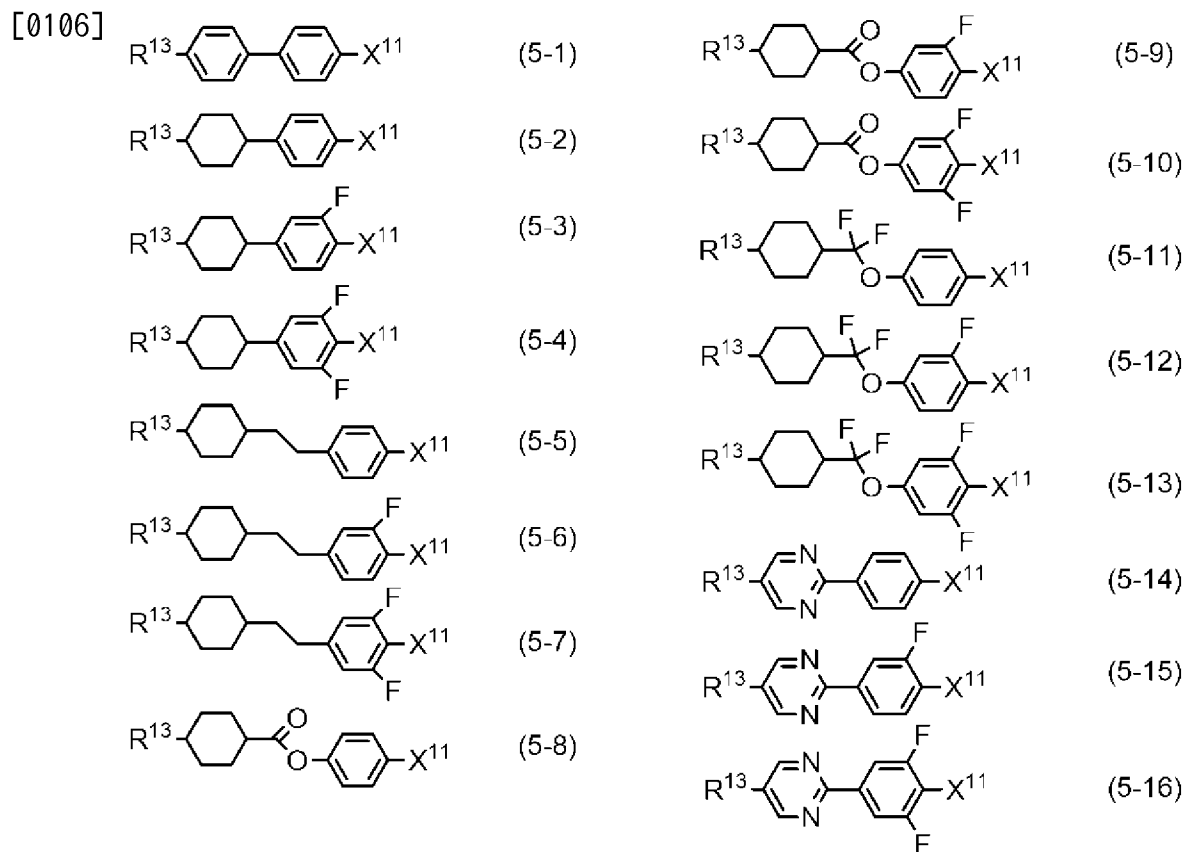


[0103] 成分Bは、誘電率異方性の絶対値が小さいので、中性に近い化合物である。化合物(2)は、主として粘度の減少または光学異方性の調整に効果がある。化合物(3)および(4)は、上限温度を高くすることによってネマチック相の温度範囲を広げる効果、または光学異方性の調整に効果がある。

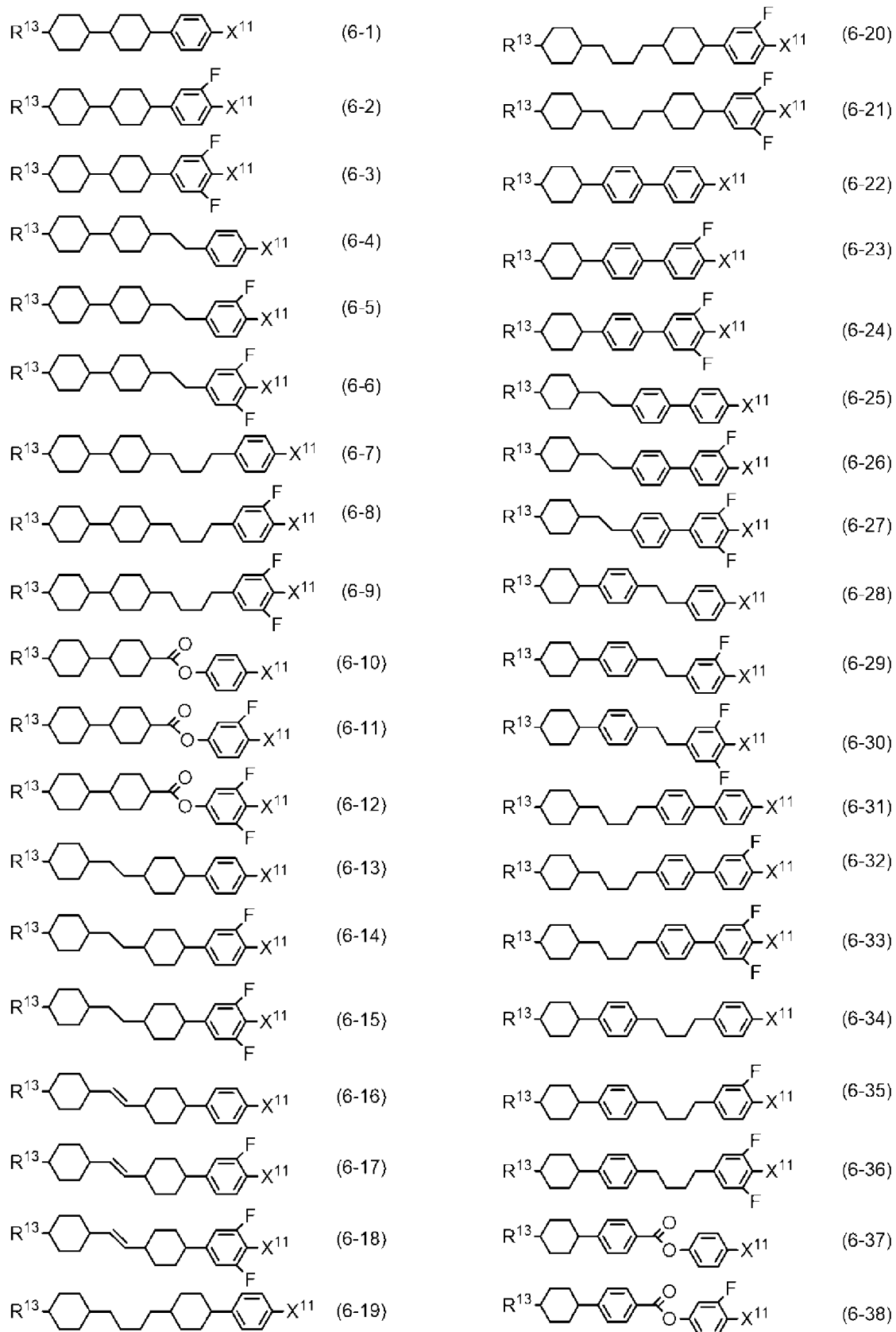
[0104] 成分Bの含有量を増加させるにつれて組成物の誘電率異方性が小さくなるが粘度は小さくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、

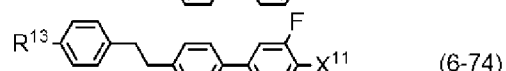
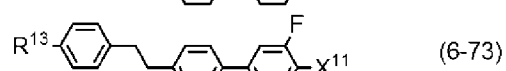
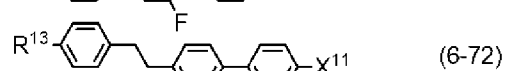
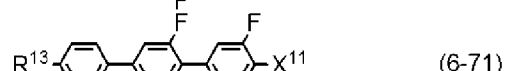
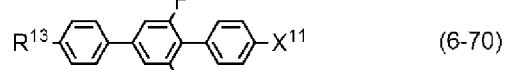
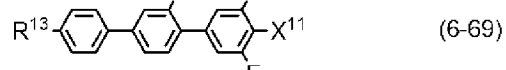
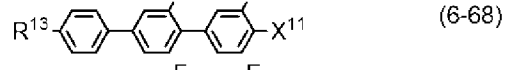
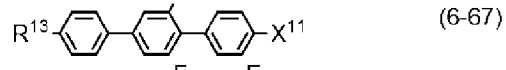
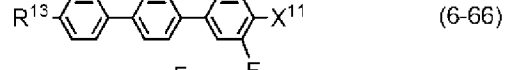
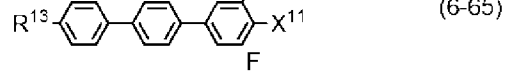
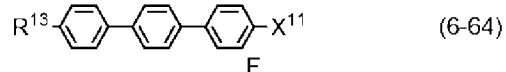
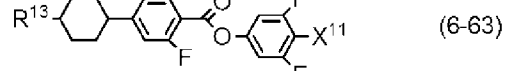
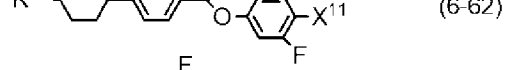
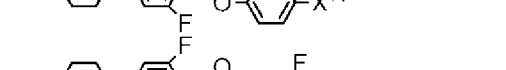
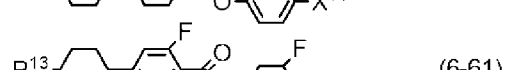
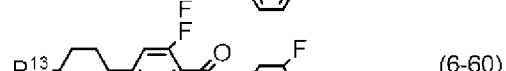
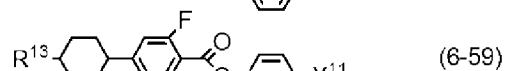
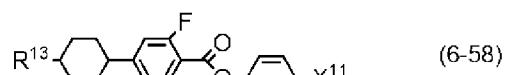
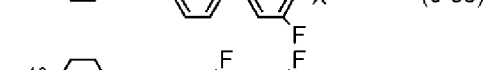
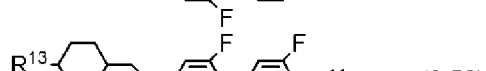
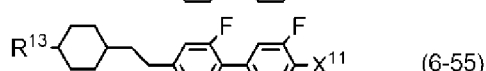
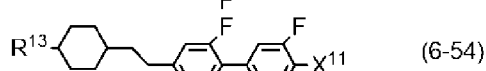
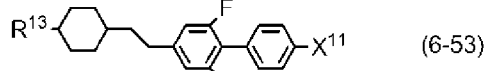
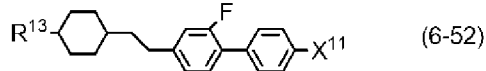
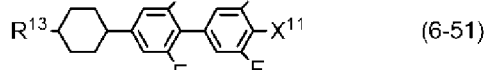
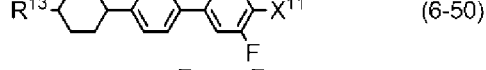
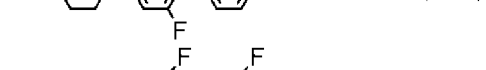
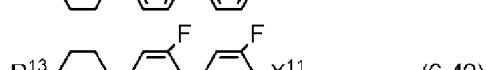
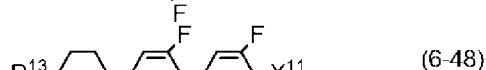
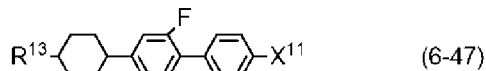
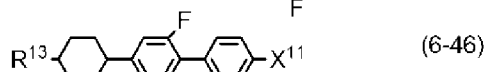
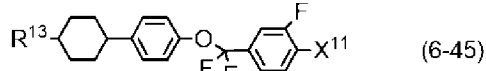
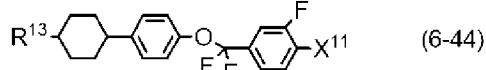
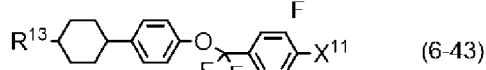
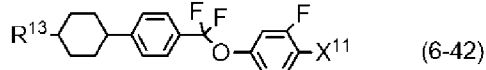
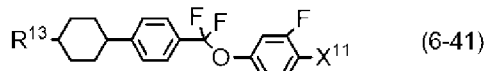
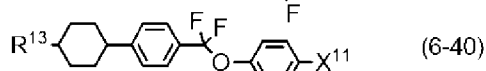
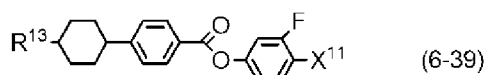
含有量は多いほうが好ましい。IPS、VAなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分Bの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて、好ましくは30重量%以上、さらに好ましくは40重量%以上である。

[0105] 成分Cは、右末端にハロゲンまたはフッ素含有基を有する化合物(5)～(7)である。成分Cの好ましい例として、化合物(5-1)から(5-16)、化合物(6-1)から(6-120)、化合物(7-1)から(7-63)を挙げることができる。成分Cの化合物において、 R^{13} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^{11} は、フッ素、塩素、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、または $-OCF_2CHF_2CF_3$ である。

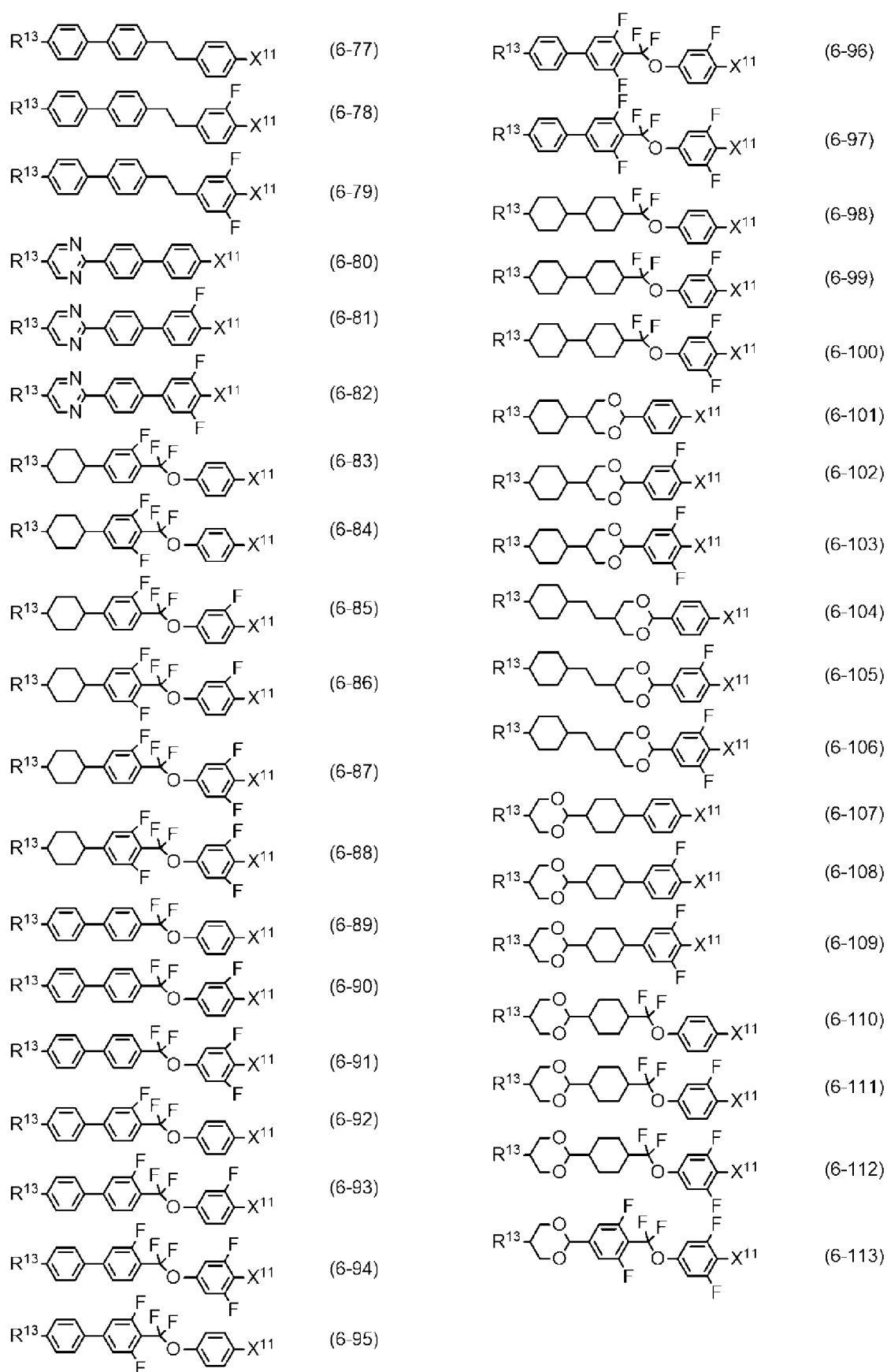


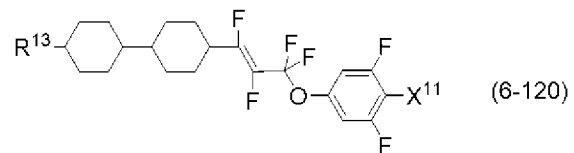
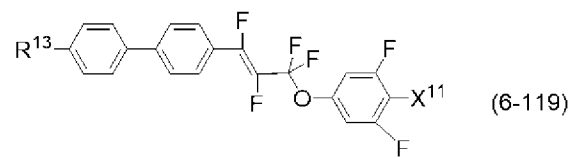
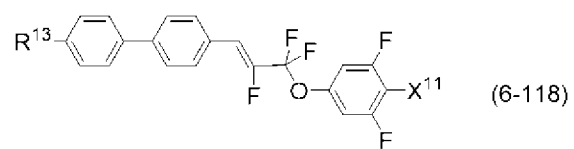
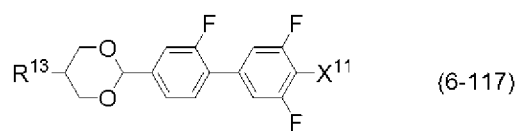
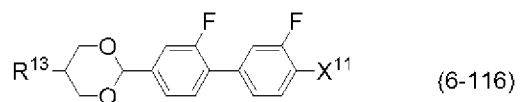
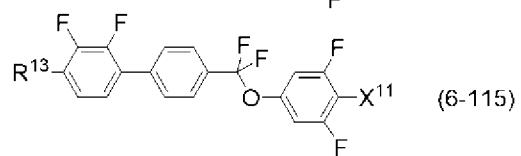
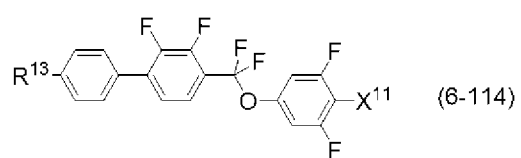
[0107]



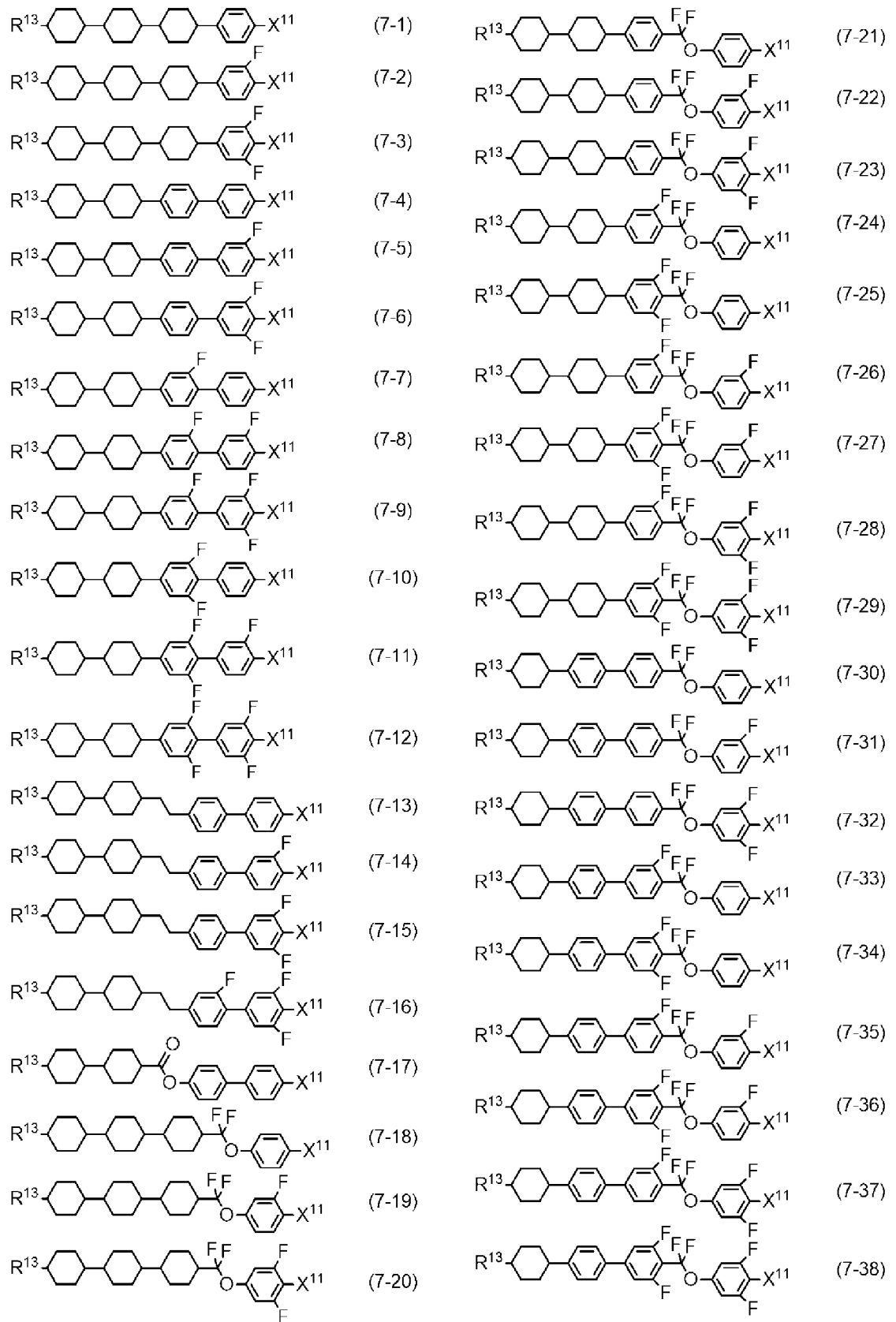


[0109]

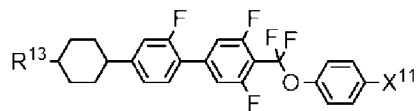




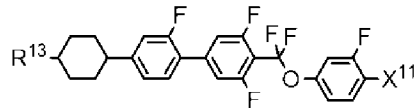
[0110]



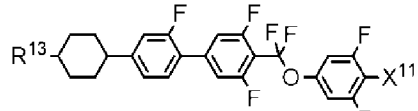
[0111]



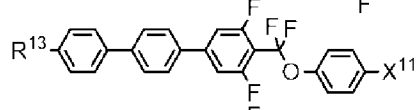
(7-39)



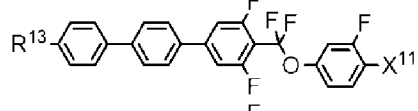
(7-40)



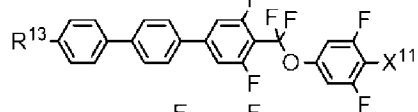
(7-41)



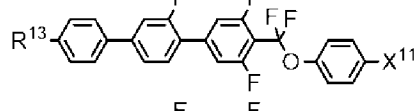
(7-42)



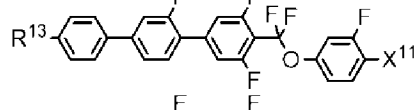
(7-43)



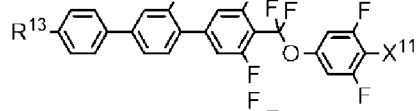
(7-44)



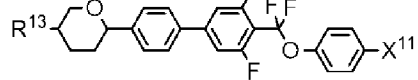
(7-45)



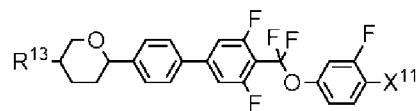
(7-46)



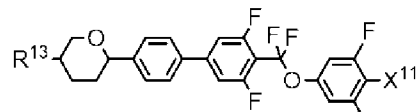
(7-47)



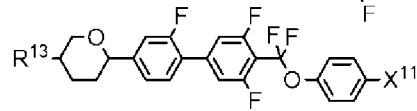
(7-48)



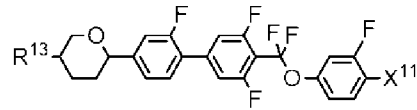
(7-49)



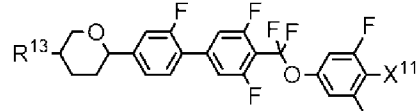
(7-50)



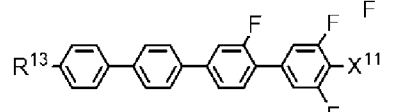
(7-51)



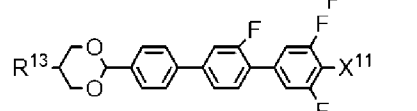
(7-52)



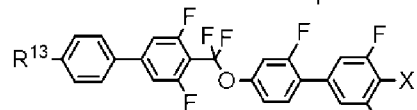
(7-53)



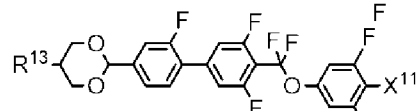
(7-54)



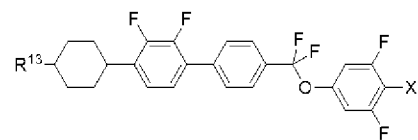
(7-55)



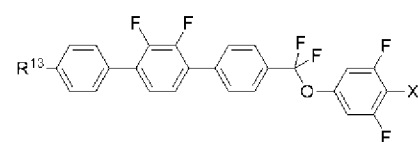
(7-56)



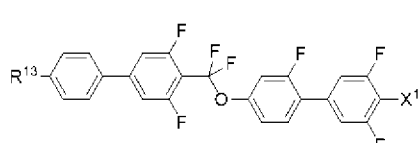
(7-57)



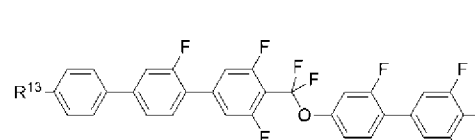
(7-58)



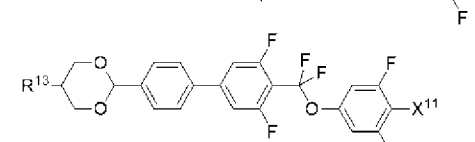
(7-59)



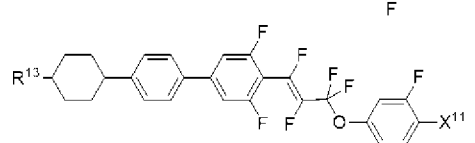
(7-60)



(7-61)



(7-62)



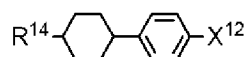
(7-63)

[0112] 成分Cは、誘電率異方性が正であり、熱、光などに対する安定性が非常に優れているので、IPS、FFS、OCBなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分Cの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1重

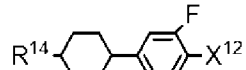
量%から99重量%の範囲が適しており、好ましくは10重量%から97重量%の範囲、さらに好ましくは40重量%から95重量%の範囲である。成分Cを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Cの含有量は液晶組成物の重量に基づいて30重量%以下が好ましい。成分Cを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

[0113] 成分Dは、右末端基が $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ である化合物(8)である。成分Dの好ましい例として、化合物(8-1)から(8-64)を挙げることができる。成分Dの化合物において、 R^{14} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^{12} は $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ である。

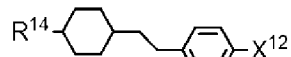
[0114]



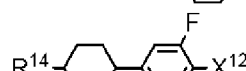
(8-1)



(8-2)



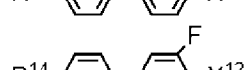
(8-3)



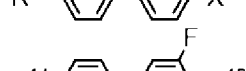
(8-4)



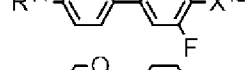
(8-5)



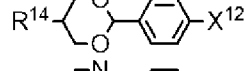
(8-6)



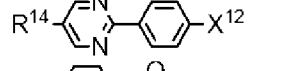
(8-7)



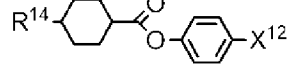
(8-8)



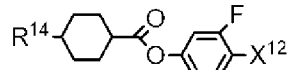
(8-9)



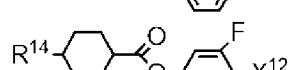
(8-10)



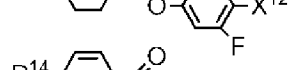
(8-11)



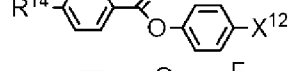
(8-12)



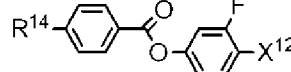
(8-13)



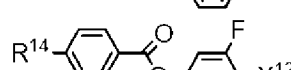
(8-14)



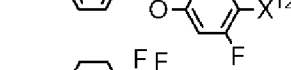
(8-15)



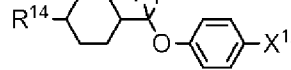
(8-16)



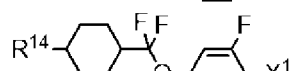
(8-17)



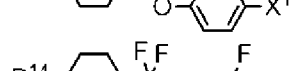
(8-18)



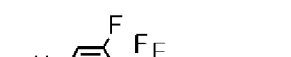
(8-19)



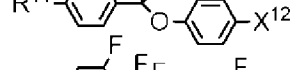
(8-20)



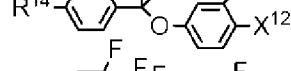
(8-21)



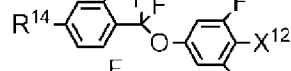
(8-22)



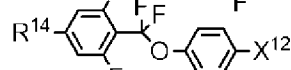
(8-23)



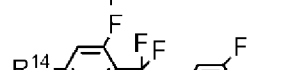
(8-24)



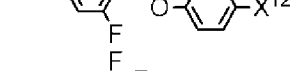
(8-25)



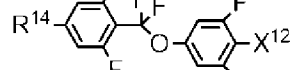
(8-26)



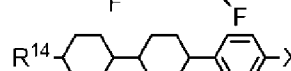
(8-27)



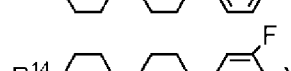
(8-28)



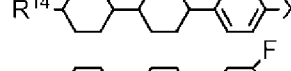
(8-29)



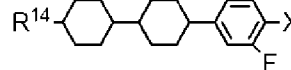
(8-30)



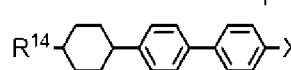
(8-31)



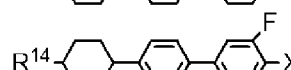
(8-32)



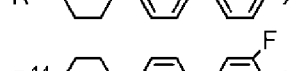
(8-33)



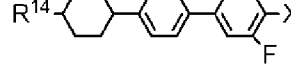
(8-34)



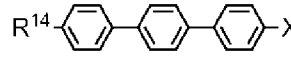
(8-35)



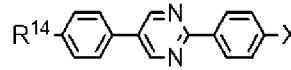
(8-36)



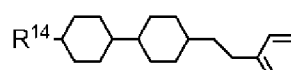
(8-37)



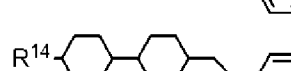
(8-38)



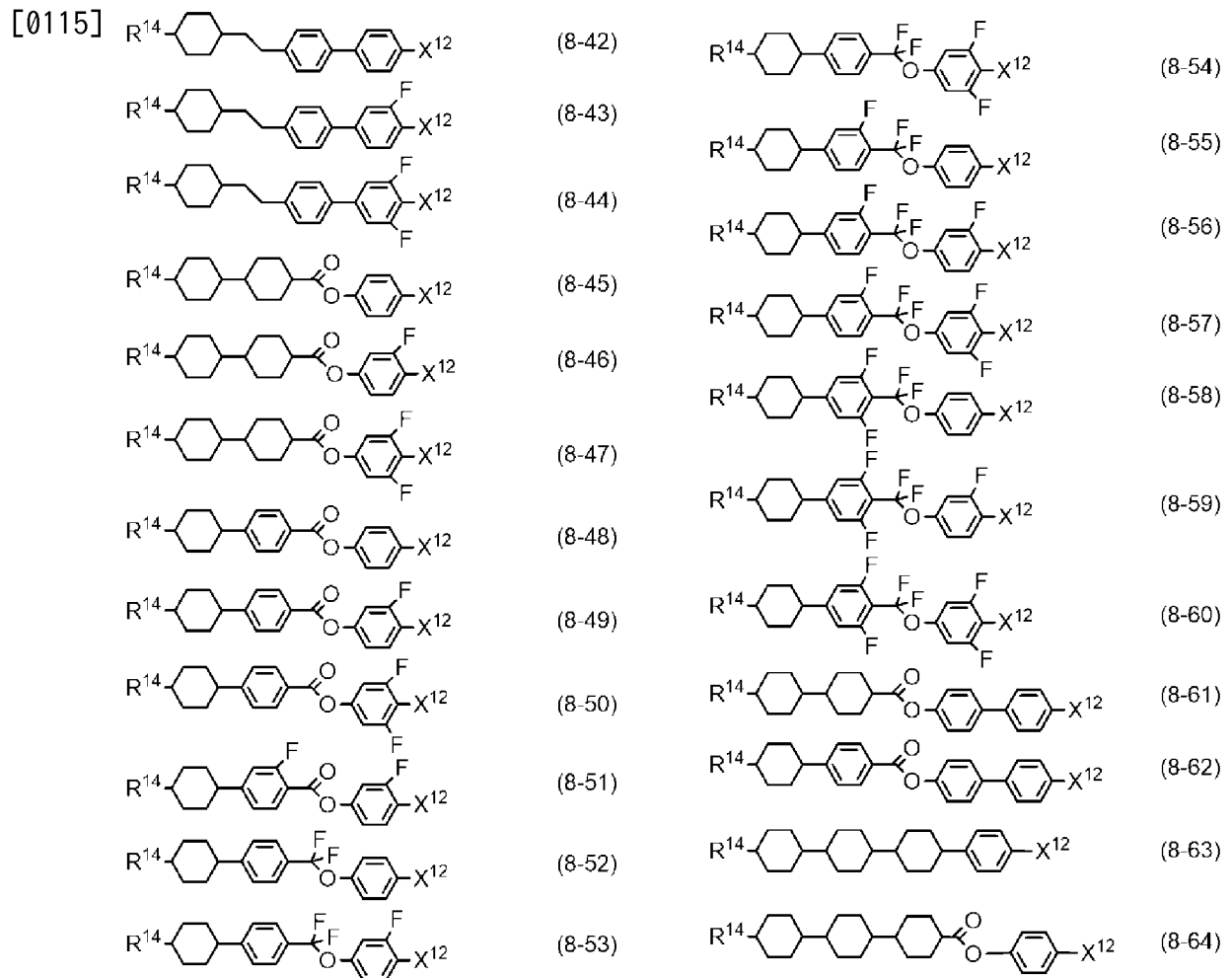
(8-39)



(8-40)



(8-41)



[0116] 成分Dは、誘電率異方性が正であり、その値が大きいので、TNなどのモード用の組成物を調製する場合に主として用いられる。この成分Dを添加することにより、組成物の誘電率異方性を大きくすることができる。成分Dは、液晶相の温度範囲を広げる、粘度を調整する、または光学異方性を調整する、という効果をもたらす。成分Dは、素子の電圧－透過率曲線の調整にも有用である。

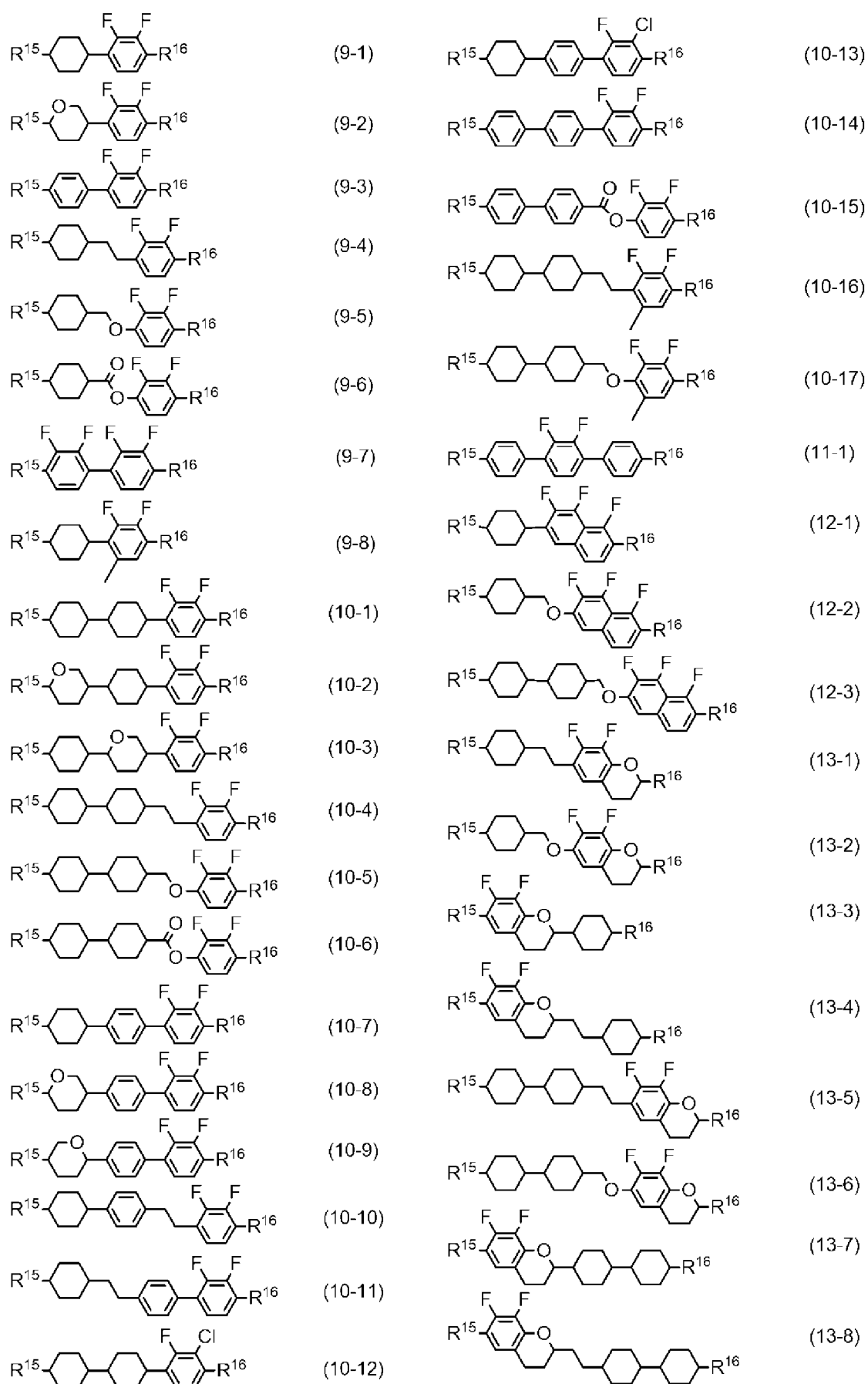
[0117] TNなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分Dの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1重量%から99重量%の範囲が適しており、好ましくは10重量%から97重量%の範囲、さらに好ましくは40重量%から95重量%の範囲である。成分Dを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Dの含有量は液晶組成物の重量に基づいて30重量%以下が好ましい。成分Dを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子

の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

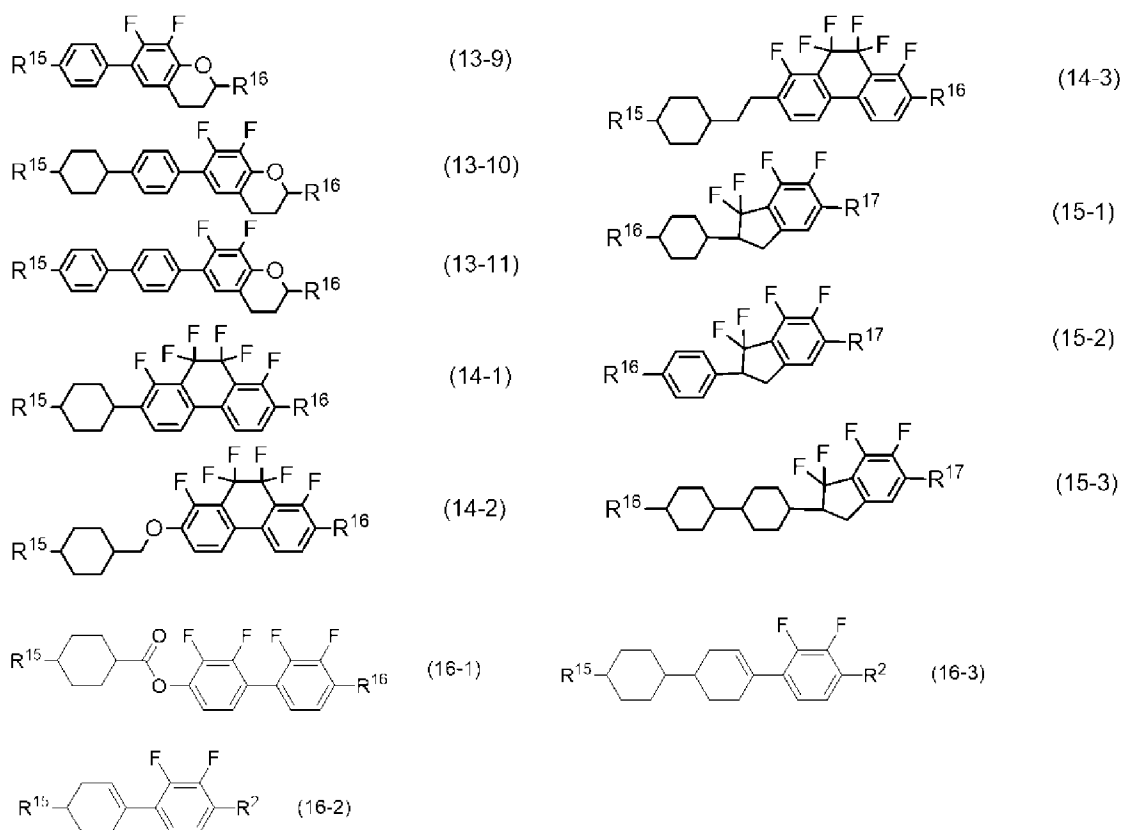
[0118] 成分Eは、化合物（9）から（16）である。これらの化合物は、2，3－ジフルオロ－1，4－フェニレンのように、ラテラル位が2つのハロゲンで置換されたフェニレンを有する。

[0119] 成分Eの好ましい例として、化合物（9－1）から（9－8）、化合物（10－1）から（10－17）、化合物（11－1）、化合物（12－1）から（12－3）、化合物（13－1）から（13－11）、化合物（14－1）から（14－3）、化合物（15－1）から（15－3）および化合物（16－1）から（16－3）を挙げることができる。成分Eの化合物において、 R^{15} および R^{16} は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく； R^{17} は、水素、フッ素、炭素数1から10のアルキル、または炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよい。

[0120]



[0121]



[0122] 成分Eは、誘電率異方性が負に大きい。成分Eは、IPS、VA、PSAなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分Eの含有量を増加させるにつれて組成物の誘電率異方性が負に大きくなるが、粘度が大きくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量は少ないほうが好ましい。誘電率異方性が−5程度であることを考慮すると、十分な電圧駆動をさせるには、液晶組成物の重量に基づいて、成分Eの含有量が40重量%以上であることが好ましい。

[0123] 成分Eのうち、化合物(9)は二環化合物であるので、主として、粘度の減少、光学異方性の調整、または誘電率異方性の増加に効果がある。化合物(10)および(11)は三環化合物であるので、上限温度を高くする、光学異方性を大きくする、または誘電率異方性を大きくするという効果がある。化合物(12)から(16)は、誘電率異方性を大きくするという効果がある。

[0124] IPS、VA、PSAなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分Eの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて、好ましくは40重量%以上で

あり、さらに好ましくは50重量%から95重量%の範囲である。成分Eを誘電率異方性が正である組成物に添加する場合は、成分Eの含有量は液晶組成物の重量に基づいて30重量%以下が好ましい。成分Eを添加することにより、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ことが可能となる。

[0125] 以上に述べた成分B、C、D、およびEを適切に組み合わせることによって、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正または負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、大きな弾性定数などの特性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を調製することができる。必要に応じて、成分B、C、D、およびEとは異なる液晶性化合物を添加してもよい。

[0126] 液晶組成物は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。用途に応じて、この組成物に添加物を添加してよい。添加物の例は、式(1)および式(16)以外の重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤などである。このような添加物は当業者によく知られており、文献に記載されている。

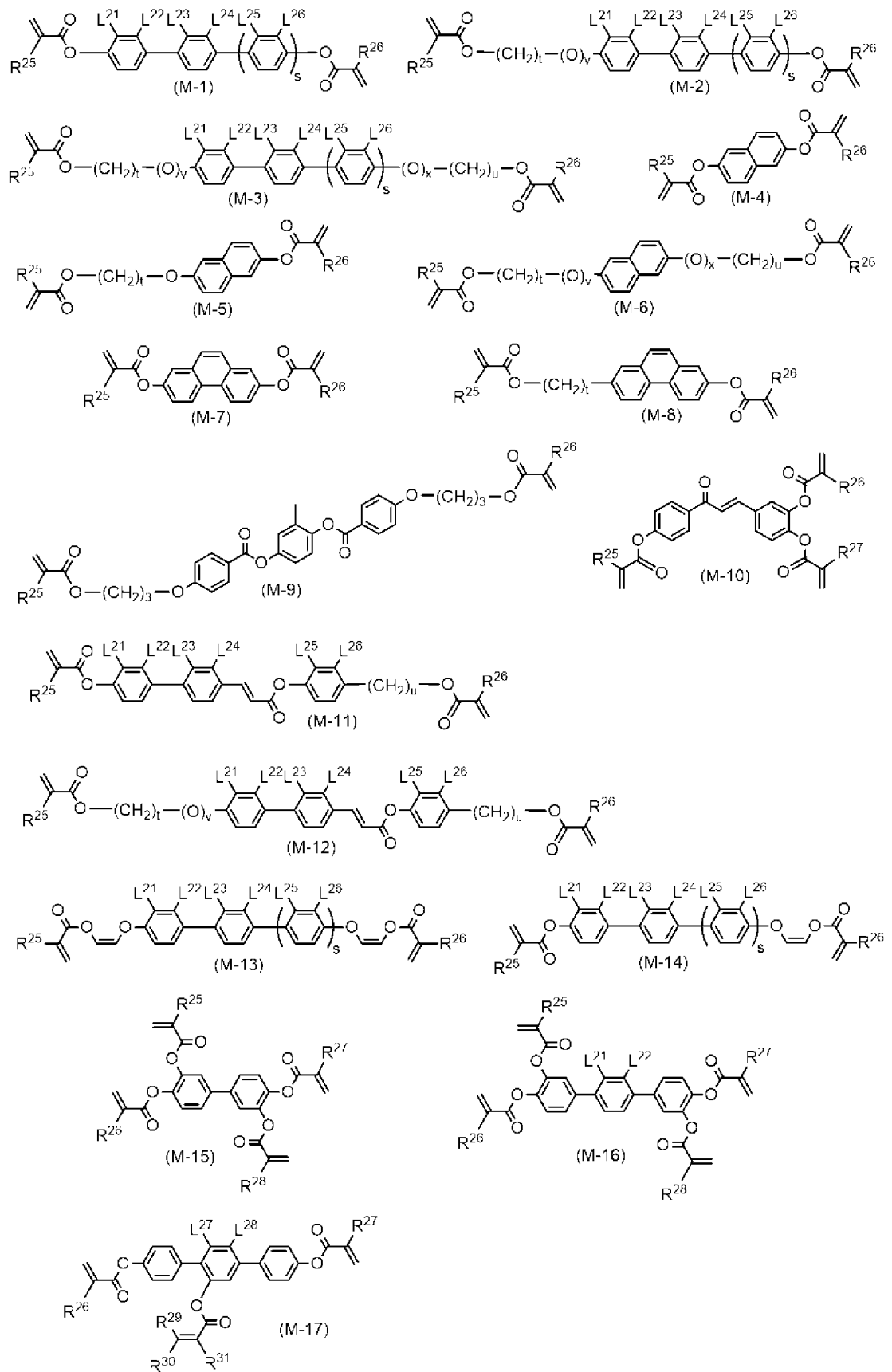
[0127] 重合性化合物は、液晶組成物中に重合体を生成させる目的で添加される。電極間に電圧を印加した状態で紫外線を照射して、重合性化合物と化合物(1)とを共重合させることによって、液晶組成物の中に重合体を生成させる。この際、化合物(1)は、極性基がガラス（または金属酸化物）の基板表面と非共有結合的に相互作用した状態で固定化される。これにより、液晶分子の配向を制御する能力がさらに向上すると同時に、化合物(1)が液晶組成物中に漏れ出す事が無くなる。また、ガラス（または金属酸化物）の基板表面においても、適切なプレチルトが得られるので、応答時間が短縮され、かつ電圧保持率の大きな液晶表示素子が得られる。

[0128] 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)、およびビニルケトンである。さらに好ましい例は、少なくとも1つのアクリロイルオキシを有する化合物および少なくとも1つのメタクリロイルオキシを有する化合物である。さらに好ましい例には、アクリロイルオキシとメタクリロイルオキシの両方を有する化合物も含まれる。

[0129] 重合性化合物のさらに好ましい例は、化合物(M-1)から(M-17)である。化合物(M-1)から(M-17)において、 R^{25} から R^{31} は独立して、水素またはメチルであり；s、v、およびxは独立して、0または1であり；tおよびuは独立して、1から10の整数であり； L^{21} から L^{26} は独立して、水素またはフッ素であり、 L^{27} および L^{28} は独立して、水素、フッ素、またはメチルである。

[0130]



[0131] 重合性化合物は、重合開始剤を添加することによって、速やかに重合させ

ることができる。反応温度を最適化することによって、残存する重合性化合物の量を減少させることができる。光ラジカル重合開始剤の例は、BASF社のダロキュアシリーズからTPO、1173、および4265であり、イルガキュアシリーズから184、369、500、651、784、819、907、1300、1700、1800、1850、および2959である。

[0132] 光ラジカル重合開始剤の追加例は、4-メトキシフェニル-2,4-ビス(トリクロロメチル)トリアジン、2-(4-ブトキシスチリル)-5-トリクロロメチル-1,3,4-オキサジアゾール、9-フェニルアクリジン、9,10-ベンズフェナジン、ベンゾフェノン/ミヒラズケトン混合物、ヘキサアリールビイミダゾール/メルカプトベンズイミダゾール混合物、1-(4-イソプロピルフェニル)-2-ヒドロキシ-2-メチルプロパン-1-オン、ベンジルジメチルケタール、2-メチル-1-[4-(メチルチオ)フェニル]-2-モルホリノプロパン-1-オン、2,4-ジエチルキサントン/p-ジメチルアミノ安息香酸メチル混合物、ベンゾフェノン/メチルトリエタノールアミン混合物である。

[0133] 液晶組成物に光ラジカル重合開始剤を添加したあと、電場を印加した状態で紫外線を照射することによって重合を行うことができる。しかし、未反応の重合開始剤または重合開始剤の分解生成物は、素子に画像の焼き付きなどの表示不良を引き起こすかもしれない。これを防ぐために重合開始剤を添加しないまま光重合を行ってもよい。照射する光の好ましい波長は150nmから500nmの範囲である。さらに好ましい波長は250nmから450nmの範囲であり、最も好ましい波長は300nmから400nmの範囲である。

[0134] エステル結合基、桂皮酸エステル結合、カルコン骨格またはスチルベン骨格を有する化合物(1)を組成物に混合した場合、成分Aである化合物(1)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。この化合物(1)は、偏光によってフリース転位、光二量化または二重結合のシストランス

異性化を生じるとき、分子レベルで一定方向に配列される。したがって、極性化合物から調製した薄膜は、ポリイミドのような配向膜と同様に、液晶分子を配向させる。

[0135] 芳香族エステルを有し、重合性基を有する化合物（１）である場合は、紫外光が照射されることにより芳香族エステル部位が光分解することでラジカルが形成されて、光フリース転位を生じる。

光フリース転位において、芳香族エステル部位の光分解は偏光紫外光の偏光方向と芳香族エステル部位の長軸方向が同一方向であった場合に生じる。光分解後は再結合し、互変異性化により水酸基が分子内に生じる。この水酸基により、基板界面の相互作用が生じ、極性化合物が基板界面側に異方性を持って吸着しやすくなると考えられる。また、重合性基を有しているため重合により偏光の向きに沿って反応した化合物（１）がその方向性を失うことなく固定化される。この性質を利用して液晶分子を配向させることが可能な薄膜を調製することができる。この薄膜を調製するために、照射する紫外線は直線偏光が適している。まず、液晶組成物に極性化合物である化合物（１）を０．１重量％から１０重量％の範囲で添加し、極性化合物を溶解させるために組成物を加温する。この組成物を、配向膜を有しない素子に注入する。次に、素子を加温しながら直線偏光を照射することによって、極性化合物を光フリース転位させ、重合させる。

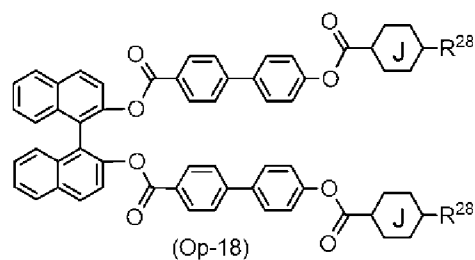
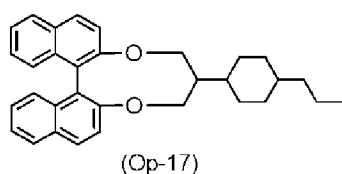
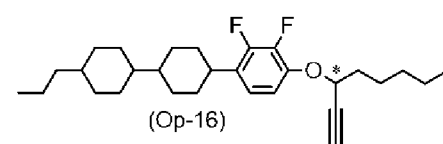
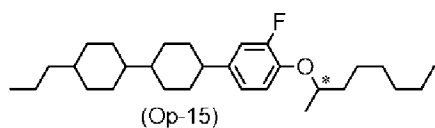
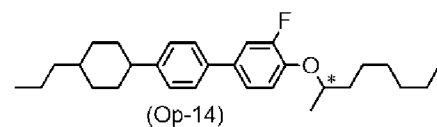
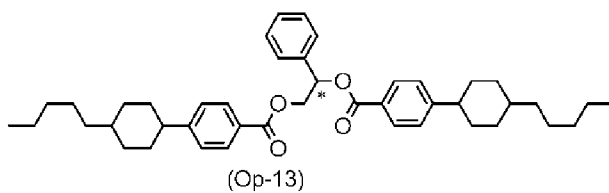
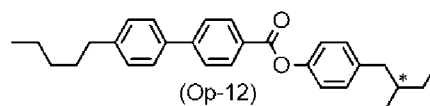
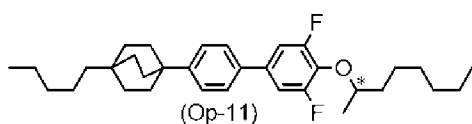
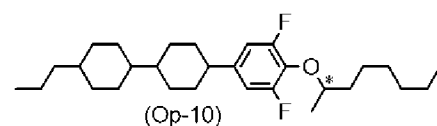
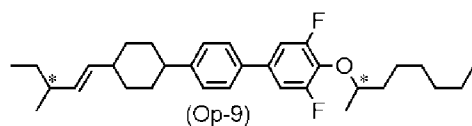
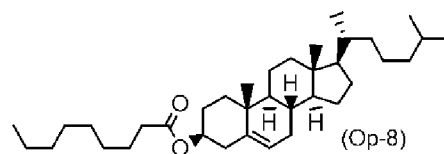
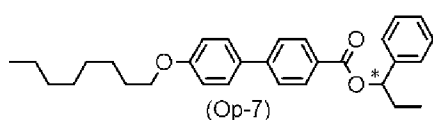
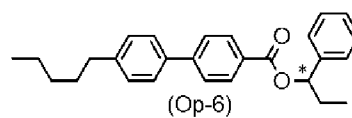
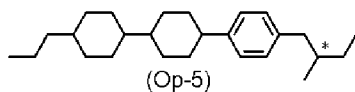
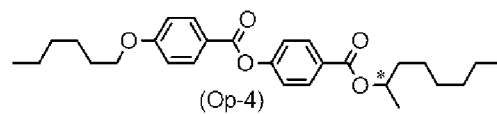
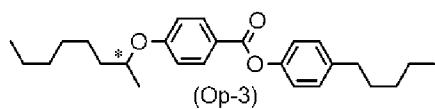
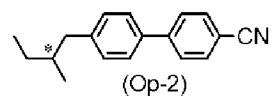
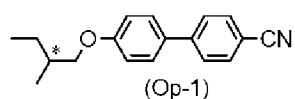
光フリース転位した極性化合物は一定方向に配列され、重合後に形成される薄膜は液晶配向膜としての機能を有する。

[0136] 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。

[0137] 光学活性化合物は、液晶分子にらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与えることによって逆ねじれを防ぐ、という効果をもたらす。光学活性化合物

を添加することによって、らせんピッチを調整することができる。らせんピッチの温度依存性を調整する目的で2つ以上の光学活性化合物を添加してもよい。光学活性化合物の好ましい例として、下記の化合物（Op-1）から（Op-18）を挙げることができる。化合物（Op-18）において、環Jは1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、R²⁸は炭素数1から10のアルキルである。

[0138]

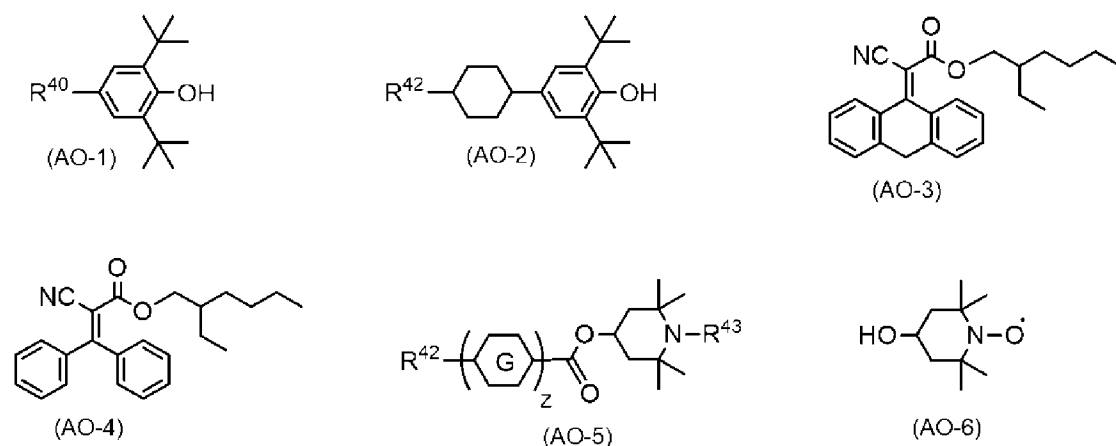


[0139] 酸化防止剤は、大きな電圧保持率を維持するために有効である。酸化防止剤の好ましい例として、下記の化合物（A O - 1）および（A O - 2）；

IRGANOX 415、IRGANOX 565、IRGANOX 1010、IRGANOX 1035、IRGANOX 3114、およびIRGANOX 1098（商品名：BASF社）を挙げることができる。紫外線吸収剤は、上限温度の低下を防ぐために有効である。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。具体例として下記の化合物（AO-3）および（AO-4）；TINUVIN 329、TINUVIN P、TINUVIN 326、TINUVIN 234、TINUVIN 213、TINUVIN 400、TINUVIN 328、およびTINUVIN 99-2（商品名：BASF社）；および1,4-ジアザビシクロ[2.2.2]オクタン（DABCO）を挙げることができる。

[0140] 立体障害のあるアミンのような光安定剤は、大きな電圧保持率を維持するために好ましい。光安定剤の好ましい例として、下記の化合物（AO-5）および（AO-6）；TINUVIN 144、TINUVIN 765、およびTINUVIN 770DF（商品名：BASF社）を挙げることができる。熱安定剤も大きな電圧保持率を維持するために有効であり、好ましい例としてIRGAFOS 168（商品名：BASF社）を挙げることができる。消泡剤は、泡立ちを防ぐために有効である。消泡剤の好ましい例は、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である。

[0141]



[0142] 化合物（AO-1）において、 R^{40} は炭素数1から20のアルキル、炭素

数 1 から 20 のアルコキシ、 $-\text{COOR}^{41}$ 、または $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOR}^{41}$ であり、ここで R^{41} は炭素数 1 から 20 のアルキルである。化合物 (A O - 2) および (A O - 5) において、 R^{42} は炭素数 1 から 20 のアルキルである。化合物 (A O - 5) において、 R^{43} は水素、メチル、または $\text{O}^\cdot$ (酸素ラジカル) であり、環 G は 1, 4 - シクロヘキシレンまたは 1, 4 - フェニレンであり、 z は 1、2、または 3 である。

[0143] 4. 液晶表示素子

液晶組成物は、PC、TN、STN、OCB、PSA などの動作モードを有し、アクティブマトリクス方式で駆動する液晶表示素子に使用できる。この組成物は、PC、TN、STN、OCB、VA、IPS などの動作モードを有し、パッシブマトリクス方式で駆動する液晶表示素子にも使用することができる。これらの素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。

[0144] この組成物は、ネマチック液晶をマイクロカプセル化して作製した NCA P (nematic curvilinear aligned phase) 素子、液晶中に三次元網目状高分子を形成して作製したポリマー分散型液晶表示素子 (PDLCD)、そしてポリマーネットワーク液晶表示素子 (PNLCD) にも使用できる。重合性化合物の添加量が液晶組成物の重量に基づいて約 10 重量%以下であるとき、PSA モードの液晶表示素子が作製される。重合性化合物の好ましい割合は、液晶組成物の重量に基づいて、約 0.1 重量%から約 2 重量%の範囲である。さらに好ましい割合は、液晶組成物の重量に基づいて、約 0.2 重量%から約 1.0 重量%の範囲である。PSA モードの素子は、アクティブマトリクス、パッシブマトリクスのような駆動方式で駆動させることができる。このような素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。重合性化合物の添加量を増やすことによって、高分子分散 (polymer dispersed) モードの素子も作製することができる。

[0145] 高分子支持配向型の素子では、組成物に含まれる重合体が液晶分子を配向させる。極性化合物である化合物 (1) は、液晶分子が配列するのを援助す

る。すなわち、化合物（１）は、配向膜の代わりに用いることができる。このような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しない。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および極性化合物である化合物（１）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、重合体を含む組成物が生成し、ＰＳＡモードを有する素子が作製される。

[0146] 素子を製造する方法を説明する。第一は、極性化合物である化合物（１）を液晶組成物に添加し、組成物を上限温度より高い温度で加温して溶解させる工程である。第二は、この組成物を液晶表示素子に注入する工程である。第三は、上限温度より高い温度に液晶組成物を加温したまま、偏光紫外線を照射する工程である。極性化合物である化合物（１）は、直線偏光によって光フリース転位、光二量化または二重結合のシストランス異性化のいずれかを起こし、同時に重合も進行する。化合物（１）の重合体は薄膜として基板上に形成され固定化される。この重合体は分子レベルで一定方向に配列されるので、薄膜は液晶配向膜としての機能を有する。この方法によって、ポリイミドのような配向膜を有しない液晶表示素子を製造することができる。

[0147] この手順において、極性化合物である化合物（１）は、極性基が基板表面と相互作用するので、基板上に偏在する。この化合物（１）が、偏光紫外線の照射により液晶分子を配向させ、同時に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、液晶分子の配向が追加的に安定化するので、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。特に本発明の実施形態にかかる化合物（１）は重合性の極性化合物である為、液晶分子を配向させ

ると共に、他の重合性化合物と共重合する。これによって極性化合物が液晶組成物中に漏れ出す事が無くなる為、電圧保持率の大きな液晶表示素子が得られる。

実施例

[0148] 実施例（合成例、素子の使用例を含む）により、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、使用例1の組成物と使用例2の組成物との混合物を含む。本発明は、使用例の組成物の少なくとも2つを混合することによって調製した混合物をも含む。

1. 化合物（1）の実施例

[0149] 化合物（1）は、実施例1などに示す手順により合成した。特に記載のない限り、反応は窒素雰囲気下で行った。合成した化合物は、NMR分析などの方法により同定した。化合物（1）、液晶性化合物、組成物、素子の特性は、下記の方法により測定した。

[0150] 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 CDCl_3 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。 ^{19}F -NMRの測定では、 CFCl_3 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。

[0151] ガスクロマト分析：測定には、島津製作所製のGC-2010型ガスクロマトグラフを用いた。カラムは、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムDB-1（長さ60m、内径0.25mm、膜厚0.25 μm ）を用いた。キャリアガスとしてはヘリウム（1mL/分）を用いた。試料気化室の温度を300℃、検出器（FID）部分の温度を300℃に設定した。試料はアセトンに溶解して、1重量%の溶液となるように調製し、得られた溶液1 μL を試料気化室に注入した。記録計には島津製作所製のGCSoI

u t i o n システムなどを用いた。

[0152] H P L C 分析：測定には、島津製作所製の P r o m i n e n c e (L C - 2 0 A D ; S P D - 2 0 A) を用いた。カラムはワイエムシー製の Y M C - P a c k O D S - A (長さ 1 5 0 m m 、 内径 4 . 6 m m 、 粒子径 5 μ m) を用いた。溶出液はアセトニトリルと水を適宜混合して用いた。検出器としては U V 検出器、R I 検出器、C O R O N A 検出器などを適宜用いた。U V 検出器を用いた場合、検出波長は 2 5 4 n m とした。試料はアセトニトリルに溶解して、0 . 1 重量% の溶液となるように調製し、この溶液 1 μ L を試料室に導入した。記録計としては島津製作所製の C - R 7 A p l u s を用いた。

[0153] 紫外可視分光分析：測定には、島津製作所製の P h a r m a S p e c U V - 1 7 0 0 を用いた。検出波長は 1 9 0 n m から 7 0 0 n m とした。試料はアセトニトリルに溶解して、0 . 0 1 m m o l / L の溶液となるように調製し、石英セル（光路長 1 c m ）に入れて測定した。

[0154] 測定試料：相構造および転移温度（透明点、融点、重合開始温度など）を測定するときには、化合物そのものを試料として用いた。

[0155] 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（J E I T A ; Japan Electronics and Information Technology Industries Association）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。

[0156] （１）相構造

偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレート（メトラー社 F P - 5 2 型ホットステージ）に試料を置いた。この試料を、3 $^{\circ}$ C / 分の速度で加熱しながら相状態とその変化を偏光顕微鏡で観察し、相の種類を特定した。

[0157] （２）転移温度（ $^{\circ}$ C ）

測定には、パーキンエルマー社製の走査熱量計、D i a m o n d D S C

システムまたはエスエスアイ・ナノテクノロジー社製の高感度示差走査熱量計、X-DSC7000を用いた。試料は、3℃/分の速度で昇降温し、試料の相変化に伴う吸熱ピークまたは発熱ピークの開始点を外挿により求め、転移温度を決定した。化合物の融点、重合開始温度もこの装置を使って測定した。化合物が固体からスメクチック相、ネマチック相などの液晶相に転移する温度を「液晶相の下限温度」と略すことがある。化合物が液晶相から液体に転移する温度を「透明点」と略すことがある。

[0158] 結晶はCと表した。結晶の種類の区別がつく場合は、それぞれを C_1 、 C_2 のように表した。スメクチック相はS、ネマチック相はNと表した。スメクチック相の中で、スメクチックA相、スメクチックB相、スメクチックC相、またはスメクチックF相の区別がつく場合は、それぞれ S_A 、 S_B 、 S_C 、または S_F と表した。液体（アイソトロピック）はIと表した。転移温度は、例えば、「C 50.0 N 100.0 I」のように表記した。これは、結晶からネマチック相への転移温度が50.0℃であり、ネマチック相から液体への転移温度が100.0℃であることを示す。

[0159] (3) ネマチック相の上限温度 (T_{NI} または $N I$; °C)

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。試料が化合物(1)と母液晶との混合物であるときは、 T_{NI} の記号で示した。試料が化合物(1)と成分B、C、Dのような化合物との混合物であるときは、 $N I$ の記号で示した。

[0160] (4) ネマチック相の下限温度 (T_C ; °C)

ネマチック相を有する試料を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 $\leq -20^\circ\text{C}$ と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

[0161] (5) 粘度 (バルク粘度; η ; 20°C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。

[0162] (6) 光学異方性 (屈折率異方性; 25°Cで測定; Δn)

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り行なった。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率 ($n_{\parallel}$) 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 ($n_{\perp}$) 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 (Δn) の値は、 $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$ 、の式から計算した。

[0163] (7) 比抵抗 (ρ ; 25°Cで測定; Ωcm)

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

[0164] 誘電率異方性が正の試料と負の試料とでは、特性の測定法が異なることがある。誘電率異方性が正であるときの測定法は、項(8a)から(12a)に記載した。誘電率異方性が負の場合は、項(8b)から(12b)に記載した。

[0165] (8a) 粘度 (回転粘度; γ_1 ; 25°Cで測定; mPa·s)

正の誘電率異方性: 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度であり、そして2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が5 μm であるTN素子に試料を入れた。この素子に16Vから19.5Vの範囲で0.5V毎に段階的に印加した。0.2秒の無印加のあと、ただ1つの矩形波 (矩形パルス; 0.2秒) と無印加 (2秒) の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流 (transient current) のピーク電流 (peak current) とピーク時間 (peak time) を測定した。これらの測定値とM. Imaiらの論文、40頁の計算式(8)とから回転粘度の値を得た。この

計算で必要な誘電率異方性の値は、この回転粘度を測定した素子を用い、下に記載した方法で求めた。

[0166] (8 b) 粘度 (回転粘度; γ 1; 25°Cで測定; mPa·s)

負の誘電率異方性: 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。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が20 μ mのVA素子に試料を入れた。この素子に39ボルトから50ボルトの範囲で1ボルト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、下記の誘電率異方性の項で測定した値を用いた。

[0167] (9 a) 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$; 25°Cで測定)

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

[0168] (9 b) 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$; 25°Cで測定)

負の誘電率異方性: 誘電率異方性の値は、 $\Delta \epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 、の式から計算した。誘電率 ($\epsilon_{\parallel}$ および $\epsilon_{\perp}$) は次のように測定した。

1) 誘電率 ($\epsilon_{\parallel}$) の測定: よく洗浄したガラス基板にオクタデシルトリエトキシシラン (0.16 mL) のエタノール (20 mL) 溶液を塗布した。ガラス基板をスピナーで回転させたあと、150°Cで1時間加熱した。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が4 μ mであるVA素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子にサイン波 (

0.5 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。

2) 誘電率 ($\epsilon_{\perp}$) の測定：よく洗浄したガラス基板にポリイミド溶液を塗布した。このガラス基板を焼成した後、得られた配向膜にラビング処理をした。2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が $9 \mu\text{m}$ であり、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 (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。

[0169] (10a) 弾性定数 (K ; 25°C で測定; pN)

正の誘電率異方性：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 $20 \mu\text{m}$ 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 K_{11} および K_{33} の値を得た。次に 171 頁にある式 (3.18) に、先ほど求めた K_{11} および K_{33} の値を用いて K_{22} を算出した。弾性定数 K は、このようにして求めた K_{11} 、 K_{22} および K_{33} の平均値で表した。

[0170] (10b) 弾性定数 (K_{11} および K_{33} ; 25°C で測定; pN)

負の誘電率異方性：測定には株式会社東陽テクニカ製の EC-1 型弾性定数測定器を用いた。2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が $20 \mu\text{m}$ である垂直配向素子に試料を入れた。この素子に 20 ボルトから 0 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。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 (2.100) から弾性定数の値を得た。

[0171] (11a) しきい値電圧 (V_{th} ; 25°C で測定; V)

正の誘電率異方性：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 $0.45/\Delta n$ （ μm ）であり、ツイスト角が80度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）のTN素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧（32Hz、矩形波）は0Vから10Vまで0.02Vずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときに透過率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。

[0172] (11b) しきい値電圧（ V_{th} ；25℃で測定；V）

負の誘電率異方性：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 $4\mu\text{m}$ であり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード（normally black mode）のVA素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子に印加する電圧（60Hz、矩形波）は0Vから20Vまで0.02Vずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときに透過率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10%になったときの電圧で表した。

[0173] (12a) 応答時間（ τ ；25℃で測定；ms）

正の誘電率異方性：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・フィルター（Low-pass filter）は5kHzに設定した。2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $5.0\mu\text{m}$ であり、ツイスト角が80度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）のTN素子に試料を入れた。この素子に矩形波（60Hz、5V、0.5秒）を印加した。この際に、素子に垂直方向から

光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率100%であり、この光量が最小であったときが透過率0%であるとみなした。立ち上がり時間 (τ_r : rise time; ミリ秒) は、透過率が90%から10%に変化するのに要した時間である。立ち下がり時間 (τ_f : fall time; ミリ秒) は透過率10%から90%に変化するのに要した時間である。応答時間は、このようにして求めた立ち上がり時間と立ち下がり時間との和で表した。

[0174] (12b) 応答時間 (τ ; 25℃で測定; ms)

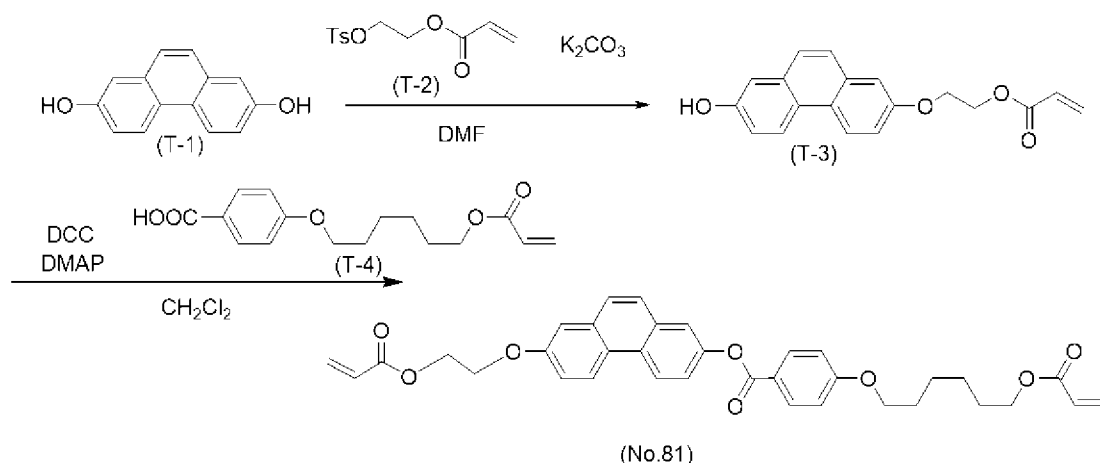
負の誘電率異方性: 測定には大塚電子株式会社製のLCD5100型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。ローパス・フィルター (Low-pass filter) は5kHzに設定した。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が3.2 μm であり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード (normally black mode) のPVA素子に試料を入れた。この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子にしきい値電圧を若干超える程度の電圧を1分間印加し、次に5.6Vの電圧を印加しながら23.5 mW/cm^2 の紫外線を8分間照射した。この素子に矩形波 (60Hz、10V、0.5秒) を印加した。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率100%であり、この光量が最小であったときが透過率0%であるとみなした。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。

[0175] 原料

ソルミックス (登録商標) A-11は、エタノール (85.5%)、メタノール (13.4%) とイソプロパノール (1.1%) の混合物であり、日本アルコール販売 (株) から入手した。

[0176] [合成例1]

化合物 (NO. 81) の合成



[0177] 第1工程

化合物（T-1）（3.2 g）、炭酸カリウム（0.61 g）、化合物（T-2）（4.1 g）およびDMF（100 ml）を反応器に入れ、60℃で2時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。有機層を水で洗浄し、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、酢酸エチル：トルエン＝1：3）で精製して、化合物（T-3）（1.55 g；33%）を得た。尚、化合物（T-1）および化合物（T-2）は既知物質であり、当業者であれば容易に合成法を得ることが出来る。

[0178] 第2工程

化合物（T-3）（1.55 g）、化合物（T-4）（1.69 g）、DMAP（0.12 g）、およびジクロロメタン（100 ml）を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへDCC（1.14 g）を添加し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物をろ別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。有機層を水で洗浄し、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、酢酸エチル：トルエン＝1：4）で精製し、ヘプタンで再沈殿することにより化合物（No.81）（2.34 g；80%）を得た。尚、化合物（T-4）は既知物質であり、当業者であれば容易に合成法を得ることが出来る。

[0179] 得られた化合物 (No. 81) のNMR分析値は、以下の通りである。

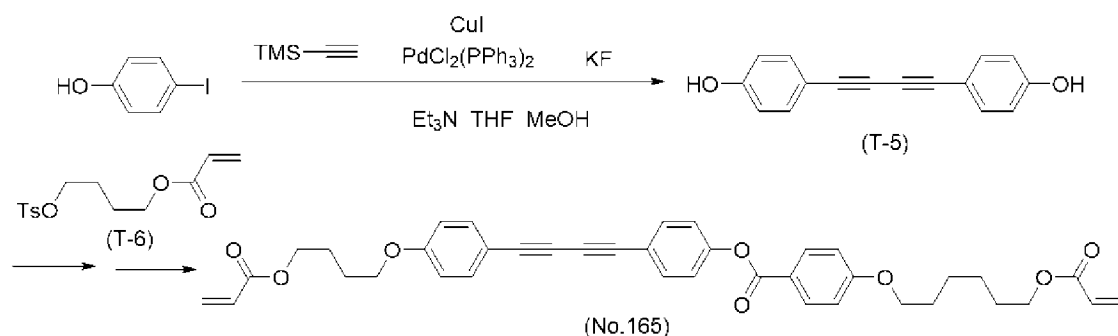
$^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm; CDCl_3) : 8.61 (d, 1H)、8.55 (d, 2H)、8.21 (d, 2H)、7.70 (d, 1H)、7.68 (s, 1H)、7.67 (s, 1H)、7.48 (dd, 1H)、7.31 (dd, 1H)、7.27 (d, 1H)、6.98 (d, 2H)、6.43 (dd, 1H)、6.42 (dd, 1H)、6.18 (dd, 1H)、6.13 (dd, 1H)、5.85 (dd, 1H)、5.84 (dd, 1H)、4.60 (t, 2H)、4.37 (t, 2H)、4.18 (t, 2H)、4.04 (t, 2H)、1.84 (quint, 2H)、1.72 (quint, 2H)、1.55 (quint, 2H)、1.46 (quint, 2H)。

[0180] 化合物 (No. 81) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 (°C) : C 82.5 | 重合温度 (°C) : 136.49

[0181] [合成例2]

化合物 (No. 165) の合成



第1工程

4-ヨードフェノール (30.0 g)、トリメチルシリルアセチレン (16.1 g)、ヨウ化銅 (1.3 g)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ (1.91 g)、THF (200 ml) 及びトリエチルアミン (200 ml) を容器に採り、窒素雰囲気下で一晩攪拌した。そこにTHF (200 ml)、MeOH (200 ml) およびKF (15.8 g) を添加し、空気雰囲気下で一晩攪拌した。反応混合物を水に注ぎトルエンにて抽出し、水にて洗浄した後、無水

硫酸マグネシウムで乾燥し、減圧濃縮して淡茶色固体を得た。この固体を溶液にして、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（容積比、酢酸エチル：トルエン＝１：４）、で精製し、化合物（Ｔ－５）（１２．７ｇ；８０％）を得た。

[0182] その後の２工程は合成例１の第１工程および第２工程において、化合物（Ｔ－１）のかわりに化合物（Ｔ－５）、化合物（Ｔ－２）のかわりに化合物（Ｔ－６）を用いて同様の操作をすることにより合成できる。尚、化合物（Ｔ－６）は既知物質でありは、当業者であれば容易に合成法を得ることが出来る。

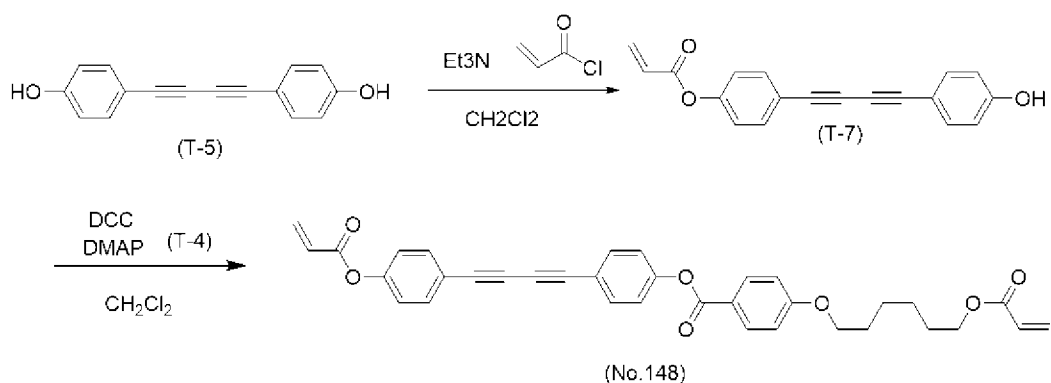
[0183] 得られた化合物（Ｎｏ．１６５）のNMR分析値は、以下の通りである。
 ^1H -NMR：化学シフト δ （ppm； CDCl_3 ）：８．１３（d，２H）、７．５７（d，２H）、７．４６（d，２H）、７．１９（d，２H）、６．９７（d，２H）、６．８５（d，２H）、６．４２（dd，１H）、６．４１（dd，１H）、６．１３（dd，１H）、６．１１（dd，１H）、５．８４（dd，１H）、５．８２（dd，１H）、４．２４（t，２H）、４．１８（t，２H）、４．０５（t，２H）、４．０１（t，２H）、１．９１（t，２H）、１．９０（t，２H）、１．８４（quint，２H）、１．７３（quint，２H）、１．５７（quint，２H）、１．４８（quint，２H）。

[0184] 化合物（Ｎｏ．１６５）の物性は、次のとおりであった。

転移温度（℃）：C ８０．０ I 重合温度（℃）：２３０．８

[0185] [合成例３]

化合物（NO．１４８）の合成



[0186] 第1工程

化合物 (T-5) (3 g)、トリエチルアミン (2.6 g) およびジクロロメタン (100 ml) を反応器に入れ、氷浴で冷却した。そこにアクリル酸クロライド (1.16 g) を滴下し、室温に戻しながら一晩攪拌した。反応混合物をろかし、ろ液を濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、酢酸エチル：トルエン=1：3) で精製して、化合物 (T-7) (0.77 g；21%) を得た。

[0187] 第2工程

合成例1の第2工程において、化合物 (T-3) のかわりに化合物 (T-7) を用いて同様の操作をすることにより化合物 (No. 148) を合成した。

[0188] 得られた化合物 (No. 148) のNMR分析値は、以下の通りである。

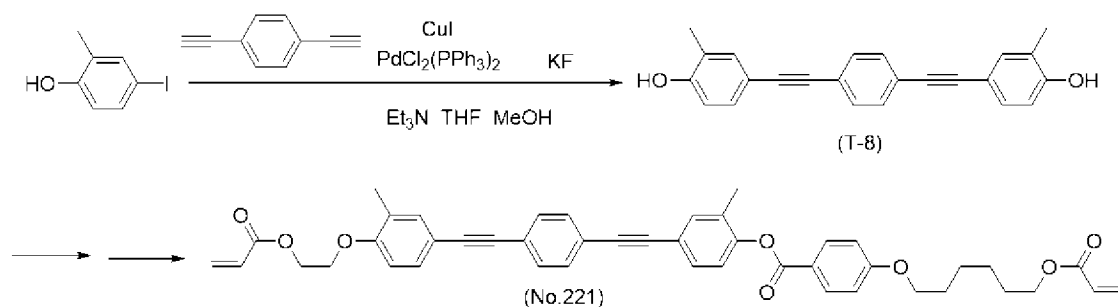
¹H-NMR：化学シフト δ (ppm；CDCl₃)：8.12 (d, 2H)、7.58 (d, 2H)、7.55 (d, 2H)、7.20 (d, 2H)、7.14 (d, 2H)、6.96 (d, 2H)、6.62 (dd, 1H)、6.41 (dd, 1H)、6.31 (dd, 1H)、6.13 (dd, 1H)、6.04 (dd, 1H)、5.82 (dd, 1H)、4.18 (t, 2H)、4.05 (t, 2H)、1.84 (quint, 2H)、1.73 (quint, 2H)、1.53 (quint, 2H)、1.48 (quint, 2H)。

[0189] 化合物 (No. 148) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 (°C)：C 113.8 I 重合温度 (°C)：259.1

[0190] [合成例 4]

化合物 (No. 221) の合成



第 1 工程

4-ヨード-2-メチルフェノール (6 g)、1,4-ジエチニルベンゼン (1.53 g)、ヨウ化銅 (0.12 g)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ (0.90 g)、THF (50 ml) 及びトリエチルアミン (50 ml) を容器に採り、窒素雰囲気下で一晩攪拌した。反応混合物を水に注ぎトルエンにて抽出し、水にて洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥し、減圧濃縮して淡茶色固体を得た。この固体を溶液にして、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (容積比、酢酸エチル：トルエン=1:3)、で精製し、得られたものを MeOH (100 ml) THF (100 ml) の混合溶液に溶解した。そこに KF (7.7 g) を添加し、室温で一晩攪拌した。得られたものを濃縮しシリカゲルカラムクロマトグラフィー (容積比、酢酸エチル：トルエン=1:4) で精製し、化合物 (T-8) (2.95 g; 68%) を得た。

[0191] その後の 2 工程は合成例 1 の第 1 工程および第 2 工程において、化合物 (T-1) のかわりに化合物 (T-8) を用いて同様の操作をすることにより合成できる。

[0192] 得られた化合物 (No. 221) の NMR 分析値は、以下の通りである。

$^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm; CDCl_3): 8.15 (d, 2H)、7.48 (s, 4H)、7.45 (s, 1H)、7.42 (d, 1H)、7.35 (d, 1H)、7.34 (s, 1H)、7.13 (d, 1H)、6.98 (d, 2H)、6.78 (d, 1H)、6.45 (dd, 1H)、6.40 (dd, 1H)、6.17 (dd, 1H)、6.13 (dd, 1H)、

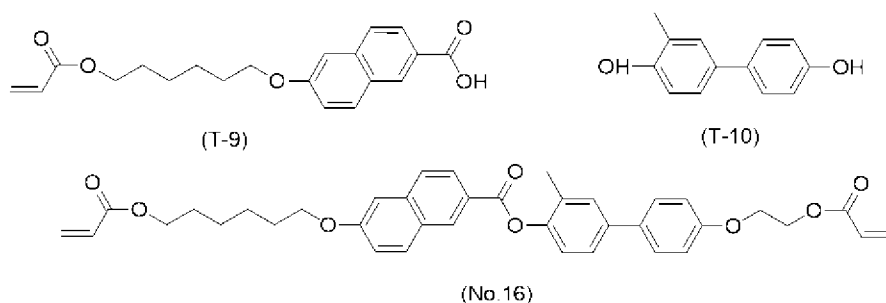
5. 87 (d d, 1 H)、5. 82 (d d, 1 H)、4. 55 (t, 2 H)、
4. 24 (t, 2 H)、4. 18 (t, 2 H)、4. 05 (t, 2 H)、
1. 85 (q u i n t, 2 H)、1. 73 (q u i n t, 2 H)、1. 54
(q u i n t, 2 H)、1. 47 (q u i n t, 2 H)。

[0193] 化合物 (N o. 221) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 (°C) : C 77. 22 N 95. 28 I 重合温度 (°C)
: 198. 8

[0194] [合成例 5]

化合物 (N o. 16) の合成



合成例 1 において、化合物 (T-1) のかわりに化合物 (T-10)、化合物 (T-4) のかわりに化合物 (T-9) を用いて同様の操作をすることにより化合物 (N o. 16) を合成した。尚、化合物 (T-9) および化合物 (T-10) は既知物質でありは、当業者であれば容易に合成法を得ることが出来る。

[0195] 得られた化合物 (N o. 16) の NMR 分析値は、以下の通りである。

$^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (p p m ; CDCl_3) : 8. 73 (s, 1 H)、
8. 18 (d d, 1 H)、7. 90 (d, 1 H)、7. 82 (d, 1 H)、
7. 53 (d, 2 H)、7. 46 (s, 1 H)、7. 43 (d d, 1 H)、
7. 23 (d d, 1 H)、7. 22 (d, 1 H)、7. 19 (s, 1 H)、
7. 00 (d, 2 H)、6. 46 (d d, 1 H)、6. 41 (d d, 1 H)、
6. 19 (d d, 1 H)、6. 13 (d d, 1 H)、5. 87 (d d, 1 H)、
5. 82 (d d, 1 H)、4. 55 (t, 2 H)、4. 27 (t, 2 H)、
4. 19 (t, 2 H)、4. 13 (t, 2 H)、1. 90 (q u i n

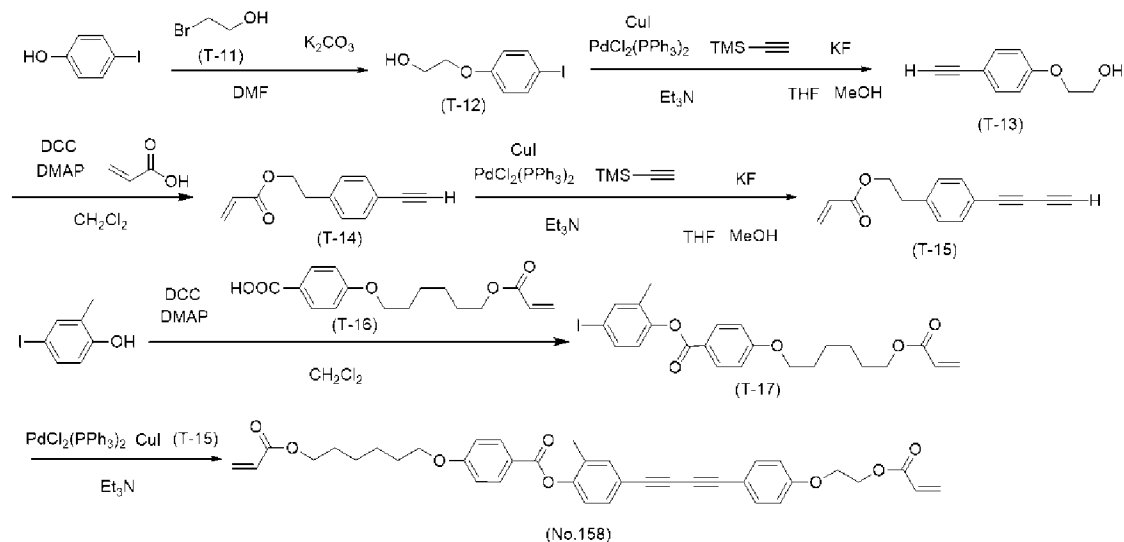
t, 2H)、1.75 (quint, 2H)、1.58 (quint, 2H)、1.50 (quint, 2H)。

[0196] 化合物 (No. 16) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 (°C) : C 96.8 N 154.3 I 重合温度 (°C) : 176.8

[0197] [合成例 6]

化合物 (No. 158) の合成



[0198] 第 1 工程

4-ヨードフェノール (30.0 g)、炭酸カリウム (38.0 g)、化合物 (T-11) (17.0 g) および DMF (300 ml) を反応器に入れ、100°C で 10 時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。有機層を水で洗浄し、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、酢酸エチル : トルエン = 1 : 3) で精製して、化合物 (T-12) (35.0 g ; 97%) を得た。

[0199] 第 2 工程

化合物 (T-12) (35.0 g)、トリメチルシリルアセチレン (15.6 g)、ヨウ化銅 (2.5 g)、Pd(PPh₃)₂Cl₂ (4.67 g) 及びトリエチルアミン (200 ml) を容器に採り、一晩攪拌した。反応混合

物を水に注ぎトルエンにて抽出し、水にて洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥し、減圧濃縮して淡茶色固体を得た。この固体を溶液にして、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（容積比、酢酸エチル：トルエン＝１：４）、で精製し、得られたものをメタノール（１００ｍｌ）ＴＨＦ（１００ｍｌ）の混合溶液に溶解した。そこにＫＦ（７．７ｇ）を添加し、室温で一晩攪拌した。得られたものを濃縮しシリカゲルカラムクロマトグラフィー（容積比、酢酸エチル：トルエン＝１：４）で精製し、化合物（Ｔ－１３）（１７．９ｇ；８３％）を得た。

第３工程

化合物（Ｔ－１３）（３２．５ｇ）、アクリル酸（２０．０ｇ）、DMA P（２．７ｇ）、およびジクロロメタン（５００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（４８．１ｇ）を添加し、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、水層をジクロロメタンで抽出した。有機層を水で洗浄し、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（トルエン）で精製して、化合物（Ｔ－１４）（４５ｇ；９３％）を得た。

第４工程

化合物（Ｔ－１４）（２４．０ｇ）、トリメチルシリルアセチレン（５４．５ｇ）、ヨウ化銅（２．１１ｇ）、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ （３．８９ｇ）、ＴＨＦ（２００ｍｌ）及びトリエチルアミン（２００ｍｌ）を容器に採り、酸素下で一晩攪拌した。反応混合物を水に注ぎトルエンにて抽出し、水にて洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥し、減圧濃縮して淡茶色固体を得た。この固体を溶液にして、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（容積比、酢酸エチル：トルエン＝１：４）、で精製し、得られたものをメタノール（１００ｍｌ）ＴＨＦ（１００ｍｌ）の混合溶液に溶解した。そこにＫＦ（７．７ｇ）を添加し、室温で一晩攪拌した。得られたものを濃縮しシリカゲルカラムクロマトグラフィー（容積比、酢酸エチル：トルエン＝１：４）で精製し、化合物（Ｔ－１５）（１２．６ｇ；６６％）を得た。

第5工程

4-ヨード-2-メチルフェノール (50.0 g)、化合物 (T-16) (65.5 g)、DMAP (5.2 g)、およびジクロロメタン (1000 ml) を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへDCC (46.2 g) を添加し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物をろ別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。有機層を水で洗浄し、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、酢酸エチル：トルエン=1：9) で精製して、化合物 (T-17) (86 g ; 79%) を得た。

第6工程

化合物 (T-17) (4.9 g)、化合物 (T-15) (2.2 g)、ヨウ化銅 (0.05 g)、Pd (PPh₃)₂Cl₂ (0.18 g)、THF (200 ml) 及びトリエチルアミン (200 ml) を容器に採り、一晩攪拌した。反応混合物を水に注ぎトルエンにて抽出し、水にて洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥し、減圧濃縮して淡茶色固体を得た。この固体を溶液にして、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (容積比、酢酸エチル：トルエン=1：9)、で精製し、化合物 (No. 158) (21 g ; 64.5%) を得た。

[0200] 得られた化合物 (No. 158) のNMR分析値は、以下の通りである。

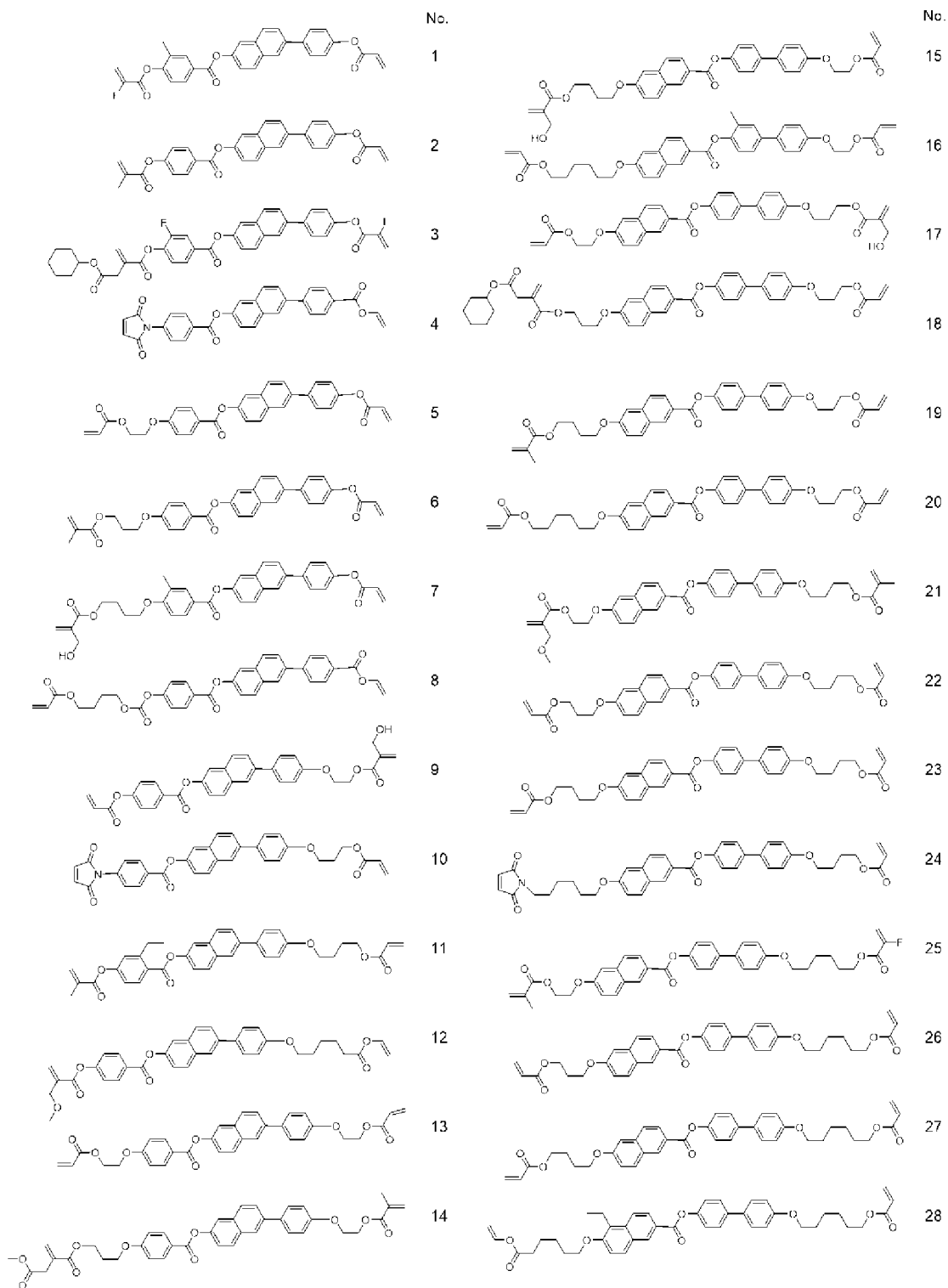
¹H-NMR : 化学シフト δ (ppm ; CDCl₃) : 8.13 (d, 2H)、7.49 (d, 2H)、7.44 (s, 1H)、7.40 (d, 1H)、7.11 (d, 1H)、6.98 (d, 2H)、6.88 (d, 2H)、6.43 (dd, 2H)、6.15 (dd, 2H)、5.85 (dd, 2H)、4.52 (t, 2H)、4.23 (t, 2H)、4.18 (t, 2H)、4.05 (t, 2H)、2.21 (s, 3H)、1.84 (quint, 2H)、1.73 (quint, 2H)、1.55 (quint, 2H)、1.47 (quint, 2H)。

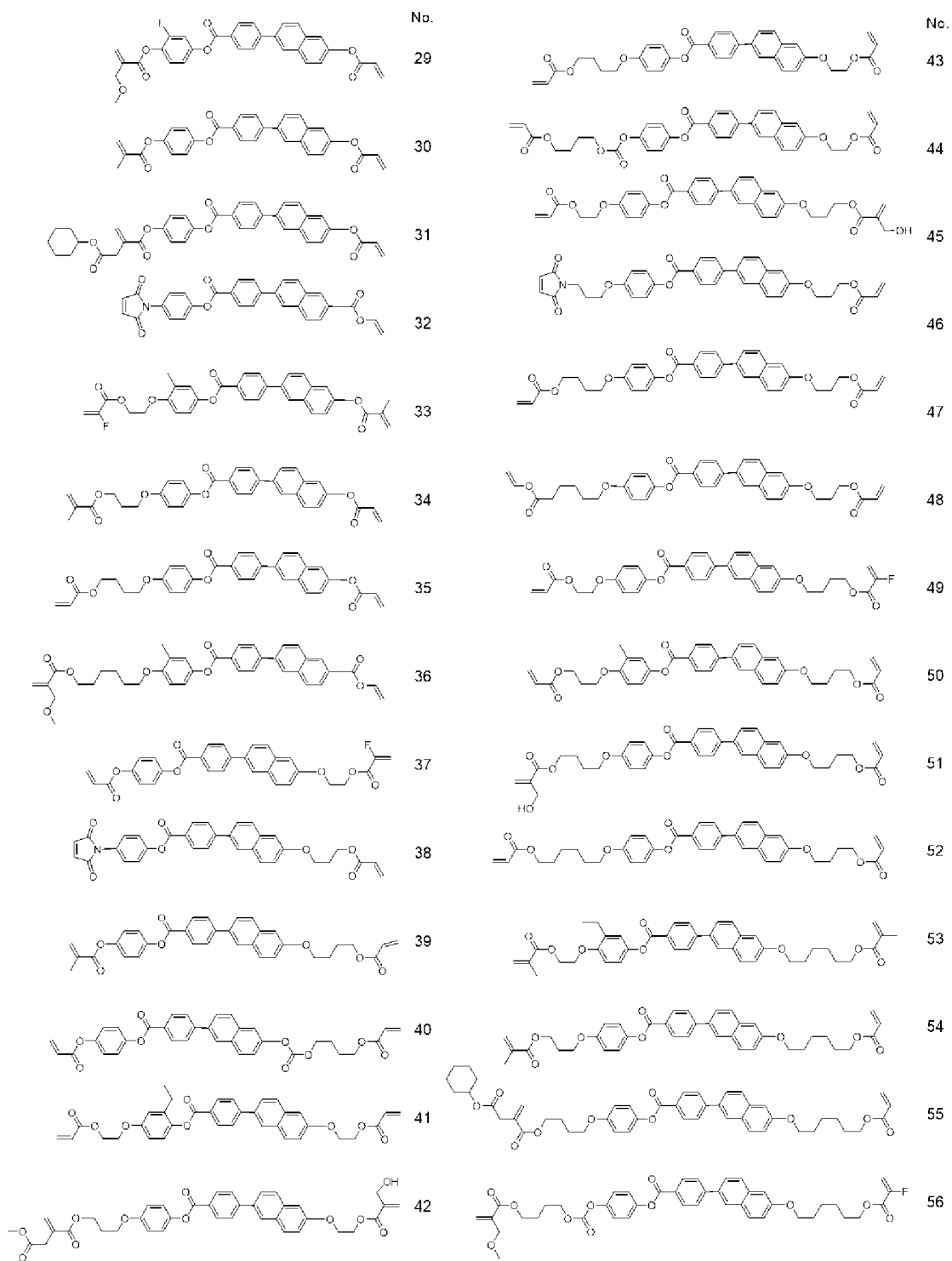
[0201] 化合物 (No. 158) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 (°C) : C 77.9 N 82.5 I 重合温度 (°C) : 231.86

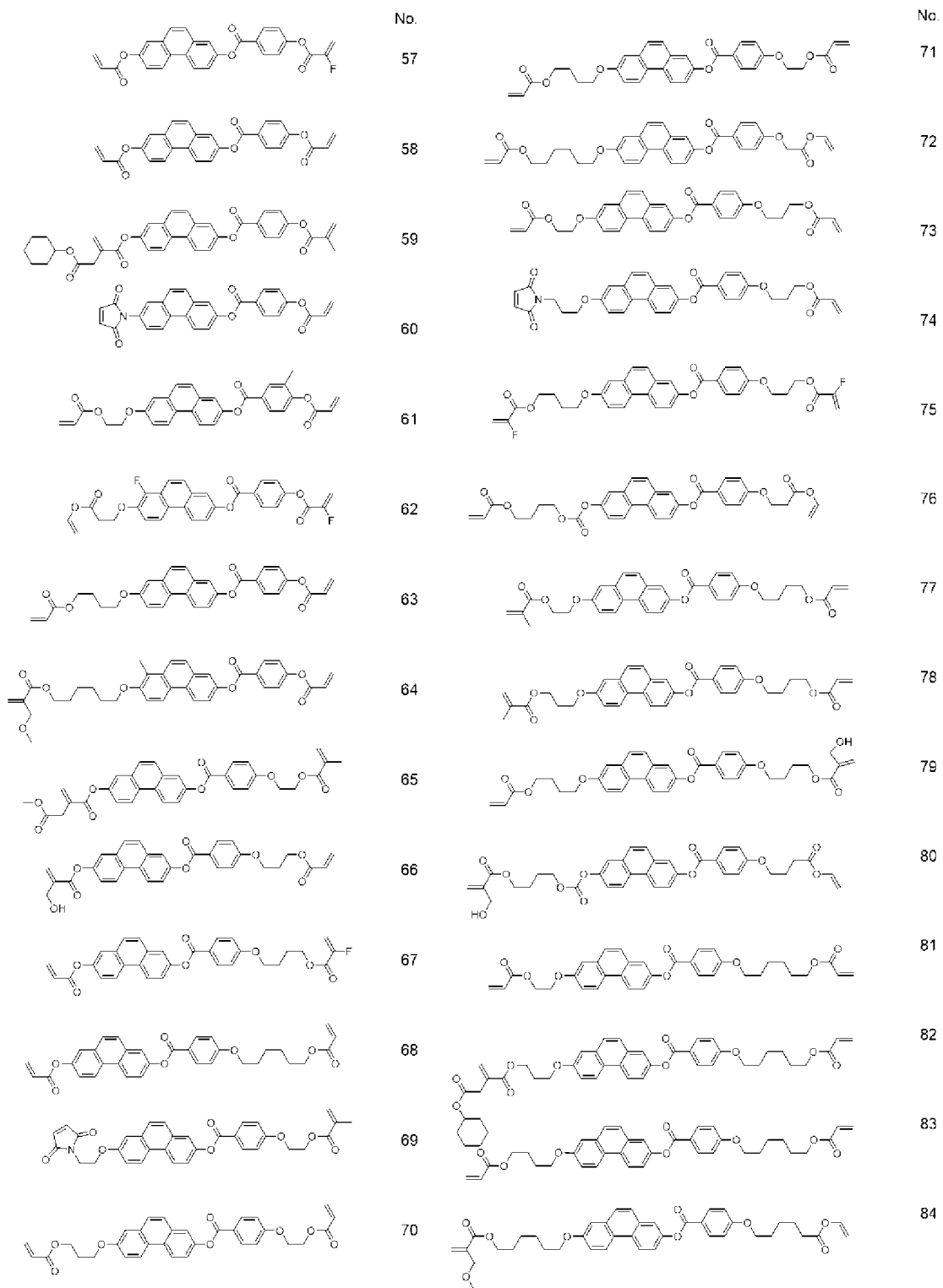
[0202] 合成例に記載した合成法に準じて、以下の化合物 (No. 1) ~ (No. 224) を合成できる。

[0203]

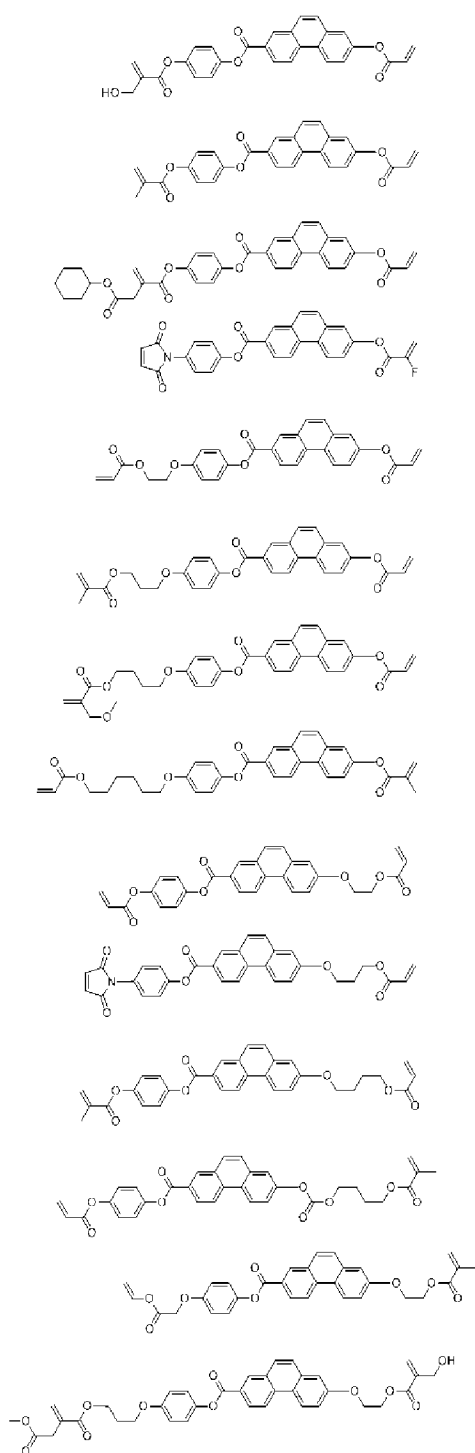




[0204]



[0205]



No.

85

86

87

88

89

90

91

92

93

94

95

96

97

98

No.

99

100

101

102

103

104

105

106

107

108

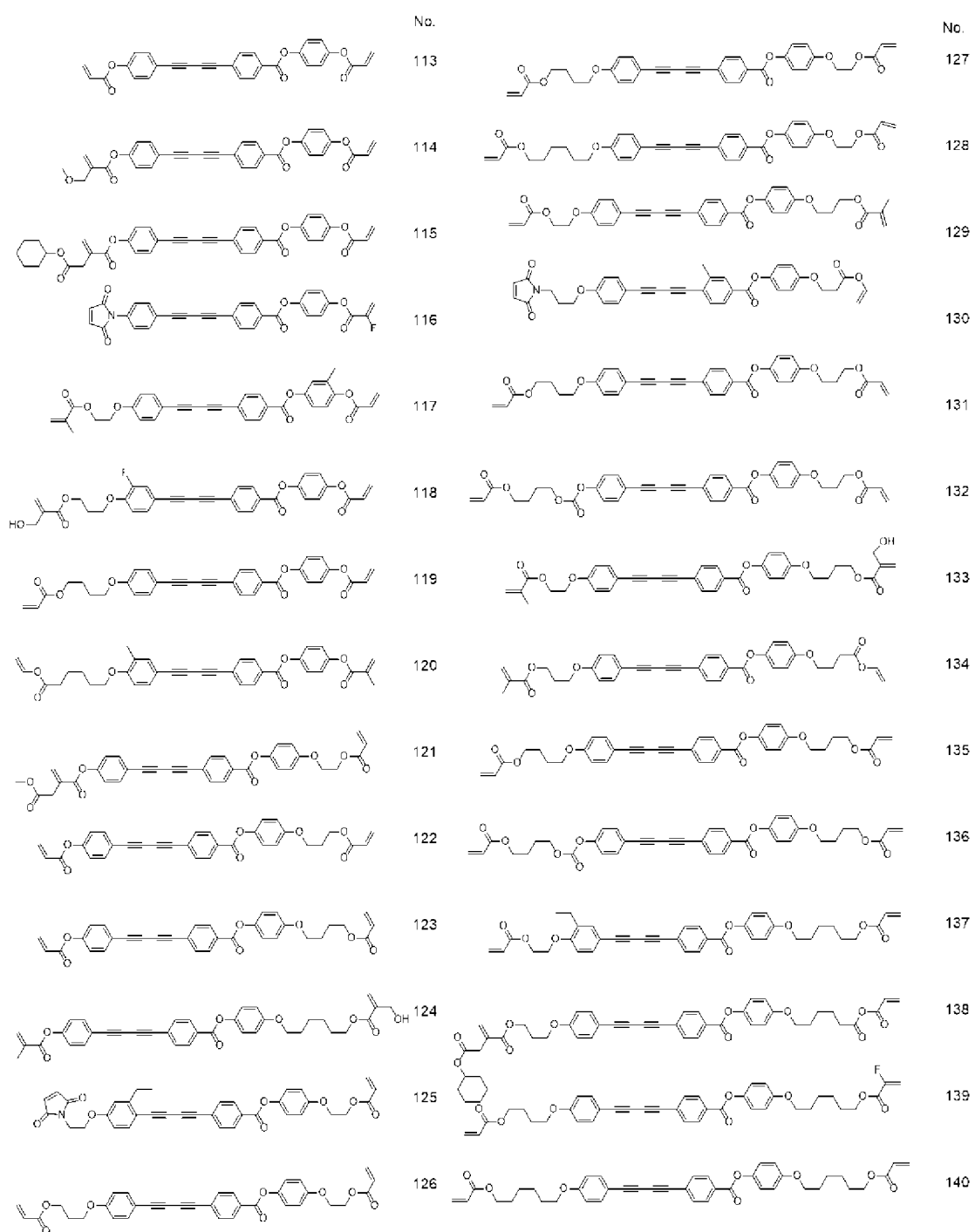
109

110

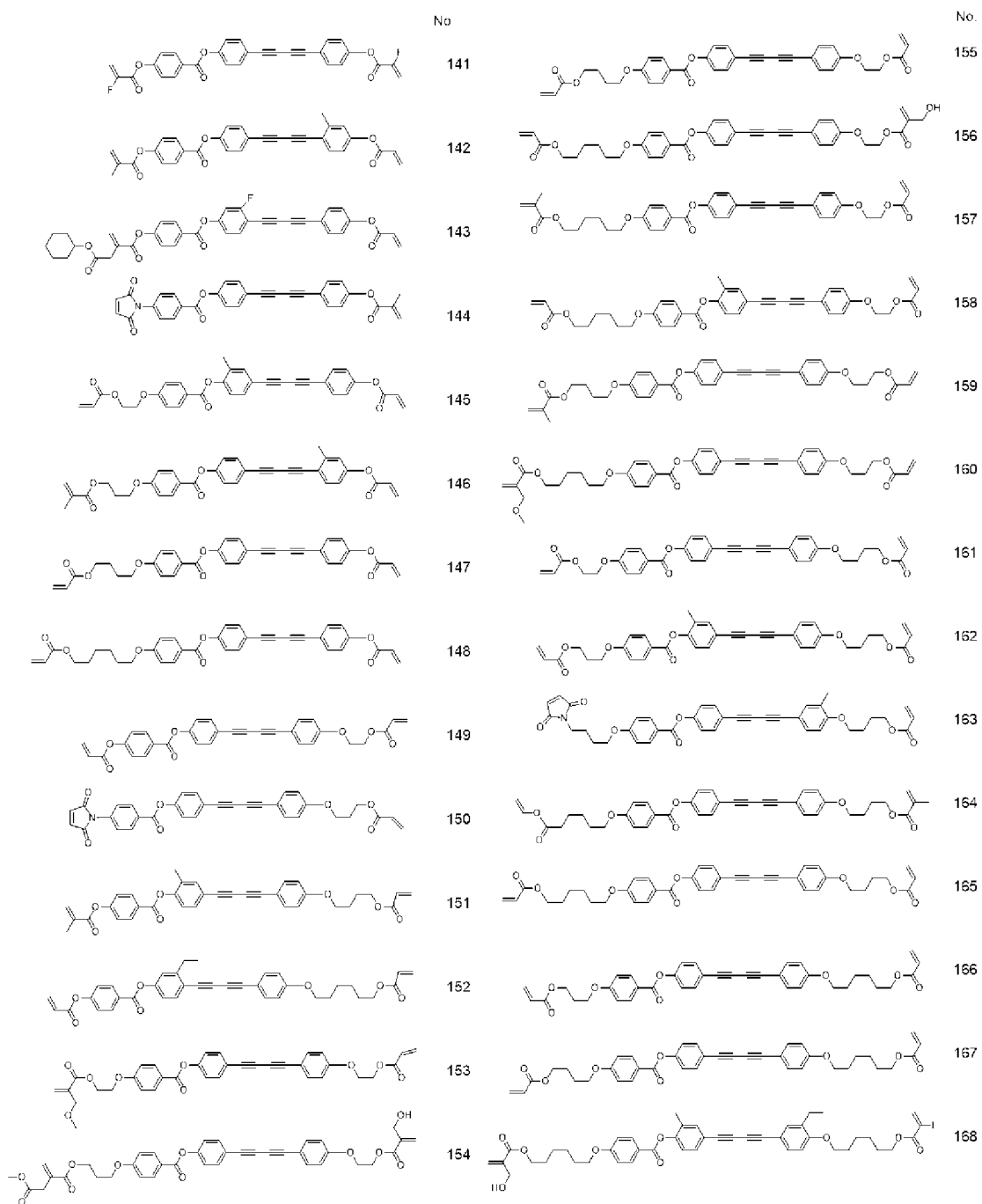
111

112

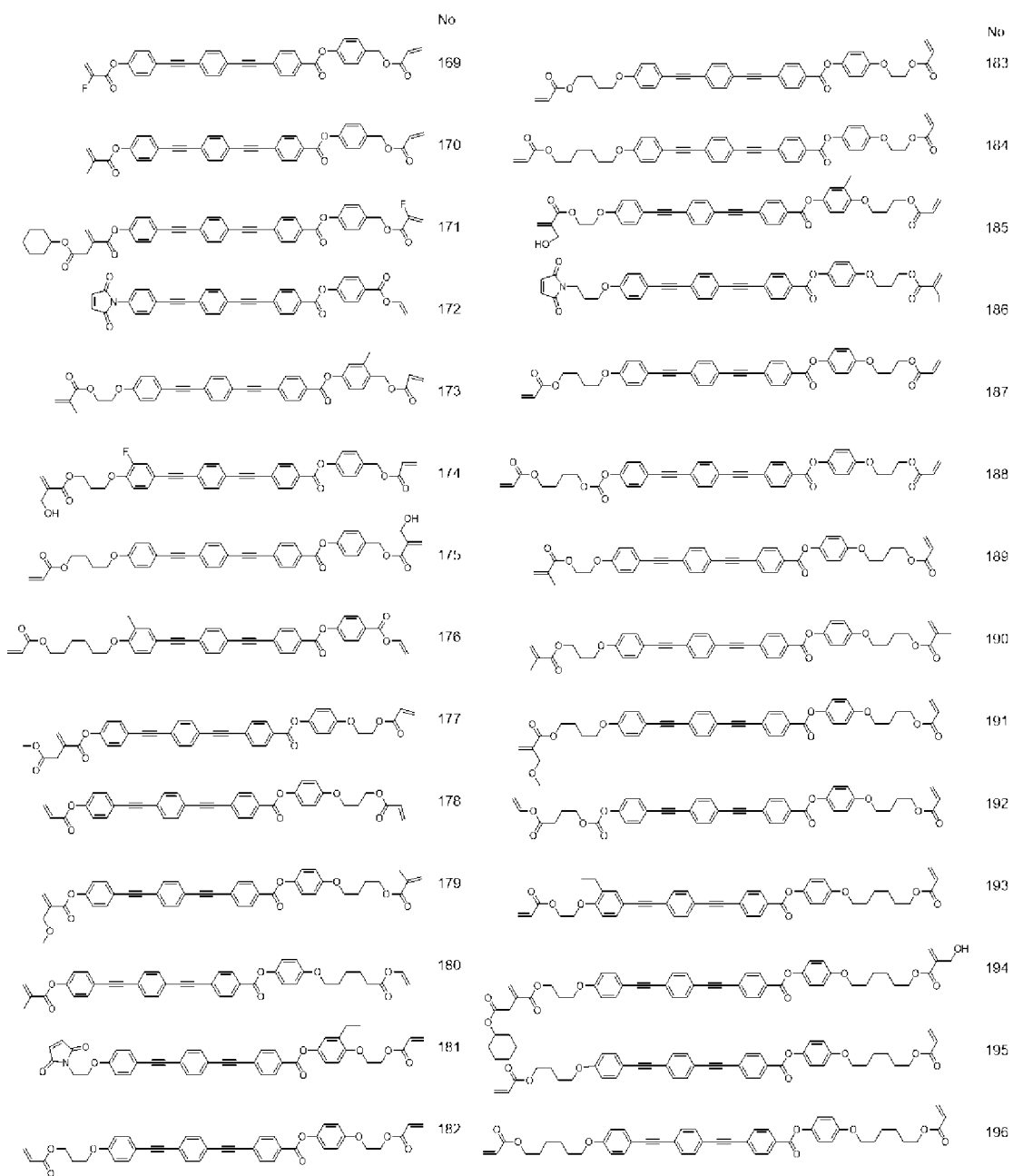
[0206]



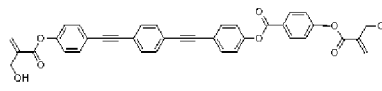
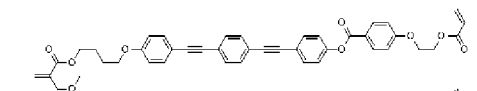
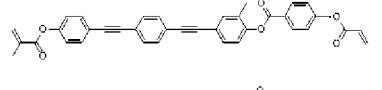
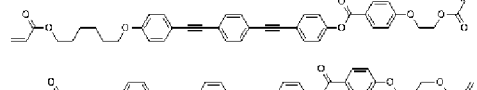
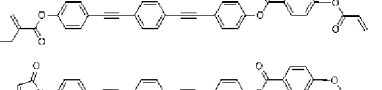
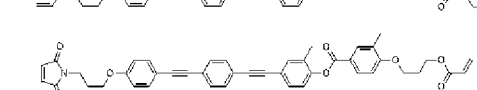
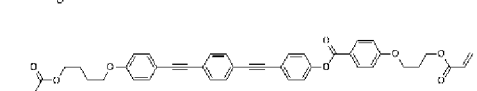
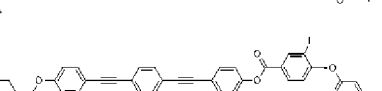
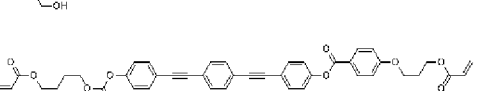
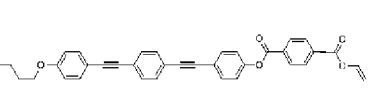
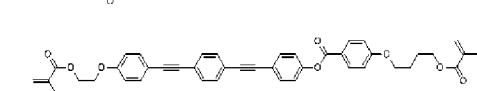
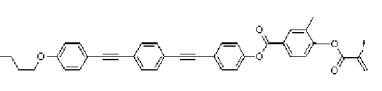
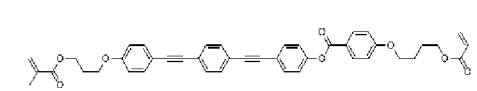
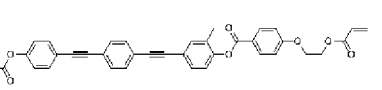
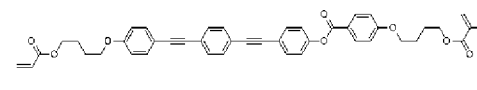
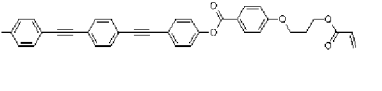
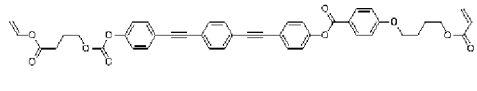
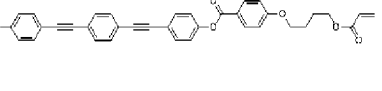
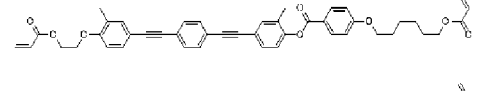
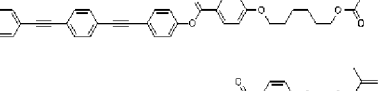
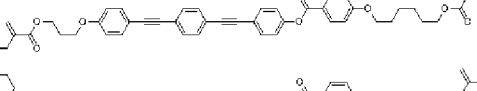
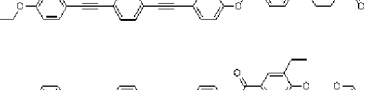
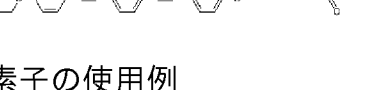
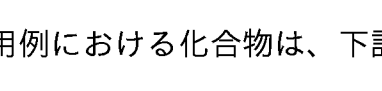
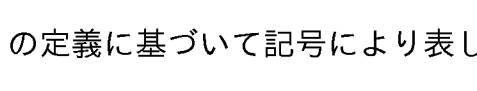
[0207]



[0208]



[0209]

	No. 197		No. 211
	198		212
	199		213
	200		214
	201		215
	202		216
	203		217
	204		218
	205		219
	206		220
	207		221
	208		222
	209		223
	210		224

[0210] 2. 素子の使用例

使用例における化合物は、下記の表2の定義に基づいて記号により表した。表2において、1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。記号の後にあるカッコ内の番号は化合物の番号に対応する。(一)の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合(百分率)は、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率(重量%)である。最後に、組成物の特性値をまとめた。

表2 記号を用いた化合物の表記法

R-(A₁)-Z₁-……-Z_n-(A_n)-R'

1) 左末端基 R-	記号	4) 環構造 -A _r -	記号
FC _n H _{2n} -	Fn-		H
C _r H _{2r+1} -	n-		B
C _r H _{2r+1} O-	nO-		B(F)
C _m H _{2m+1} OC _r H _{2r} -	mOn-		B(2F)
CH ₂ =CH-	V-		B(F,F)
C _r H _{2r+1} -CH=CH-	nV-		B(2F,5F)
CH ₂ =CH-C _r H _{2r} -	Vn-		B(2F,3F)
C _m H _{2m+1} -CH=CH-C _r H _{2r} -	mVn-		Py
CF ₂ =CH-	VFF-		G
CF ₂ =CH-C _r H _{2r} -	VFFn-		ch
C _m H _{2m+1} CF ₂ C _n H _{2n} -	m(CF ₂)n-		Mi
CH ₂ =CHCOO-	AC-	 Bm(n)  Dh  dh  B(2F,3Cl)  Cro(7F,8F)	
CH ₂ =C(CH ₃)COO-	MAC-		
2) 右末端基 -R'	記号		
-C _r H _{2r+1}	-n		
-OC _r H _{2r+1}	-On		
-COOCH ₃	-EMe		
-CH=CH ₂	-V		
-CH=CH-C _r H _{2r+1}	-Vn		
-C _r H _{2r} -CH=CH ₂	-nV		
-C _m H _{2m} -CH=CH-C _r H _{2r+1}	-mVn		
-CH=CF ₂	-VFF		
-F	-F		
-Cl	-CL		
-OCF ₃	-OCF3		
-OCF ₂ H	-OCF2H		
-CF ₃	-CF3		
-CF=CH-CF ₃	-FVCF3		
-OCH=CH-CF ₃	-OVCF3		
-C≡N	-C		
-OCOCH=CH ₂	-AC		
-OCOC(CH ₃)=CH ₂	-MAC		
3) 結合基 -Z _r -	記号		
-C _r H _{2r} -	n		
-COO-	E		
-CH=CH-	V		
-CH ₂ O-	IO		
-CH=CHO-	VO		
-OCH=CH-	OV		
-CF=CF-	VFF		
-CH=CF-	VF		
-OCH ₂ -	OI		
-OCF ₂ -	x		
-CF ₂ O-	X		
-C≡C-	T		

5) 表記例	
例1 3-HBB(2F,3F)-O2	例2 5-HHBB(F,F)-F
例3 3-HB-O2	例4 3-HBB(F,F)-F

[0211] 1. 原料

配向膜を有しない素子に、極性化合物を添加した組成物を注入した。直線偏光を照射したあと、この素子における液晶分子の配向を確認した。最初に原料を説明する。原料は、組成物（M1）から組成物（M41）のような組成物、化合物（No. 1）から化合物（No. 224）のような極性化合物の中から適宜選択した。組成物は以下のとおりである。

[0212] [組成物（M1）]

3-HB(2F, 3F)-O2	(9-1)	10%
5-HB(2F, 3F)-O2	(9-1)	7%
2-BB(2F, 3F)-O2	(9-3)	7%
3-BB(2F, 3F)-O2	(9-3)	7%
3-B(2F, 3F)B(2F, 3F)-O2	(9-7)	3%
2-HHB(2F, 3F)-O2	(10-1)	5%
3-HHB(2F, 3F)-O2	(10-1)	10%
2-HBB(2F, 3F)-O2	(10-7)	8%
3-HBB(2F, 3F)-O2	(10-7)	10%
2-HH-3	(2-1)	14%
3-HB-O1	(2-5)	5%
3-HHB-1	(3-1)	3%
3-HHB-O1	(3-1)	3%
3-HHB-3	(3-1)	4%
2-BB(F)B-3	(3-6)	4%

$N I = 73.2^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.113$; $\Delta \varepsilon = -4.0$
 ; $V_{th} = 2.18\text{V}$; $\eta = 22.6\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0213] [組成物 (M2)]

3-HB (2F, 3F) -O4	(9-1)	6%
3-H2B (2F, 3F) -O2	(9-4)	8%
3-H1OB (2F, 3F) -O2	(9-5)	4%
3-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	7%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	7%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	7%
3-HH2B (2F, 3F) -O2	(10-4)	7%
5-HH2B (2F, 3F) -O2	(10-4)	4%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	5%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	5%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	6%
2-HH-3	(2-1)	12%
1-BB-5	(2-8)	12%
3-HHB-1	(3-1)	4%
3-HHB-O1	(3-1)	3%
3-HBB-2	(3-4)	3%

$N I = 82.8^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.118$; $\Delta \varepsilon = -4.4$
 ; $V_{th} = 2.13\text{V}$; $\eta = 22.5\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0214] [組成物 (M3)]

3-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	7%
5-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	7%
3-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	8%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	5%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	4%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(10-5)	4%

2-BB (2F, 3F) B-3	(11-1)	5%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	8%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	5%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	8%
3-HH-V	(2-1)	27%
3-HH-V1	(2-1)	6%
V-HHB-1	(3-1)	3%

$Nl = 78.1^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.107$; $\Delta \varepsilon = -3.2$
 $; V_{th} = 2.02\text{V}$; $\eta = 15.9\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0215] [組成物 (M4)]

3-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	10%
5-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	10%
3-H2B (2F, 3F) -O2	(9-4)	8%
5-H2B (2F, 3F) -O2	(9-4)	8%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	6%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	8%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	7%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	7%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(10-3)	5%
3-HH-4	(2-1)	14%
V-HHB-1	(3-1)	10%
3-HBB-2	(3-4)	7%

$Nl = 88.5^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.108$; $\Delta \varepsilon = -3.8$
 $; V_{th} = 2.25\text{V}$; $\eta = 24.6\text{mPa}\cdot\text{s}$; $VHR-1 = 99.1\%$
 $; VHR-2 = 98.2\%$; $VHR-3 = 97.8\%$.

[0216] [組成物 (M5)]

3-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	7%
-------------------	-------	----

3-HB (2 F, 3 F) -O 4	(9-1)	8%
3-H 2 B (2 F, 3 F) -O 2	(9-4)	8%
3-BB (2 F, 3 F) -O 2	(9-3)	10%
2-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(10-1)	4%
3-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(10-1)	7%
3-HHB (2 F, 3 F) -1	(10-1)	6%
2-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	6%
3-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	6%
4-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	5%
5-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	4%
3-HEB (2 F, 3 F) B (2 F, 3 F) -O 2		
	(16-1)	3%
3-H1OCro (7 F, 8 F) -5	(13-2)	3%
3-HDhB (2 F, 3 F) -O 2	(10-3)	5%
3-HH-O 1	(2-1)	5%
1-BB-5	(2-8)	4%
V-HHB-1	(3-1)	4%
5-HB (F) BH-3	(4-2)	5%
$N I = 81.1^{\circ}C ; T_c < -30^{\circ}C ; \Delta n = 0.119 ; \Delta \varepsilon = -4.5$ $; V_{th} = 1.69V ; \eta = 31.4 mPa \cdot s .$		

[0217] [組成物 (M6)]

3-HB (2 F, 3 F) -O 4	(9-1)	15%
3-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	8%
4-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	5%
5-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	7%
3-dhBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-9)	5%
3-chB (2 F, 3 F) -O 2	(16-2)	7%
2-HchB (2 F, 3 F) -O 2	(16-3)	8%

5-HH-V	(2-1)	18%
7-HB-1	(2-5)	5%
V-HHB-1	(3-1)	7%
V2-HHB-1	(3-1)	7%
3-HBB (F) B-3	(4-5)	8%
$NI = 98.8^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.111$; $\Delta \varepsilon = -3.2$; $V_{th} = 2.47\text{V}$; $\eta = 23.9\text{mPa}\cdot\text{s}$.		

[0218] [組成物 (M7)]

3-H2B (2F, 3F) -O2	(9-4)	18%
5-H2B (2F, 3F) -O2	(9-4)	17%
3-HHB (2F, 3Cl) -O2	(10-12)	5%
3-HBB (2F, 3Cl) -O2	(10-13)	8%
5-HBB (2F, 3Cl) -O2	(10-13)	7%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(10-3)	5%
3-HH-V	(2-1)	11%
3-HH-VFF	(2-1)	7%
F3-HH-V	(2-1)	10%
3-HHEH-3	(3-13)	4%
3-HB (F) HH-2	(4-7)	4%
3-HHEBH-3	(4-6)	4%
$NI = 77.5^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.084$; $\Delta \varepsilon = -2.6$; $V_{th} = 2.43\text{V}$; $\eta = 22.8\text{mPa}\cdot\text{s}$.		

[0219] [組成物 (M8)]

3-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	8%
3-H2B (2F, 3F) -O2	(9-4)	10%
3-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	10%
2O-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	3%
2-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	4%

3-HHB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 1)	7 %
2-HHB (2 F, 3 F) - 1	(1 0 - 1)	5 %
2-BB (2 F, 3 F) B-3	(1 1 - 1)	6 %
2-BB (2 F, 3 F) B-4	(1 1 - 1)	6 %
2-HBB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 7)	4 %
3-HBB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 7)	7 %
3-HH1OCro (7 F, 8 F) - 5	(1 3 - 6)	4 %
3-HDhB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 3)	6 %
3-dhBB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 9)	4 %
3-HH-V	(2 - 1)	1 1 %
1-BB-5	(2 - 8)	5 %
N I = 7 0 . 6 ° C ; T c < - 2 0 ° C ; Δ n = 0 . 1 2 9 ; Δ ε = - 4 . 3		
; V t h = 1 . 6 9 V ; η = 2 7 . 0 m P a · s .		

[0220] [組成物 (M9)]

3-HB (2 F, 3 F) - O 4	(9 - 1)	1 4 %
3-H1OB (2 F, 3 F) - O 2	(9 - 5)	3 %
3-BB (2 F, 3 F) - O 2	(9 - 3)	1 0 %
2-HHB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 1)	7 %
3-HHB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 1)	7 %
3-HH1OB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 5)	6 %
2-HBB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 7)	4 %
3-HBB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 7)	6 %
4-HBB (2 F, 3 F) - O 2	(1 0 - 7)	4 %
3-HH-V	(2 - 1)	1 4 %
1-BB-3	(2 - 8)	3 %
3-HHB-1	(3 - 1)	4 %
3-HHB-O 1	(3 - 1)	4 %
V-HBB-2	(3 - 4)	4 %

1-BB (F) B-2V (3-6) 6%

5-HBBH-1O1 (4-1) 4%

$Nl = 93.0^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.123$; $\Delta \varepsilon = -4.0$
; $V_{th} = 2.27\text{V}$; $\eta = 29.6\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0221] [組成物 (M10)]

3-HB (2F, 3F) -O4 (9-1) 6%

3-H2B (2F, 3F) -O2 (9-4) 8%

3-H1OB (2F, 3F) -O2 (9-5) 5%

3-BB (2F, 3F) -O2 (9-3) 10%

2-HHB (2F, 3F) -O2 (10-1) 7%

3-HHB (2F, 3F) -O2 (10-1) 7%

5-HHB (2F, 3F) -O2 (10-1) 7%

2-HBB (2F, 3F) -O2 (10-7) 4%

3-HBB (2F, 3F) -O2 (10-7) 7%

5-HBB (2F, 3F) -O2 (10-7) 6%

3-HH-V (2-1) 11%

1-BB-3 (2-8) 6%

3-HHB-1 (3-1) 4%

3-HHB-O1 (3-1) 4%

3-HBB-2 (3-4) 4%

3-B (F) BB-2 (3-8) 4%

$Nl = 87.6^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.126$; $\Delta \varepsilon = -4.5$
; $V_{th} = 2.21\text{V}$; $\eta = 25.3\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0222] [組成物 (M11)]

3-HB (2F, 3F) -O4 (9-1) 6%

3-H2B (2F, 3F) -O2 (9-4) 8%

3-H1OB (2F, 3F) -O2 (9-5) 4%

3-BB (2F, 3F) -O2 (9-3) 7%

2-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	6%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	10%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	8%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	5%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	7%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	5%
2-HH-3	(2-1)	12%
1-BB-3	(2-8)	6%
3-HHB-1	(3-1)	3%
3-HHB-O1	(3-1)	4%
3-HBB-2	(3-4)	6%
3-B (F) BB-2	(3-8)	3%

$N I = 93.0^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.124$; $\Delta \varepsilon = -4.5$
; $V_{th} = 2.22\text{V}$; $\eta = 25.0\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0223] [組成物 (M12)]

3-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	7%
5-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	7%
3-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	8%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	4%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	5%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(10-5)	5%
2-BB (2F, 3F) B-3	(11-1)	4%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	8%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	5%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	8%
3-HH-V	(2-1)	33%
V-HHB-1	(3-1)	3%

$N I = 76.4^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.104$; $\Delta \varepsilon = -3.2$
 ; $V_{th} = 2.06\text{V}$; $\eta = 15.6\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0224] [組成物 (M13)]

2-H1OB (2F, 3F) -O2	(9-5)	6%
3-H1OB (2F, 3F) -O2	(9-5)	4%
3-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	3%
2-HH1OB (2F, 3F) -O2	(10-5)	14%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	7%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	11%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	9%
2-HH-3	(2-1)	5%
3-HH-VFF	(2-1)	30%
1-BB-3	(2-8)	5%
3-HHB-1	(3-1)	3%
3-HBB-2	(3-4)	3%

$N I = 78.3^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.103$; $\Delta \varepsilon = -3.2$
 ; $V_{th} = 2.17\text{V}$; $\eta = 17.7\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0225] [組成物 (M14)]

3-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	5%
5-HB (2F, 3F) -O2	(9-1)	7%
3-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	8%
3-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	5%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(10-1)	4%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(10-5)	5%
2-BB (2F, 3F) B-3	(11-1)	4%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	9%
4-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	4%

5-HBB (2F, 3F)-O2	(10-7)	8%
3-HH-V	(2-1)	27%
3-HH-V1	(2-1)	6%
V-HHB-1	(3-1)	5%
NI=81.2°C; Tc<-20°C; Δn=0.107; Δε=-3.2		
; Vth=2.11V; η=15.5mPa·s.		

[0226] [組成物 (M15)]

3-H2B (2F, 3F)-O2	(9-4)	7%
3-HHB (2F, 3F)-O2	(10-1)	8%
3-HH1OB (2F, 3F)-O2	(10-5)	5%
2-BB (2F, 3F)B-3	(11-1)	7%
2-BB (2F, 3F)B-4	(11-1)	7%
3-HDhB (2F, 3F)-O2	(10-3)	3%
5-HDhB (2F, 3F)-O2	(10-3)	4%
2-HchB (2F, 3F)-O2	(16-3)	8%
4-HH-V	(2-1)	15%
3-HH-V1	(2-1)	6%
1-HH-2V1	(2-1)	6%
3-HH-2V1	(2-1)	4%
V2-BB-1	(2-8)	5%
1V2-BB-1	(2-8)	5%
3-HHB-1	(3-1)	6%
3-HB (F)BH-3	(4-2)	4%

NI=88.7°C; Tc<-30°C; Δn=0.115; Δε=-1.9
; Vth=2.82V; η=17.3mPa·s.

[0227] [組成物 (M16)]

V2-H2B (2F, 3F)-O2	(9-4)	8%
V2-H1OB (2F, 3F)-O4	(9-5)	4%

3-BB (2 F, 3 F) -O 2	(9-3)	7%
2-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(10-1)	7%
3-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(10-1)	7%
3-HH2B (2 F, 3 F) -O 2	(10-4)	7%
5-HH2B (2 F, 3 F) -O 2	(10-4)	4%
V-HH2B (2 F, 3 F) -O 2	(10-4)	6%
V2-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	5%
V-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(10-7)	5%
V-HBB (2 F, 3 F) -O 4	(10-7)	6%
2-HH-3	(2-1)	12%
1-BB-5	(2-8)	12%
3-HHB-1	(3-1)	4%
3-HHB-O 1	(3-1)	3%
3-HBB-2	(3-4)	3%

$N I = 89.9^{\circ}C$; $T_c < -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.122$; $\Delta \varepsilon = -4.2$
; $V_{th} = 2.16V$; $\eta = 23.4 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0228] [組成物 (M17)]

3-HB (2 F, 3 F) -O 2	(9-1)	3%
V-HB (2 F, 3 F) -O 2	(9-1)	3%
V2-HB (2 F, 3 F) -O 2	(9-1)	5%
5-H2B (2 F, 3 F) -O 2	(9-4)	5%
V2-BB (2 F, 3 F) -O 2	(9-3)	3%
1V2-BB (2 F, 3 F) -O 2	(9-3)	3%
3-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(10-1)	6%
V-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(10-1)	6%
V-HHB (2 F, 3 F) -O 4	(10-1)	5%
V2-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(10-1)	4%
V2-BB (2 F, 3 F) B-1	(11-1)	4%

V 2-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1 0-7)	5 %
V-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1 0-7)	4 %
V-HBB (2 F, 3 F) -O 4	(1 0-7)	5 %
V-HHB (2 F, 3 C I) -O 2	(1 0-1 2)	3 %
3-HH-V	(2-1)	2 7 %
3-HH-V 1	(2-1)	6 %
V-HHB-1	(3-1)	3 %

$N I = 77.1^{\circ}C$; $T_c < -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.101$; $\Delta \varepsilon = -3.0$
; $V_{th} = 2.04 V$; $\eta = 13.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0229] [組成物 (M18)]

V-HB (2 F, 3 F) -O 2	(9-1)	10 %
V 2-HB (2 F, 3 F) -O 2	(9-1)	10 %
2-H1OB (2 F, 3 F) -O 2	(9-5)	3 %
3-H1OB (2 F, 3 F) -O 2	(9-5)	3 %
2O-BB (2 F, 3 F) -O 2	(9-3)	3 %
V 2-BB (2 F, 3 F) -O 2	(9-3)	8 %
V 2-HHB (2 F, 3 F) -O 2	(1 0-1)	5 %
2-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1 0-7)	3 %
3-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1 0-7)	3 %
V-HBB (2 F, 3 F) -O 2	(1 0-7)	6 %
V-HBB (2 F, 3 F) -O 4	(1 0-7)	8 %
V-HHB (2 F, 3 C I) -O 2	(1 0-1 2)	7 %
3-HH-4	(2-1)	1 4 %
V-HHB-1	(3-1)	10 %
3-HBB-2	(3-4)	7 %

$N I = 75.9^{\circ}C$; $T_c < -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.114$; $\Delta \varepsilon = -3.9$
; $V_{th} = 2.20 V$; $\eta = 24.7 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0230] [組成物 (M19)]

2-H1OB (2F, 3F) -O2	(9-5)	7%
3-H1OB (2F, 3F) -O2	(9-5)	11%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(10-5)	8%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	3%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	9%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	7%
V-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	8%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(10-3)	3.5%
2-HH-3	(2-1)	21%
3-HH-4	(2-1)	5%
3-HB-O2	(2-5)	2.5%
1-BB-3	(2-8)	4%
3-HHB-1	(3-1)	1.5%
3-HBB-2	(3-4)	9.5%

$Nl = 80.8^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.108$; $\Delta \varepsilon = -3.8$
; $V_{th} = 2.02\text{V}$; $\eta = 19.8\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0231] [組成物 (M20)]

2-H1OB (2F, 3F) -O2	(9-5)	5.5%
2-BB (2F, 3F) -O2	(9-3)	11%
2-HH1OB (2F, 3F) -O2	(10-5)	13%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(10-5)	15.5%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	9%
2-HH-3	(2-1)	25%
3-HH-4	(2-1)	3%
3-HBB-2	(3-4)	14%
5-B(F)BB-2	(3-8)	4%

$Nl = 85.3^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.109$; $\Delta \varepsilon = -3.6$
; $V_{th} = 2.06\text{V}$; $\eta = 20.9\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0232] [組成物 (M21)]

V-HB (2F, 3F) - O2	(9-1)	7%
V-2BB (2F, 3F) - O2	(9-3)	10%
V-HHB (2F, 3F) - O1	(10-1)	7%
V-HHB (2F, 3F) - O2	(10-1)	9%
V-2HHB (2F, 3F) - O2	(10-1)	8%
3-HH2B (2F, 3F) - O2	(10-4)	9%
V-HBB (2F, 3F) - O2	(10-7)	7%
V-HBB (2F, 3F) - O4	(10-7)	7%
2-HH-3	(2-1)	9%
3-HH-4	(2-1)	3%
3-HH-V	(2-1)	15%
3-HH-V1	(2-1)	6%
1V2-HH-3	(2-1)	3%

$N I = 87.5^{\circ}C$; $T_c < -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.100$; $\Delta \varepsilon = -3.4$
 $; V_{th} = 2.25V$; $\eta = 16.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0233] [組成物 (M22)]

3-HHXB (F, F) - F	(6-100)	6%
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(6-97)	13%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	4%
4-HHBB (F, F) - F	(7-6)	5%
3-HBBXB (F, F) - F	(7-32)	3%
3-BB (F) B (F, F) XB (F) - F	(7-46)	2%
4-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-47)	8%
5-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-47)	7%
3-HH-V	(2-1)	44%
V-HHB-1	(3-1)	6%
2-BB (F) B-3	(3-6)	2%

$N I = 79.8^{\circ}\text{C}$; $T_c < -30^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.106$; $\Delta \varepsilon = 8.5$; $V_{th} = 1.45\text{V}$; $\eta = 11.6\text{mPa}\cdot\text{s}$; $\gamma_1 = 60.0\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0234] [組成物 (M23)]

5-HXB (F, F) - F	(5-13)	3%
3-HHXB (F, F) - F	(6-100)	3%
3-HHXB (F, F) - CF ₃	(6-100)	3%
3-HGB (F, F) - F	(6-103)	3%
3-HB (F) B (F, F) - F	(6-50)	5%
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(6-97)	6%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	6%
5-BB (F) B (F, F) XB (F) B (F, F) - F	(-)	2%
3-BB (2F, 3F) XB (F, F) - F	(6-114)	4%
3-B (2F, 3F) BXB (F, F) - F	(6-115)	5%
3-HHB (F, F) XB (F, F) - F	(7-29)	4%
3-HB-CL	(5-2)	3%
3-HHB-OCF ₃	(6-1)	3%
3-HH-V	(2-1)	22%
3-HH-V1	(2-1)	10%
5-HB-O2	(2-5)	5%
3-HHEH-3	(3-13)	3%
3-HBB-2	(3-4)	7%
5-B (F) BB-3	(3-8)	3%

$N I = 71.2^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.099$; $\Delta \varepsilon = 6.1$; $V_{th} = 1.74\text{V}$; $\eta = 13.2\text{mPa}\cdot\text{s}$; $\gamma_1 = 59.3\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0235] [組成物 (M24)]

5-HXB (F, F) - F	(5-13)	6%
3-HHXB (F, F) - F	(6-100)	6%

V-HB (F) B (F, F) -F	(6-50)	5%
3-HHB (F) B (F, F) -F	(7-9)	7%
2-BB (F) B (F, F) XB (F) -F	(7-47)	3%
3-BB (F) B (F, F) XB (F) -F	(7-47)	3%
4-BB (F) B (F, F) XB (F) -F	(7-47)	4%
5-HB-CL	(5-2)	5%
2-HH-5	(2-1)	8%
3-HH-V	(2-1)	10%
3-HH-V1	(2-1)	7%
4-HH-V	(2-1)	10%
4-HH-V1	(2-1)	8%
5-HB-O2	(2-5)	7%
4-HHEH-3	(3-13)	3%
1-BB (F) B-2V	(3-6)	3%
1O1-HBBH-3	(4-1)	5%
NI = 78.5°C; T _c < -20°C; Δn = 0.095; Δε = 3.4; V _t h = 1.50V; η = 8.4 mPa·s; γ ₁ = 54.2 mPa·s.		

[0236] [組成物 (M25)]

3-HHEB (F, F) -F	(6-12)	5%
3-HHXB (F, F) -F	(6-100)	7%
5-HBEB (F, F) -F	(6-39)	5%
3-BB (F, F) XB (F, F) -F	(6-97)	10%
2-HHB (F) B (F, F) -F	(7-9)	3%
3-HB (2F, 3F) BXB (F, F) -F	(7-58)	3%
3-BB (2F, 3F) BXB (F, F) -F	(7-59)	2%
5-HHB (F, F) XB (F, F) -F	(7-29)	6%
2-HH-3	(2-1)	8%
3-HH-V	(2-1)	20%

3-HH-V 1	(2-1)	7%
4-HH-V	(2-1)	6%
5-HB-O 2	(2-5)	5%
V 2-B 2 BB-1	(3)	3%
3-HHEBH-3	(4-6)	5%
3-HHEBH-5	(4-6)	5%
N I = 90. 3℃ ; T c < -20℃ ; Δ n = 0. 089 ; Δ ε = 5. 5 ; V		
t h = 1. 65 V ; η = 13. 6 mPa · s ; γ 1 = 60. 1 mPa · s .		

[0237] [組成物 (M 2 6)]

3-BB (F, F) XB (F, F) -F	(6-97)	12%
3-HHBB (F, F) -F	(7-6)	5%
4-HHBB (F, F) -F	(7-6)	4%
3-HBBXB (F, F) -F	(7-32)	3%
3-BB (F) B (F, F) XB (F) -F	(7-46)	3%
3-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-47)	3%
4-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-47)	5%
5-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-47)	4%
2-HH-3	(2-1)	6%
3-HH-5	(2-1)	6%
3-HH-V	(2-1)	25%
3-HH-VFF	(2-1)	6%
5-HB-O 2	(2-5)	7%
V-HHB-1	(3-1)	6%
V-HBB-2	(3-4)	5%
N I = 78. 3℃ ; T c < -20℃ ; Δ n = 0. 107 ; Δ ε = 7. 0 ; V		
t h = 1. 55 V ; η = 11. 6 mPa · s ; γ 1 = 55. 6 mPa · s .		

[0238] [組成物 (M 2 7)]

3-HHXB (F, F) -F	(6-100)	3%
------------------	---------	----

3-BBXB (F, F) - F	(6-91)	3%
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(6-97)	8%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	5%
4-HHBB (F, F) - F	(7-6)	4%
3-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-47)	3%
4-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-47)	6%
5-BB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-47)	5%
3-HH-V	(2-1)	30%
3-HH-V1	(2-1)	5%
3-HHB-O1	(3-1)	2%
V-HHB-1	(3-1)	5%
2-BB (F) B-3	(3-6)	6%
F3-HH-V	(2-1)	15%
NI = 80.4°C; Tc < -20°C; Δn = 0.106; Δε = 5.8; Vt h = 1.40V; η = 11.6 mPa · s; γ1 = 61.0 mPa · s.		

[0239] [組成物 (M28)]

3-HGB (F, F) - F	(6-103)	3%
5-GHB (F, F) - F	(6-109)	4%
3-GB (F, F) XB (F, F) - F	(6-113)	5%
3-BB (F) B (F, F) - CF3	(6-69)	2%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	4%
3-GBB (F) B (F, F) - F	(7-55)	2%
2-dhBB (F, F) XB (F, F) - F	(7-50)	4%
3-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-57)	3%
3-HGB (F, F) XB (F, F) - F	(—)	5%
7-HB (F, F) - F	(5-4)	3%
2-HH-3	(2-1)	14%
2-HH-5	(2-1)	4%

3-HH-V	(2-1)	26%
1V2-HH-3	(2-1)	5%
1V2-BB-1	(2-8)	3%
2-BB(F)B-3	(3-6)	3%
3-HB(F)HH-2	(4-7)	4%
5-HBB(F)B-2	(4-5)	6%
NI=78.4°C; T _c <-20°C; Δn=0.094; Δε=5.6; V		
th=1.45V; η=11.5mPa·s; γ ₁ =61.7mPa·s.		

[0240] [組成物 (M29)]

3-HBB(F, F)-F	(6-24)	5%
5-HBB(F, F)-F	(6-24)	4%
3-BB(F)B(F, F)-F	(6-69)	3%
3-BB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(7-47)	3%
4-BB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(7-47)	5%
3-BB(F, F)XB(F)B(F, F)-F	(7-60)	3%
5-BB(F)B(F, F)XB(F)B(F, F)-F	(-)	4%
3-HH2BB(F, F)-F	(7-15)	3%
4-HH2BB(F, F)-F	(7-15)	3%
2-HH-5	(2-1)	8%
3-HH-V	(2-1)	25%
3-HH-V1	(2-1)	7%
4-HH-V1	(2-1)	6%
5-HB-O2	(2-5)	5%
7-HB-1	(2-5)	5%
VFF-HHB-O1	(3-1)	8%
VFF-HHB-1	(3-1)	3%
NI=80.0°C; T _c <-20°C; Δn=0.101; Δε=4.6; V		

$t_h = 1.71 \text{ V}$; $\eta = 11.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\gamma_1 = 47.2 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

[0241] [組成物 (M30)]

3-HHB (F, F) - F	(6-3)	8%
3-GB (F) B (F) - F	(6-116)	2%
3-GB (F) B (F, F) - F	(6-117)	3%
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	(6-97)	8%
3-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-57)	6%
5-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-57)	5%
3-HH-V	(2-1)	30%
3-HH-V1	(2-1)	10%
1V2-HH-3	(2-1)	8%
3-HH-VFF	(2-1)	8%
V2-BB-1	(2-8)	2%
5-HB (F) BH-3	(4-2)	5%
5-HBBH-3	(4-1)	5%
$N_I = 78.6^\circ\text{C}$; $T_c < -20^\circ\text{C}$; $\Delta n = 0.088$; $\Delta \varepsilon = 5.6$; V		
$t_h = 1.85 \text{ V}$; $\eta = 13.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\gamma_1 = 66.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.		

[0242] [組成物 (M31)]

3-HHEB (F, F) - F	(6-12)	4%
5-HHEB (F, F) - F	(6-12)	3%
3-HBEB (F, F) - F	(6-39)	3%
5-HBEB (F, F) - F	(6-39)	3%
3-BB (F) B (F, F) - F	(6-69)	3%
3-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-57)	5%
4-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-57)	5%
5-HB-CL	(2-5)	5%
3-HHB-OCF3	(3-1)	4%
3-HHB (F, F) XB (F, F) - F	(7-29)	5%

5-HHB (F, F) XB (F, F) -F	(7-29)	3%
3-HGB (F, F) XB (F, F) -F	(-)	5%
2-HH-5	(2-1)	3%
3-HH-5	(2-1)	5%
3-HH-V	(2-1)	24%
4-HH-V	(2-1)	5%
1V2-HH-3	(2-1)	5%
3-HHEH-3	(3-13)	5%
5-B (F) BB-2	(3-8)	3%
5-B (F) BB-3	(3-8)	2%
Nl = 82.9°C; Tc < -20°C; Δn = 0.093; Δε = 6.9; Vt h = 1.50V; η = 16.3 mPa · s; γ1 = 65.2 mPa · s.		

[0243] [組成物 (M32)]

3-HHXB (F, F) -F	(6-100)	9%
3-HBB (F, F) -F	(6-24)	3%
3-BB (F) B (F, F) -F	(6-69)	4%
3-BB (F) B (F, F) -CF3	(6-69)	4%
3-BB (F, F) XB (F, F) -F	(6-97)	5%
3-GBB (F) B (F, F) -F	(7-55)	3%
4-GBB (F) B (F, F) -F	(7-55)	4%
3-HH-V	(2-1)	25%
3-HH-V1	(2-1)	10%
5-HB-O2	(2-5)	10%
7-HB-1	(2-5)	5%
V2-BB-1	(2-8)	3%
3-HHB-1	(3-1)	4%
1V-HBB-2	(3-4)	5%
5-HBB (F) B-2	(4-5)	6%

$N I = 79.6^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.111$; $\Delta \varepsilon = 4.7$; $V_{th} = 1.86\text{V}$; $\eta = 9.7\text{mPa}\cdot\text{s}$; $\gamma_1 = 49.9\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0244] [組成物 (M33)]

3-BB (F, F) XB (F, F) -F	(6-97)	14%
5-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-47)	7%
7-HB (F, F) -F	(5-4)	6%
2-HH-5	(2-1)	5%
3-HH-V	(2-1)	30%
3-HH-V1	(2-1)	3%
3-HH-VFF	(2-1)	10%
3-HHB-1	(3-1)	4%
3-HHB-3	(3-1)	5%
3-HHB-O1	(3-1)	3%
1-BB (F) B-2V	(3-6)	3%
3-HHEBH-3	(4-6)	3%
3-HHEBH-4	(4-6)	4%
3-HHEBH-5	(4-6)	3%

$N I = 83.0^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.086$; $\Delta \varepsilon = 3.8$; $V_{th} = 1.94\text{V}$; $\eta = 7.5\text{mPa}\cdot\text{s}$; $\gamma_1 = 51.5\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0245] [組成物 (M34)]

3-HBB (F, F) -F	(6-24)	5%
5-HBB (F, F) -F	(6-24)	4%
3-BB (F) B (F, F) -F	(6-69)	3%
3-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-47)	3%
4-BB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-47)	5%
3-BB (F, F) XB (F) B (F, F) -F	(7-60)	3%
5-BB (F) B (F, F) XB (F) B (F, F) -F	(-)	4%

3-HH2BB (F, F) - F	(7-15)	3%
4-HH2BB (F, F) - F	(7-15)	3%
2-HH-5	(2-1)	8%
3-HH-V	(2-1)	28%
4-HH-V1	(2-1)	7%
5-HB-O2	(2-5)	2%
7-HB-1	(2-5)	5%
VFF-HHB-O1	(3-1)	8%
VFF-HHB-1	(3-1)	3%
2-BB (2F, 3F) B-3	(11-1)	4%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(10-7)	2%
Nl = 81.9°C; Tc < -20°C; Δn = 0.109; Δε = 4.8; Vt h = 1.75V; η = 13.3 mPa · s; γ1 = 57.4 mPa · s.		

[0246] [組成物 (M35)]

3-HHEB (F, F) - F	(6-12)	4%
3-HBEB (F, F) - F	(6-39)	3%
5-HBEB (F, F) - F	(6-39)	3%
3-BB (F) B (F, F) - F	(6-69)	3%
3-HBBXB (F, F) - F	(7-32)	6%
4-GBB (F, F) XB (F, F) - F	(7-62)	2%
5-GBB (F, F) XB (F, F) - F	(7-62)	2%
3-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-57)	5%
4-GB (F) B (F, F) XB (F, F) - F	(7-57)	5%
5-HHB (F, F) XB (F, F) - F	(7-29)	3%
5-HEB (F, F) - F	(5-10)	3%
5-HB-CL	(5-2)	2%
3-HHB-OCF3	(6-1)	4%
3-HH-5	(2-1)	4%

3-HH-V	(2-1)	21%
3-HH-V1	(2-1)	3%
4-HH-V	(2-1)	4%
1V2-HH-3	(2-1)	6%
5-B(F)BB-2	(3-8)	3%
5-B(F)BB-3	(3-8)	2%
3-HB(2F, 3F)-O2	(9-1)	3%
3-BB(2F, 3F)-O2	(9-3)	2%
3-HHB(2F, 3F)-O2	(10-1)	4%
F3-HH-V	(2-1)	3%

$Nl = 78.2^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.101$; $\Delta \varepsilon = 6.7$; $V_{th} = 1.45\text{V}$; $\eta = 17.8\text{mPa}\cdot\text{s}$; $\gamma_1 = 67.8\text{mPa}\cdot\text{s}$.

[0247] [組成物 (M36)]

3-HHB(F, F)-F	(6-3)	10%
3-HHXB(F, F)-F	(6-100)	2%
3-GHB(F, F)-F	(6-109)	5%
3-BB(F)B(F, F)-F	(6-69)	6%
3-BB(F, F)XB(F, F)-F	(6-97)	14%
4-BB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(7-47)	10%
5-BB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(7-47)	6%
2-HH-3	(2-1)	5%
3-HH-4	(2-1)	11%
3-HH-O1	(2-1)	5%
5-HB-O2	(2-5)	8%
3-HHB-1	(3-1)	6%
3-HHB-3	(3-1)	6%
3-HHB-O1	(3-1)	6%

$Nl = 77.6^{\circ}\text{C}$; $T_c < -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.109$; $\Delta \varepsilon = 10.6$;

$V_{th} = 1.34 \text{ V} ; \eta = 22.6 \text{ mPa} \cdot \text{s} ; \gamma_1 = 92.4 \text{ mPa} \cdot \text{s}.$

[0248] [組成物 (M37)]

3-HBB-F	(6-22)	3%
3-BB(F, F)XB(F)-OCF ₃	(6-96)	3%
3-HHB(F)-F	(6-2)	3%
3-HGB(F, F)-F	(6-103)	3%
5-GHB(F, F)-F	(6-109)	3%
3-HBB(F, F)-F	(6-24)	4%
3-BB(F, F)XB(F, F)-F	(6-97)	5%
3-HHBB(F, F)-F	(7-6)	5%
3-HBBXB(F, F)-F	(7-32)	5%
3-BBVFFXB(F, F)-F	(6-119)	8%
3-HH-V	(2-1)	39%
1-HH-V1	(2-1)	3%
1-HH-2V1	(2-1)	4%
3-HHEH-5	(3-13)	3%
1-BB(F)B-2V	(3-6)	3%
3-HHEBH-3	(4-6)	3%
5-HBB(F)B-2	(4-5)	3%

$Nl = 85.2^\circ\text{C} ; T_c < -20^\circ\text{C} ; \Delta n = 0.102 ; \Delta \varepsilon = 4.1 ; \gamma_1 = 43.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}.$

[0249] [組成物 (M38)]

3-HHBB(F)-F	(7-5)	3%
2-HHEB(F, F)-F	(6-12)	3%
5-BB(F)B(F, F)-F	(6-69)	7%
3-HHB(F)B(F, F)-F	(7-9)	3%
3-GB(F)B(F, F)XB(F, F)-F	(7-57)	3%
3-BB(F, F)XB(F)B(F, F)-F	(7-60)	3%

3-HHVF F X B (F, F) - F	(6-120)	5%
3-BBV F F X B (F, F) - F	(6-119)	5%
3-HBBV F F X B (F, F) - F	(7-63)	3%
2-HH-5	(2-1)	5%
3-HH-V	(2-1)	20%
5-HH-V	(2-1)	12%
3-HH-V1	(2-1)	4%
4-HH-V1	(2-1)	5%
2-HH-2V1	(2-1)	3%
1-BB-3	(2-8)	3%
V2-BB (F) B-1	(3-6)	5%
V2-B (F) BB-1	(3-8)	5%
3-HB (F) HH-5	(4-7)	3%
N I = 85. 8°C ; T c < -20°C ; Δ n = 0. 115 ; Δ ε = 4. 2 ; γ		
1 = 41. 4 m P a · s .		

[0250] [組成物 (M39)]

3-BB (F) X B (F) B (F, F) - F	(7-60)	5%
3-HGB (F, F) - F	(6-103)	3%
5-GHB (F, F) - F	(6-109)	4%
3-GB (F, F) X B (F, F) - F	(6-113)	5%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	4%
2-d h BB (F, F) X B (F, F) - F	(7-50)	4%
3-GB (F) B (F, F) X B (F, F) - F	(7-57)	3%
3-HGB (F, F) X B (F, F) - F	(7)	5%
7-HB (F, F) - F	(5-4)	3%
2-HH-3	(2-1)	14%
2-HH-5	(2-1)	4%
3-HH-V	(2-1)	26%

1 V 2 - H H - 3	(2 - 1)	5 %
1 V 2 - B B - 1	(2 - 8)	3 %
2 - B B (F) B - 3	(3 - 6)	3 %
3 - H B (F) H H - 2	(4 - 7)	4 %
5 - H B B (F) B - 2	(4 - 5)	5 %
N I = 78. 4 °C ; T c < - 20 °C ; Δ n = 0. 094 ; Δ ε = 5. 6 ; V		
t h = 1. 45 V ; η = 11. 5 m P a · s ; γ 1 = 61. 7 m P a · s .		

[0251] [組成物 (M40)]

3 - H B B (F , F) - F	(6 - 24)	5 %
5 - H B B (F , F) - F	(6 - 24)	4 %
3 - B B (F) B (F , F) X B (F , F) - F	(7 - 47)	3 %
4 - B B (F) B (F , F) X B (F , F) - F	(7 - 47)	5 %
3 - B B (F , F) X B (F) B (F , F) - F	(7 - 60)	10 %
3 - H H 2 B B (F , F) - F	(7 - 15)	3 %
4 - H H 2 B B (F , F) - F	(7 - 15)	3 %
2 - H H - 5	(2 - 1)	4 %
3 - H H - V	(2 - 1)	25 %
3 - H H - V 1	(2 - 1)	10 %
4 - H H - V 1	(2 - 1)	7 %
5 - H B - O 2	(2 - 5)	5 %
7 - H B - 1	(2 - 5)	5 %
V F F - H H B - O 1	(3 - 1)	8 %
V F F - H H B - 1	(3 - 1)	3 %

N I = 79. 3 °C ; T c < - 20 °C ; Δ n = 0. 099 ; Δ ε = 5. 0 ; V
t h = 1. 64 V ; η = 10. 4 m P a · s ; γ 1 = 44. 7 m P a · s .

[0252] [組成物 (M41)]

3 - G B X B (F) B (F , F) - F	(7)	5 %
3 - H H B (F , F) - F	(6 - 3)	7 %

3-GB (F) B (F) -F	(6-116)	2%
3-GB (F) B (F, F) -F	(6-117)	3%
3-BB (F, F) XB (F, F) -F	(6-97)	7%
3-GB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-57)	4%
5-GB (F) B (F, F) XB (F, F) -F	(7-57)	5%
3-HH-V	(2-1)	30%
3-HH-V1	(2-1)	10%
1V2-HH-3	(2-1)	8%
3-HH-VFF	(2-1)	8%
V2-BB-1	(2-8)	2%
5-HB (F) BH-3	(4-2)	4%
5-HBBH-3	(4-1)	5%
NI = 79.7°C; T _c < -20°C; Δn = 0.091; Δε = 5.7; V _{th} = 1.83V; η = 14.9 mPa·s; γ ₁ = 69.3 mPa·s.		

[0253] 2. 液晶分子の配向

使用例1～使用例7

(試料の調製)

組成物(M1)に第1添加物として化合物(N_o. 148)を0.1重量%、0.3重量%、0.5重量%、1.0重量%、3.0重量%、5.0重量%、10.0重量%の割合で、酸化防止剤として、R⁴⁰がn-ヘプチルである化合物(AO-1)を150ppmの割合で添加した。100°Cで加熱攪拌し、その後室温に戻し一週間放置したところ、結晶等の析出は無く完全に溶解していた。

(素子の作製)

この混合物を、配向膜を有しないIPS素子に90°C(ネマチック相の上限温度以上)で注入した。IPS素子を90°Cで加熱しながら、波長313nm、波長335nmおよび波長365nmにピークを有する偏光紫外線を素子に対して法線方向から一定の時間照射することにより配向処理を行い、

配向が良好になるまで、照射を続けた。

(偏光紫外線の照射条件)

・波長 313 nm における照度は $3 \text{ mW} / \text{cm}^2$ 。ウシオ電機社製 U I T - 150 および U V D - S 3 1 3 を用いて測定した。

・紫外線の照射ランプは、ウシオ電機株式会社製の U S H - 2 5 0 B Y を用いた。

・露光機ユニットはウシオ電機株式会社製 M L - 2 5 1 A / B を用いた。

・偏光紫外線は、ワイヤーグリッド偏光子（（株）ポラテクノ製の P r o F l u x U V T 2 6 0 A）を用いて形成した。

(配向の確認方法)

直線偏光の偏光軸に対して、素子が平行になるようにして、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、この素子に下から光を照射し、光漏れの有無を観察した。光が素子を通過しない場合は、配向が「良好」と判断した。素子を通過した光が観察された場合は、配向が「不良」で、照射不十分と判断した。

(配向のしやすさの評価)

照射時間を 1 分から 60 分まで変化させて、それぞれの照射時間での配向を確認した。それぞれ、配向が良好になった時点で、照射をやめた。配向が良好になるまでの照射時間を下記表 3 にまとめた。

[0254] 使用例 8～使用例 42

組成物 (M1) を用い、酸化防止剤として、 R^{40} が n-ヘプチルである化合物 (AO-1) を 150 ppm の割合で添加し、第 1 添加物を下記表 3 に示す割合で混合した。その他は使用例 1 と同様に操作した。使用例 1 と同様な方法で照射時間を測定した。結果を下記表 3 にまとめた。

[0255] 表 3

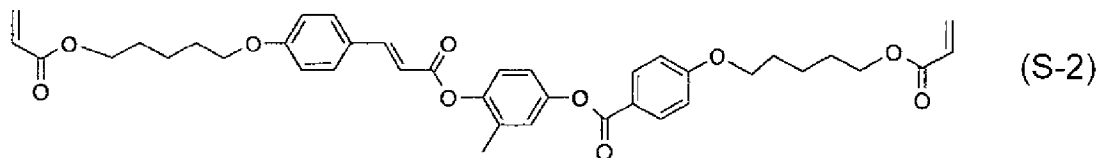
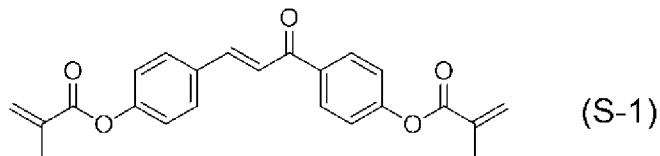
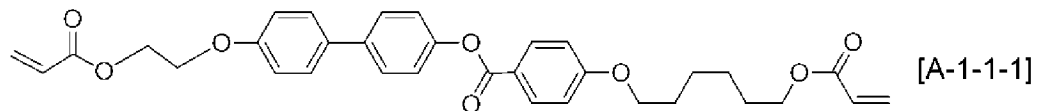
使用例	組成物	第1添加物	添加濃度 (wt%)	照射時間(分)
1	M1	No. 148	0.1	1.5
2	M1	No. 148	0.3	1.5
3	M1	No. 148	0.5	1.5
4	M1	No. 148	1	1.5
5	M1	No. 148	3	1.5
6	M1	No. 148	5	1.5
7	M1	No. 148	10	1.5
8	M1	No. 81	0.1	5
9	M1	No. 81	0.3	5
10	M1	No. 81	0.5	5
11	M1	No. 81	1	5
12	M1	No. 81	3	5
13	M1	No. 81	5	5
14	M1	No. 81	10	5
15	M1	No. 165	0.1	1.5
16	M1	No. 165	0.3	1.5
17	M1	No. 165	0.5	1.5
18	M1	No. 165	1	1.5
19	M1	No. 165	3	1.5
20	M1	No. 165	5	1.5
21	M1	No. 165	10	1.5
22	M1	No. 16	0.1	10
23	M1	No. 16	0.3	10
24	M1	No. 16	0.5	10
25	M1	No. 16	1	10
26	M1	No. 16	3	10
27	M1	No. 16	5	10
28	M1	No. 16	10	10
29	M1	No. 249	0.1	1
30	M1	No. 249	0.3	1
31	M1	No. 249	0.5	1
32	M1	No. 249	1	1
33	M1	No. 249	3	1
34	M1	No. 249	5	1
35	M1	No. 249	10	1
36	M1	No. 158	0.1	1.5
37	M1	No. 158	0.3	1.5
38	M1	No. 158	0.5	1.5
39	M1	No. 158	1	1.5
40	M1	No. 158	3	1.5
41	M1	No. 158	5	1.5
42	M1	No. 158	10	1.5

[0256] 使用例 1 ～ 4 2 において、用いる組成物を M 2 ～ M 4 1 に変更してそれぞれ同様の操作をしたところ、いずれにおいても、照射時間の大きな変化はなかった。

[0257] 組成物 (M 1) から組成物 (M 4 1) までの組成物、化合物 (N o. 1) から化合物 (N o. 2 2 4) までの第一添加物の中から適宜選択し、同様の操作を行ったところ、いずれにおいても、照射時間は 1 5 分以内であった。

[0258] 比較例 1 ～ 2 1

化合物 (A-1-1-1)、特許文献 3 に記載の化合物 (S-1) および特許文献 2 に記載の化合物 (S-2) を第一添加物として、下記表 4 に示す割合で組成物 (M 1) に混合し、使用例と同様の操作により、照射時間を評価した。その結果、本発明の実施形態にかかる化合物と比較し、いずれの化合物においても、使用例における最長の照射時間である 1 0 分では、良好な配向は得られず、良好な配向が確認される照射時間は 3 0 分以上であった。また、組成物 (M 2) から (M 4 1) を用いて同様の評価を行ったところ、いずれも組成物 (M 1) を用いた場合と同様な傾向であった。



[0259] 表 4

比較例	組成物	第1添加物	添加濃度 (wt%)	照射時間(分)
1	M1	A-1-1-1	0.1	60
2	M1	A-1-1-1	0.3	60
3	M1	A-1-1-1	0.5	60
4	M1	A-1-1-1	1	60
5	M1	A-1-1-1	3	60
6	M1	A-1-1-1	5	60
7	M1	A-1-1-1	10	60
8	M1	S-1	0.1	60
9	M1	S-1	0.3	60
10	M1	S-1	0.5	60
11	M1	S-1	1	60
12	M1	S-1	3	60
13	M1	S-1	5	60
14	M1	S-1	10	60
15	M1	S-2	0.1	30
16	M1	S-2	0.3	30
17	M1	S-2	0.5	30
18	M1	S-2	1	30
19	M1	S-2	3	30
20	M1	S-2	5	30
21	M1	S-2	10	30

[0260] 使用例において、組成物や極性化合物である化合物（１）の種類、量、を変えたが、溶け残りや析出はなく、１５分以内の照射で素子の光漏れは観察されなかった。この結果は、素子にポリイミドのような配向膜がなくても配向は良好であり、総ての液晶分子が一定方向に配列していることを示している。一方、比較例においては、３０分以内での照射では素子の光漏れが観察され、配向が良好ではなかった。したがって、本発明の実施形態にかかる化合物（１）を用いれば、短い時間または低エネルギーでの光照射での使用が可能であり、それによりタクトタイムの短縮および母液晶の光照射によるダメージを低減することができる。また本発明の実施形態にかかる液晶組成物を用いれば、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命の少なくとも一つの特性を有する液晶表示素子が得られる。さらに、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、負に

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のような特性において、少なくとも1つを充足する液晶組成物を有する液晶表示素子が得られる。

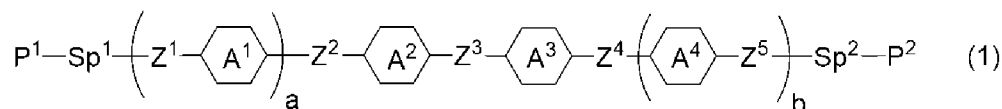
産業上の利用可能性

[0261] 本発明の実施形態にかかる液晶組成物は、液晶モニター、液晶テレビなどに用いることができる。

請求の範囲

[請求項1]

式(1)で表される化合物。

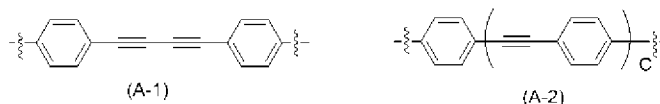


式(1)において、

aおよびbは独立して、0、1または2であり、 $0 \leq a + b \leq 3$ であり、

環A¹、環A²、環A³および環A⁴は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-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、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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、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11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、-Sp¹-P¹、または-Sp²-P²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、aが2のとき、2つの環A¹は異なってもよく、bが2のとき、2つの環A⁴は異なってもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイ

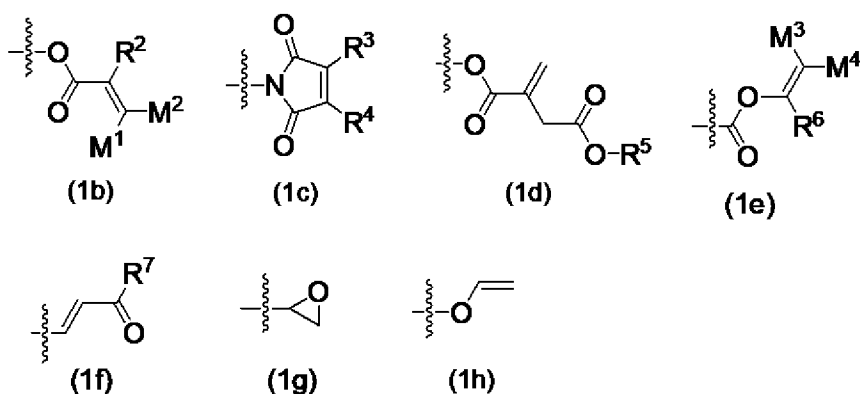
ル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよい。但し、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、 a が2のとき、2つの Z^1 は異なってもよく、 b が2のとき、2つの Z^5 は異なってもよく；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよく、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；



式(1b)～式(1h)において、

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

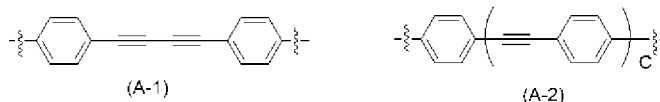
[請求項2]

式(1)において、

a および b は独立して、0、1または2であり、 $0 \leq a + b \leq 2$ であり；

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサソ-2,5-ジイ

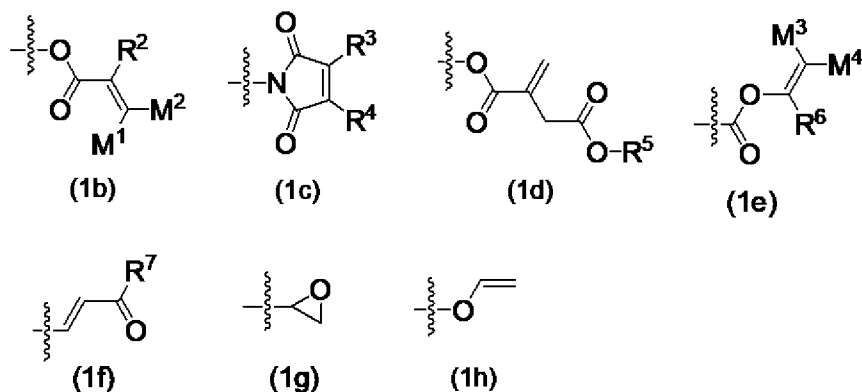
ル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、フルオレン-2, 7-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、アントラセン-2, 6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、(A-1) で表される基または (A-2) で表される基であり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-Sp^1-P^1$ 、または $-Sp^2-P^2$ 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、aが2のとき、2つの環A¹は異なってもよく、bが2のとき、2つの環A⁴は異なってもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴の中で少なくとも1つはナフタレン-2, 6-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、(A-1) で表される基または (A-2) で表される基であり；



Z¹、Z²、Z³、Z⁴およびZ⁵は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ または $-COCH=CH-$ であり、但し、Z²、Z³、またはZ⁴の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、aが2のとき、2つのZ¹は異なってもよく、2つのZ⁵は異なってもよく；

S p¹およびS p²は独立して、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—、—COO—、または—OCO—で置き換えられてもよく、少なくとも1つの—(CH₂)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く、構造内に複数のS p¹またはS p²が存在する場合はそれぞれが異なってもよく；

P¹およびP²は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数のP¹またはP²が存在する場合、それぞれが異なってもよく；



式(1b)～式(1h)において、

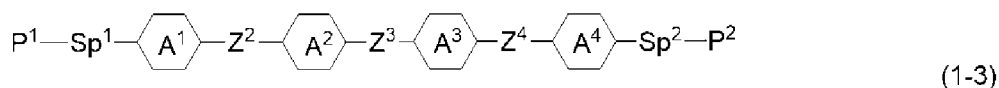
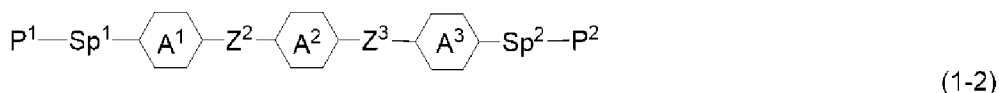
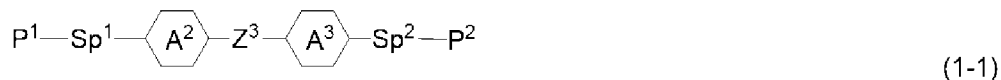
M¹、M²、M³およびM⁴は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R²は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの—CH₂—は、—O—で置き換えられてもよく；

R³、R⁴、R⁵、R⁶、およびR⁷は独立して、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—(CH₂)₂—は、—CH=CH—または—C≡C—

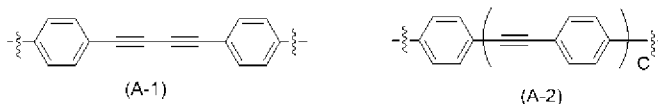
で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい、請求項1に記載の化合物。

[請求項3] 式(1-1)から式(1-3)のいずれか1つで表される、請求項1または2に記載の化合物。



式(1-1)から式(1-3)において、

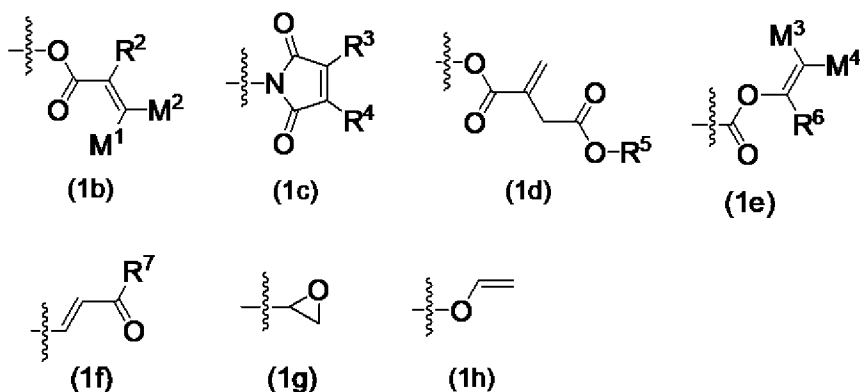
環A¹、環A²、環A³および環A⁴は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、ピリミジン-2,5-ジイル、ピリジン-2,5-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、アントラセン-2,6-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、-Sp¹-P¹、または-Sp²-P²で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、aが2のとき、2つの環A¹は異なってもよく、bが2のとき、2つの環A⁴は異なってもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環A¹、環A²、環A³または環A⁴の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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く、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく、；



式(1b)～式(1h)において、

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

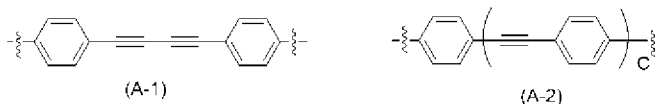
R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[請求項4]

式(1-1)、式(1-2)および式(1-3)において、

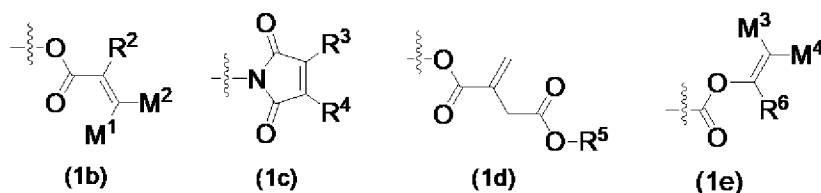
環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-Sp^1-P^1$ 、または Sp^2-P^2 で置き換えられてもよく、(A-2)において、 c は2、3、又は4である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)、式(1c)、式(1d)、または式(1e)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく、；



式(1b)～式(1e)において、

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R^2 は水素、ハロゲン、または炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられ

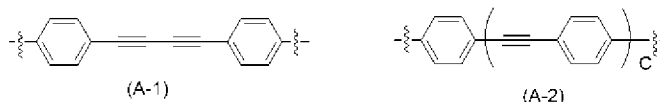
てもよく；

R^3 、 R^4 、 R^5 、および R^6 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい、請求項3に記載の化合物。

[請求項5]

式(1-1)、式(1-2)および式(1-3)において、

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、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、メチル、またはエチルで置き換えられてもよく、(A-2)において、 c は2、3、又は4である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも1つはナフタレン-2,6-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；

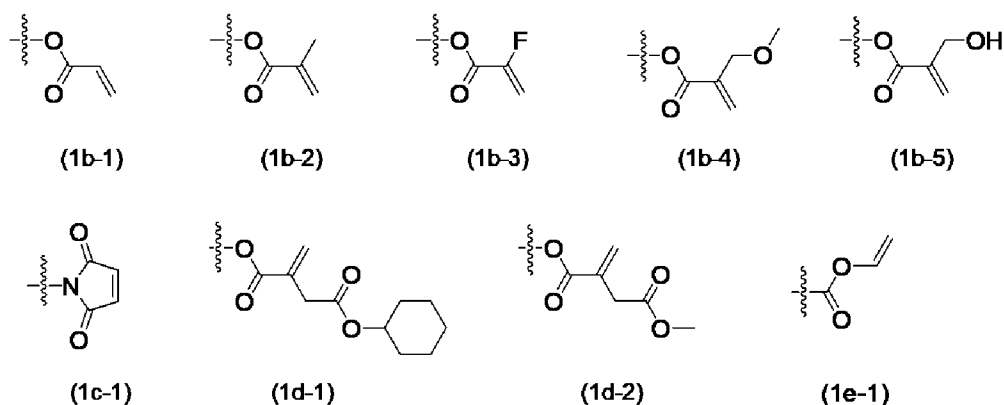


Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、単結合または炭素数1から10の

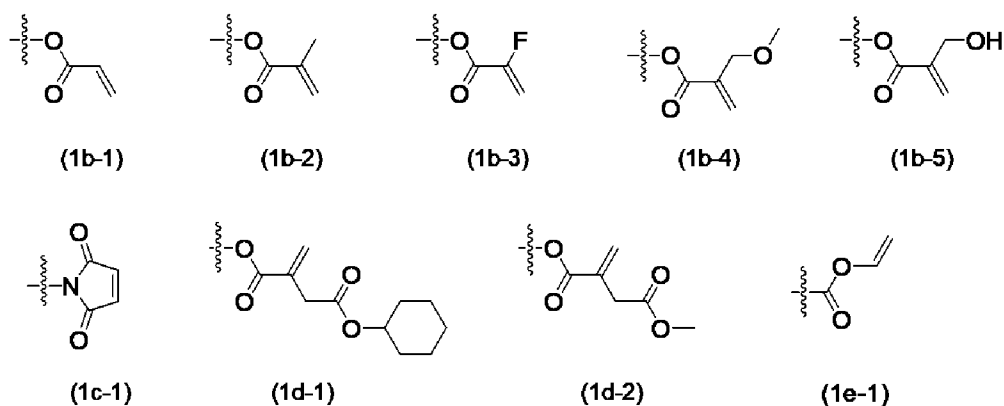
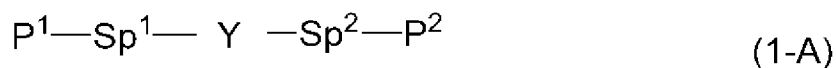
アルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なっていてもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b-1)、(1b-2)、(1b-3)、(1b-4)、式(1b-5)、(1c-1)、(1d-1)、(1d-2)または(1e-1)で表される基である請求項3に記載の化合物。



[請求項6] 式(1-1)、式(1-2)、または式(1-3)で表される化合物において、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 のいずれか1つは、 $-COO-$ または $-OCO-$ である、請求項3に記載の化合物。

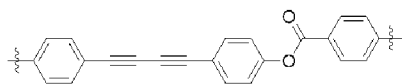
[請求項7] 式(1-A)で表される、請求項1から6のいずれか1項に記載の化合物。



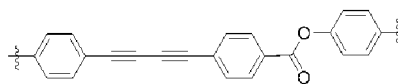
P^1 および P^2 は独立して、式(1b-1)、(1b-2)、(1b-3)、(1b-4)、式(1b-5)、(1c-1)、(1d-1)、(1d-2)または(1e-1)で表される基であり、;

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく;

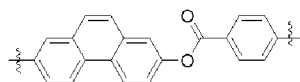
Yは(MES-1-01)から(MES-1-10)のいずれかの式で表される基であり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。



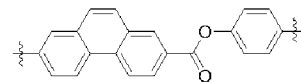
(MES-1-01)



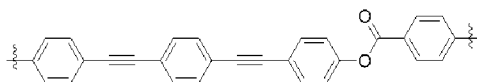
(MES-1-02)



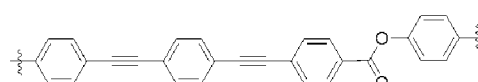
(MES-1-03)



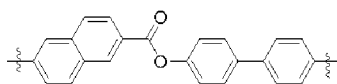
(MES-1-04)



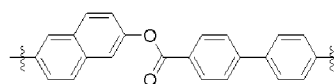
(MES-1-05)



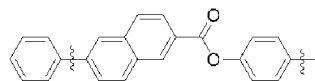
(MES-1-06)



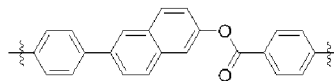
(MES-1-07)



(MES-1-08)



(MES-1-09)



(MES-1-10)

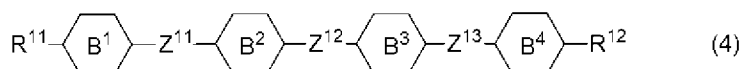
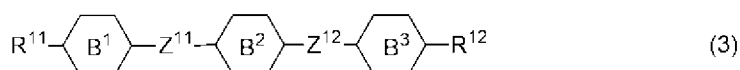
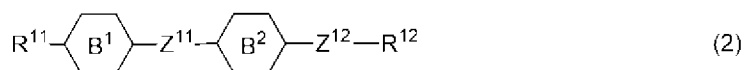
[請求項8]

式(1-A)で表される化合物において、 Sp^1 および Sp^2 が独立して、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、少なくとも1つ

の $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよい請求項 7 に記載の化合物。

[請求項 9] 請求項 1 から 8 のいずれか 1 項に記載した化合物の少なくとも 1 つを含有する液晶組成物。

[請求項 10] 式 (2) から式 (4) で表される化合物の群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有する、請求項 9 に記載の液晶組成物。



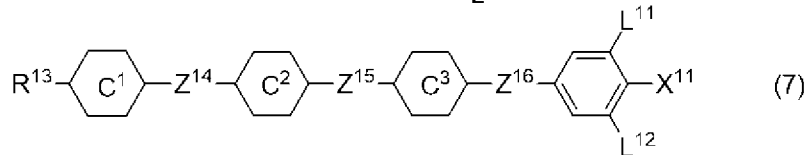
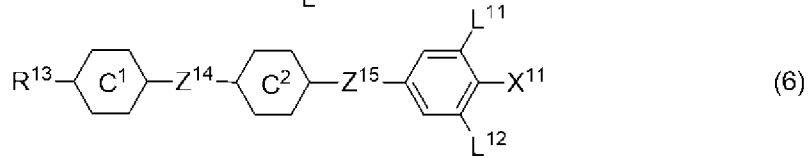
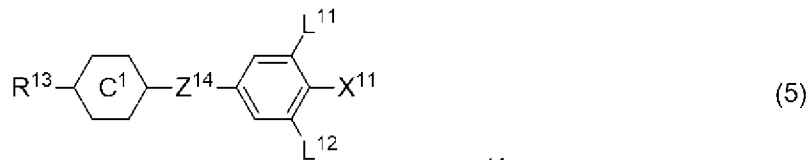
式 (2) から式 (4) において、

R^{11} および R^{12} は独立して、炭素数 1 から 10 のアルキルまたは炭素数 2 から 10 のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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 つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

環 B^1 、環 B^2 、環 B^3 、および環 B^4 は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 5-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、またはピリミジン-2, 5-ジイルであり；

Z^{11} 、 Z^{12} 、および Z^{13} は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、または $-COO-$ である。

[請求項 11] 式 (5) から式 (7) で表される化合物の群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有する、請求項 9 または 10 に記載の液晶組成物。



式（５）から式（７）において、

R^{13} は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{11} は、フッ素、塩素、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、または $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2\text{CF}_3$ であり；

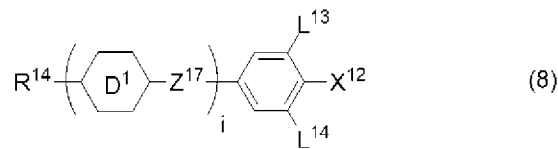
環 C^1 、環 C^2 、および環 C^3 は独立して、１，４－シクロヘキシレン、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられてもよい１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサソ－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

Z^{14} 、 Z^{15} 、および Z^{16} は独立して、単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CF}-$ または $-(\text{CH}_2)_4-$ であり；

L^{11} および L^{12} は独立して、水素またはフッ素である。

[請求項１２]

式（８）で表される化合物の少なくとも１つの化合物をさらに含有する、請求項９から１１のいずれか１項に記載の液晶組成物。



式(8)において、

R^{14} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

X^{12} は $-C \equiv N$ または $-C \equiv C - C \equiv N$ であり；

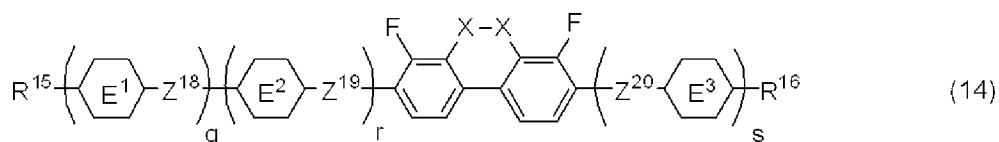
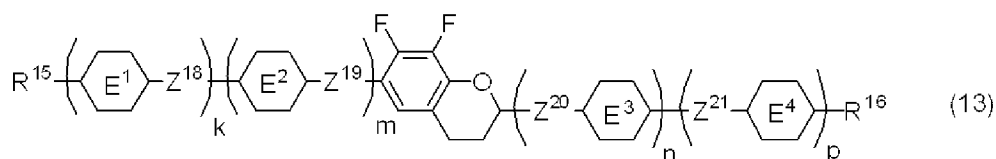
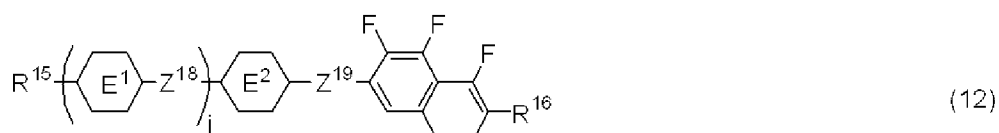
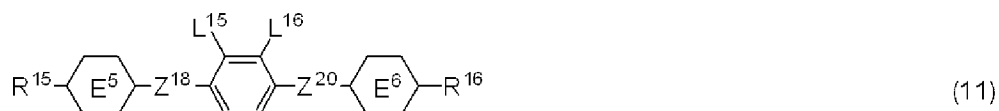
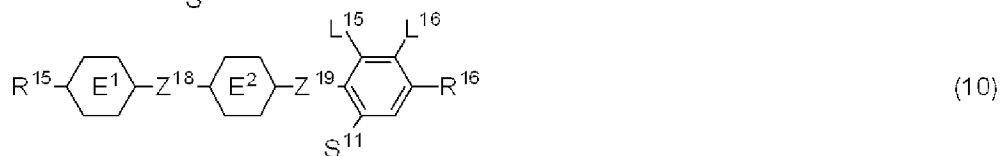
環 D^1 は、1,4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

Z^{17} は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

L^{13} および L^{14} は独立して、水素またはフッ素であり；

i は、1、2、3、または4である。

[請求項13] 式(9)から式(15)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項9から12のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(9)から式(15)において、

R^{15} および R^{16} は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

R^{17} は、水素、フッ素、炭素数1から10のアルキル、または炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

環 E^1 、環 E^2 、環 E^3 、および環 E^4 は独立して、1,4-シクロ

ヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1, 4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2, 6-ジイルであり；

環E⁵および環E⁶は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2, 6-ジイルであり；

Z¹⁸、Z¹⁹、Z²⁰、およびZ²¹は独立して、単結合、-CH₂CH₂-、-COO-、-CH₂O-、-OCF₂-、または-OCF₂CH₂CH₂-であり；

L¹⁵およびL¹⁶は独立して、フッ素または塩素であり；

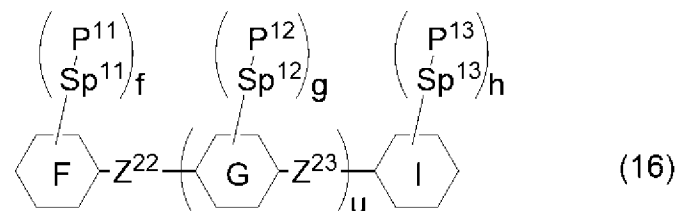
S¹¹は、水素またはメチルであり；

Xは、-CHF-または-CF₂-であり；

j、k、m、n、p、q、r、およびsは独立して、0または1であり、k、m、n、およびpの和は、1または2であり、q、r、およびsの和は、0、1、2、または3であり、tは、1、2、または3である。

[請求項14]

式(16)で表される化合物の少なくとも1つの重合性化合物を含む、請求項9から13のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(16)において、

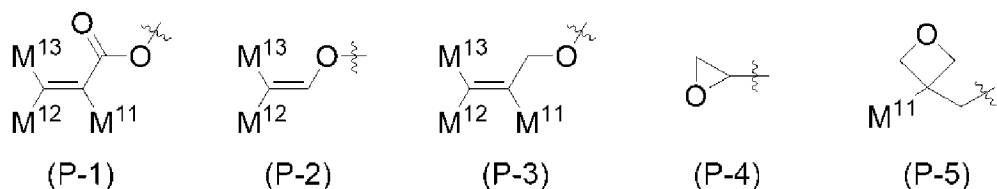
環Fおよび環Iは独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1, 3-ジオキサソ-2-イル、ピリミジソ-2-イル、また

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、ハロゲン、炭素数1から12のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲン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G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、ハロゲン、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つの水素がハロゲン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^{22} および Z^{23} は独立して、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、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^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} は独立して、式(P-1)から式(P-5)で表される基の群から選択された重合性基であり；



M^{11} 、 M^{12} 、および M^{13} は独立して、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；

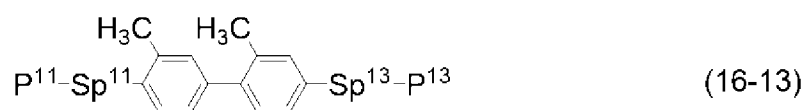
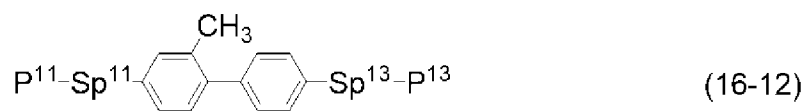
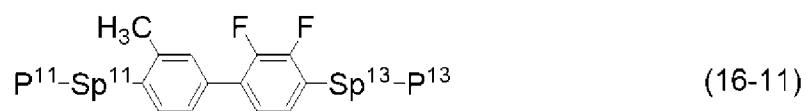
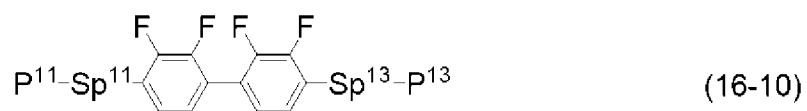
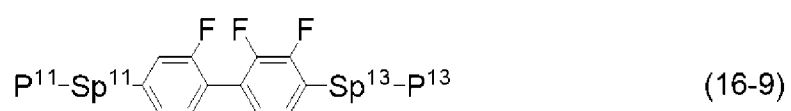
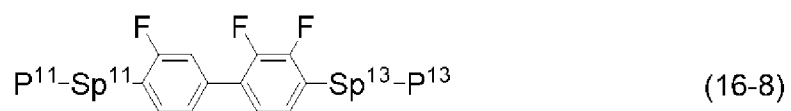
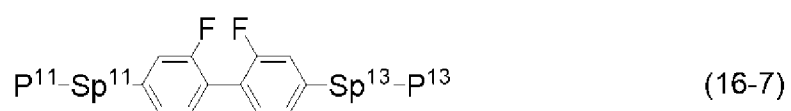
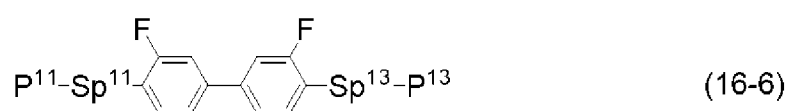
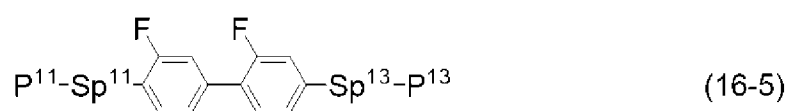
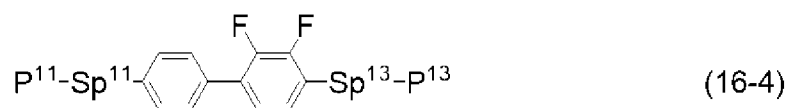
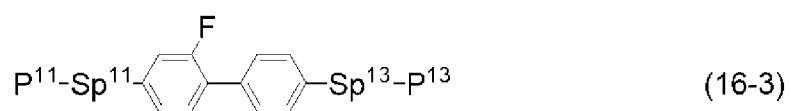
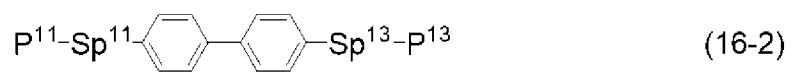
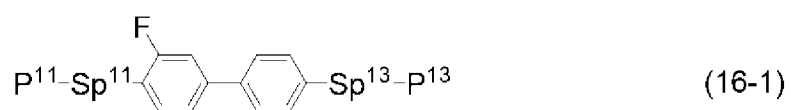
$S p^{11}$ 、 $S p^{12}$ 、および $S p^{13}$ は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

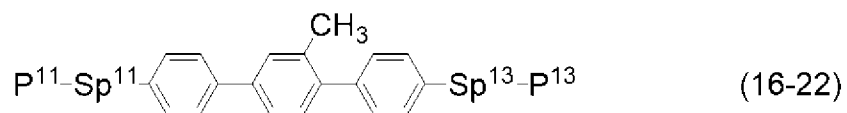
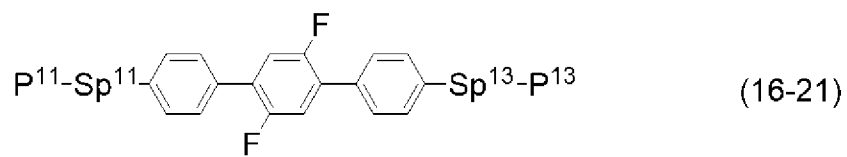
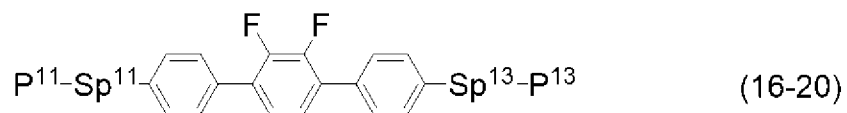
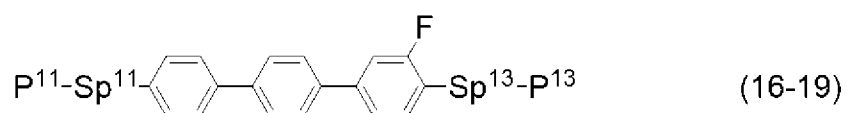
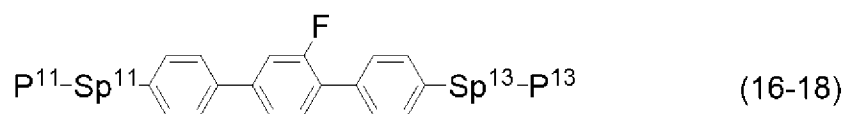
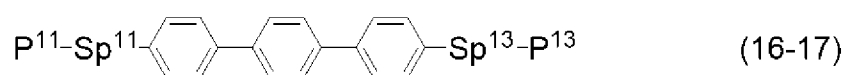
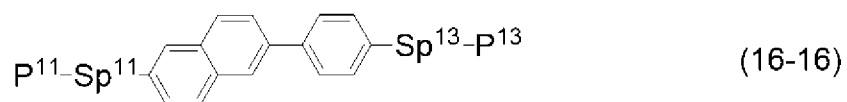
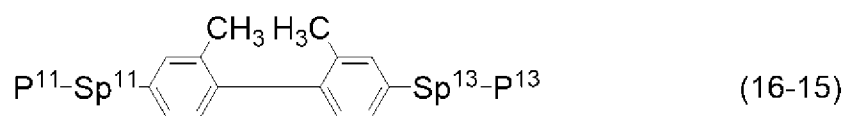
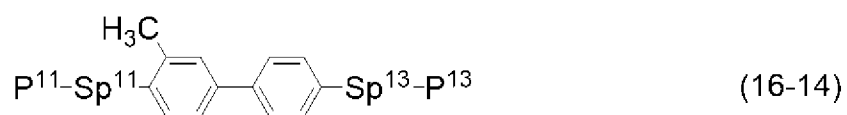
u は、0、1、または2であり；

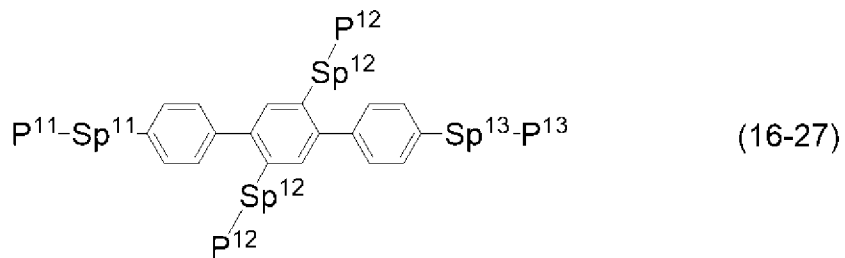
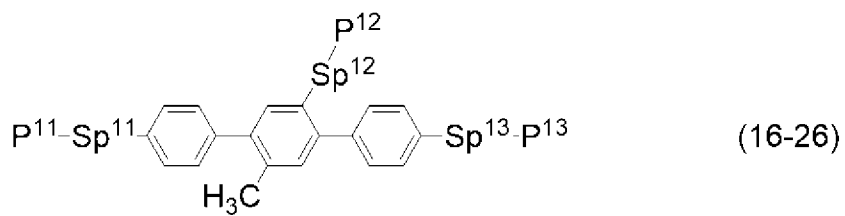
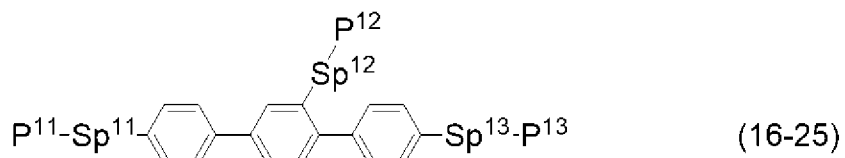
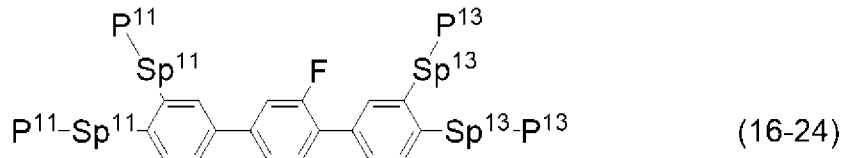
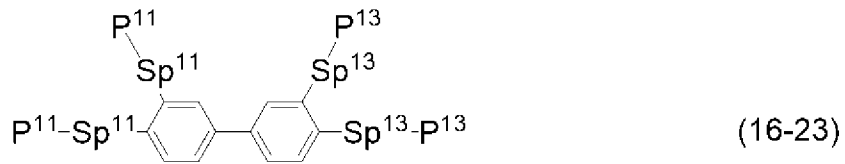
f 、 g 、および h は独立して、0、1、2、3、または4であり、そして f 、 g 、および h の和は2以上である。

[請求項15]

式(16-1)から式(16-27)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの重合性化合物を含有する、請求項9から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。

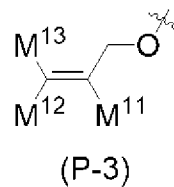
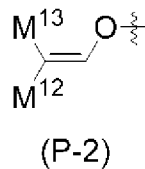
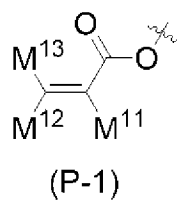






式(16-1)から式(16-27)において、

P¹¹、P¹²、およびP¹³は独立して、式(P-1)から式(P-3)で表される基の群から選択された重合性基であり、ここでM¹¹、M¹²、およびM¹³は独立して、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つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり：



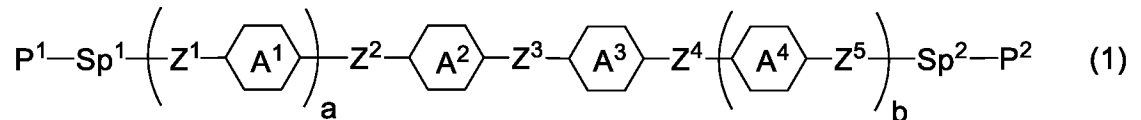
$S p^{11}$ 、 $S p^{12}$ 、および $S p^{13}$ は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[請求項16] 式(1)および式(16)以外の重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、および消泡剤の少なくとも1つをさらに含有する、請求項9から15のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項17] 請求項9から16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。

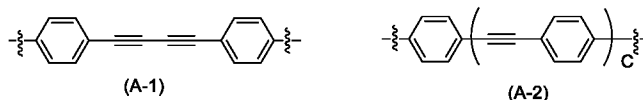
補正された請求の範囲
[2019年10月24日(24.10.2019)国際事務局受理]

[請求項1] [補正後]式(1)で表される化合物。



式(1)において、

a および b は独立して、0、1 または 2 であり、 $0 \leq a + b \leq 3$ であり、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサベン-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、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、(A-1) で表される基または (A-2) で表される基であり、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 11 のアルコキシ、炭素数 2 から 11 のアルケニルオキシ、 $-Sp^1-P^1$ 、または $-Sp^2-P^2$ 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、a が 2 のとき、2 つの環 A^1 は異なってもよく、b が 2 のとき、2 つの環 A^4 は異なってもよく、(A-2) において、c は 2、3、又は 4 である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも 1 つはフェナントレン-2, 7-ジイル、(A-1) で表される基または (A-2) で表される基であり；

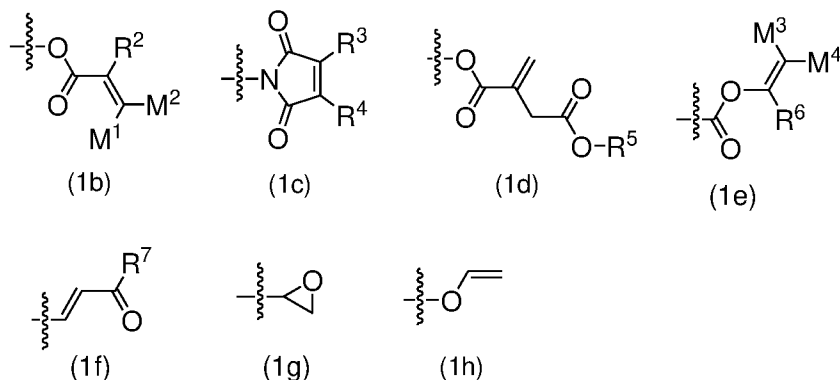


Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 は独立して、単結合または炭素数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C \equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。但し、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 の中で少なくとも 1 つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、a が 2 のとき、

2つの Z^1 は異なってもよく、 b が2のとき、2つの Z^5 は異なってもよく；

$S p^1$ および $S p^2$ は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよく、構造内に複数の $S p^1$ または $S p^2$ が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；



式(1b)～式(1h)において、

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

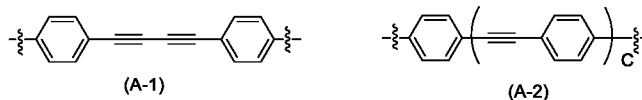
R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、水素または炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[請求項2] [補正後]式(1)において、

a および b は独立して、0、1または2であり、 $0 \leq a + b \leq 2$ であり；

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキサ-

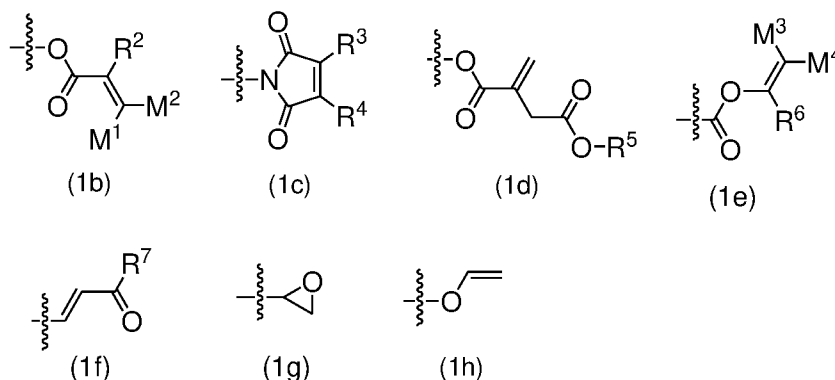
2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、フルオレン-2, 7-ジイル、フェナントレン-2, 7-ジイル、アントラセン-2, 6-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、(A-1) で表される基または (A-2) で表される基であり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-S p^1 - P^1$ 、または $-S p^2 - P^2$ 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、aが2のとき、2つの環 A^1 は異なっているとしてもよく、bが2のとき、2つの環 A^4 は異なっているとしてもよく、(A-2)において、cは2, 3, 又は4である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも1つはフェナントレン-2, 7-ジイル、(A-1) で表される基または (A-2) で表される基であり；



Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 および Z^5 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ または $-COCH=CH-$ であり、但し、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、aが2のとき、2つの Z^1 は異なっているとしてもよく、2つの Z^5 は異なっているとしてもよく；

$S p^1$ および $S p^2$ は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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く、構造内に複数の $S p^1$ または $S p^2$ が存在する場合はそれぞれが異なっているとしてもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なっているとしてもよく；



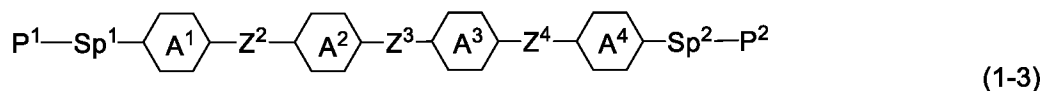
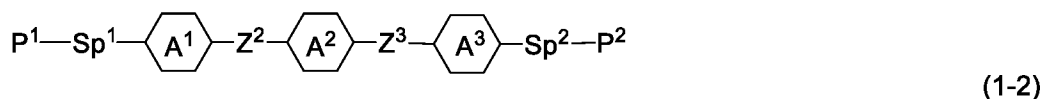
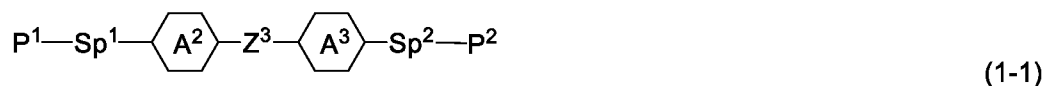
式(1b)～式(1h)において、

M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい、請求項1に記載の化合物。

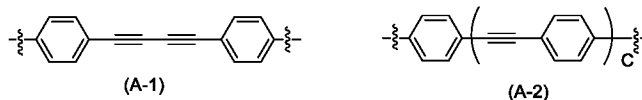
[請求項3] [修正後]式(1-1)から式(1-3)のいずれか1つで表される、請求項1または2に記載の化合物。



式(1-1)から式(1-3)において、

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、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

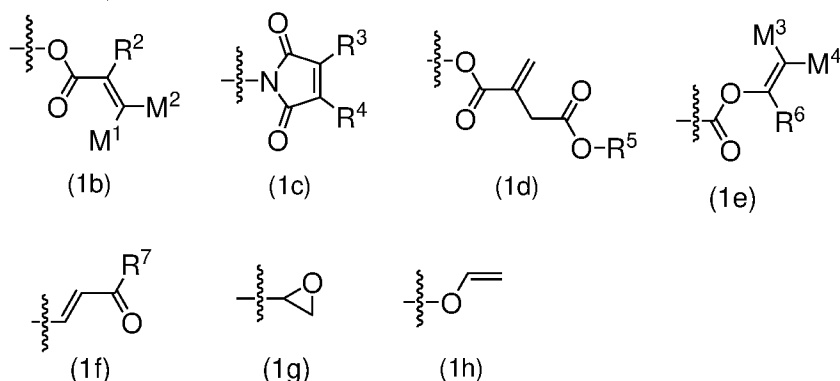
ら11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-S p^1-P^1$ 、または $-S p^2-P^2$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、aが2のとき、2つの環 A^1 は異なっているいてもよく、bが2のとき、2つの環 A^4 は異なっているいてもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも1つはフェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

$S p^1$ および $S p^2$ は独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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く、構造内に複数の $S p^1$ または $S p^2$ が存在する場合、それぞれが異なっているいてもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)～式(1h)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なっているいてもよく、；



式(1b)～式(1h)において、 M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

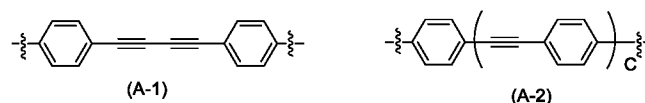
R^2 は水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおい

て少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、および R^7 は独立して、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 $-\text{CH}_2-$ 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 $-(\text{CH}_2)_2-$ 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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

[請求項4] [修正後]式(1-1)、式(1-2)および式(1-3)において、

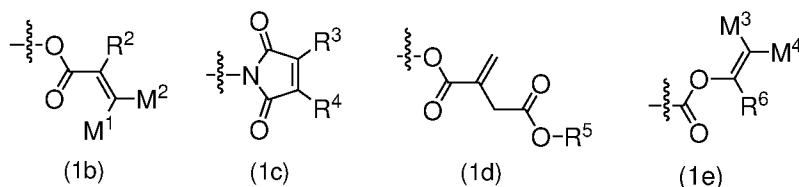
環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-ジイル、フルオレン-2,7-ジイル、フェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から11のアルコキシ、炭素数2から11のアルケニルオキシ、 $-\text{Sp}^1-\text{P}^1$ 、または Sp^2-P^2 で置き換えられてもよく、(A-2)において、cは2、3、又は4である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも1つはフェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；



Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCOO}-$ 、 $-\text{OCOCH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCO}-$ 、または $-\text{COCH}=\text{CH}-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCOO}-$ 、 $-\text{OCOCH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCO}-$ 、または $-\text{COCH}=\text{CH}-$ であり；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、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、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCOO}-$ 、または $-\text{OCO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、構造内に複数の Sp^1 または Sp^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b)、式(1c)、式(1d)、または式(1e)のいずれかで表される基であり、構造内に複数の P^1 または P^2 が存在する場合、それぞれが異なってもよく、；



式(1b)～式(1e)において、

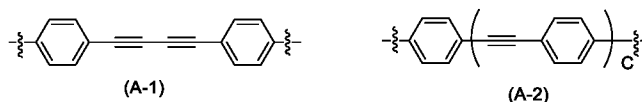
M^1 、 M^2 、 M^3 および M^4 は独立して、水素、ハロゲン、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

R^2 は水素、ハロゲン、または炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて少なくとも1つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

R^3 、 R^4 、 R^5 、および R^6 は独立して、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 $-(CH_2)_2-$ 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つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい、請求項3に記載の化合物。

[請求項5] [修正後] 式(1-1)、式(1-2)および式(1-3)において、

環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 および環 A^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、ナフタレン-2,6-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、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり、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、メチル、またはエチルで置き換えられてもよく、(A-2)において、 c は2、3、又は4である。ただし、環 A^1 、環 A^2 、環 A^3 または環 A^4 の中で少なくとも1つはフェナントレン-2,7-ジイル、(A-1)で表される基または(A-2)で表される基であり；

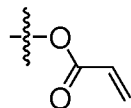


Z^2 、 Z^3 および Z^4 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり、ただし Z^2 、 Z^3 および Z^4 の中で少なくとも1つは、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCO-$ 、または $-COCH=CH-$ であり；

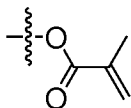
$S p^1$ および $S p^2$ は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、構造内に複数の $S p^1$ または $S p^2$ が存在する場合、それぞれが異なってもよく；

P^1 および P^2 は独立して、式(1b-1)、(1b-2)、(1b-3)、(1b-4)、式(1b-5)、(1c-1)、(1d-1)、(1d-2) また

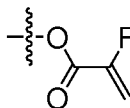
は (1 e - 1) で表される基である請求項 3 に記載の化合物。



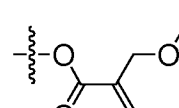
(1b-1)



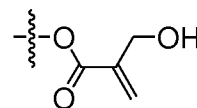
(1b-2)



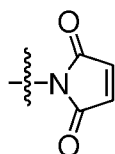
(1b-3)



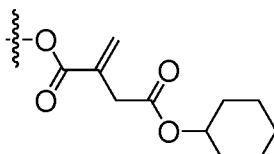
(1b-4)



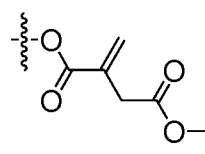
(1b-5)



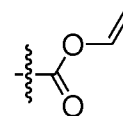
(1c-1)



(1d-1)



(1d-2)



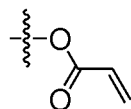
(1e-1)

[請求項6] 式 (1 - 1)、式 (1 - 2)、または式 (1 - 3) で表される化合物において、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 のいずれか1つは、 $-COO-$ または $-OCO-$ である、請求項 3 に記載の化合物。

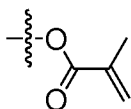
[請求項7] [修正後] 式 (1 - A) で表される、請求項 1 から 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。



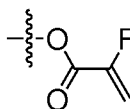
(1-A)



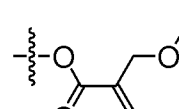
(1b-1)



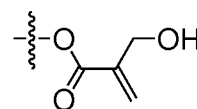
(1b-2)



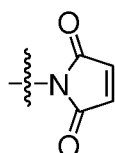
(1b-3)



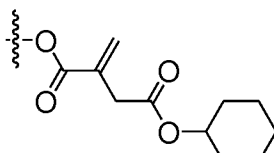
(1b-4)



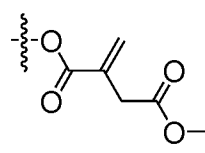
(1b-5)



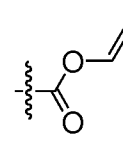
(1c-1)



(1d-1)



(1d-2)



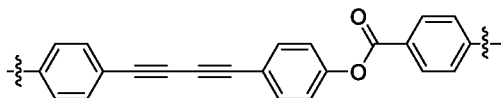
(1e-1)

P^1 および P^2 は独立して、式 (1 b - 1)、(1 b - 2)、(1 b - 3)、(1 b - 4)、式 (1 b - 5)、(1 c - 1)、(1 d - 1)、(1 d - 2) または (1 e - 1) で表される基であり、

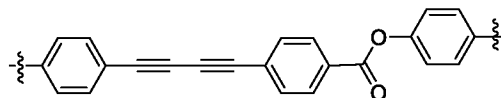
Sp^1 および Sp^2 は独立して、単結合または炭素数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、

Y は (MES - 1 - 0 1) から (MES - 1 - 0 6) のいずれかの式で表される基であり、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素、塩素、メチル、

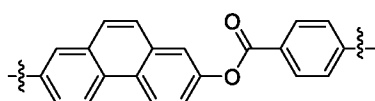
またはエチルで置き換えられてもよい。



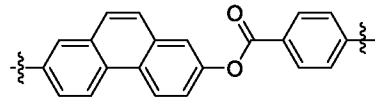
(MES-1-01)



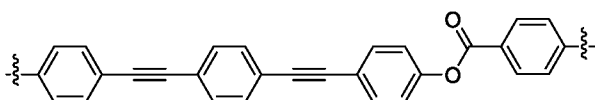
(MES-1-02)



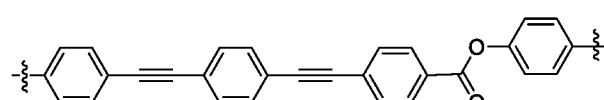
(MES-1-03)



(MES-1-04)



(MES-1-05)

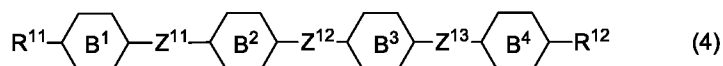
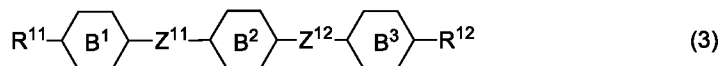
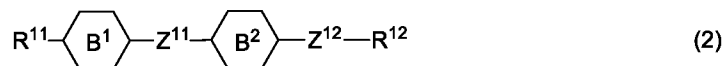


(MES-1-06)

[請求項8] 式(1-A)で表される化合物において、 Sp^1 および Sp^2 が独立して、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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCOO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよい請求項7に記載の化合物。

[請求項9] 請求項1から8のいずれか1項に記載した化合物の少なくとも1つを含有する液晶組成物。

[請求項10] 式(2)から式(4)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項9に記載の液晶組成物。



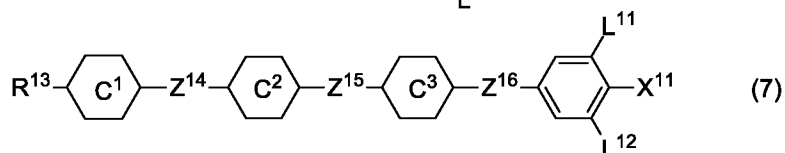
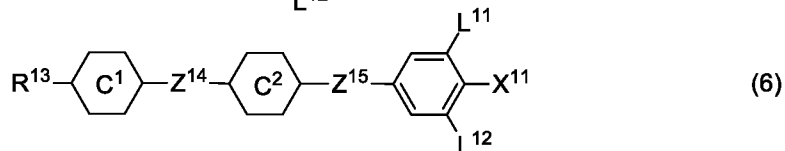
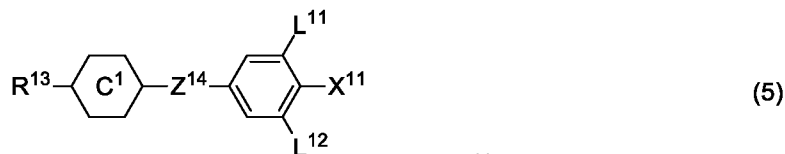
式(2)から式(4)において、

R^{11} および R^{12} は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

環 B^1 、環 B^2 、環 B^3 、および環 B^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

Z^{11} 、 Z^{12} 、および Z^{13} は独立して、単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、または $-\text{COO}-$ である。

[請求項11] 式(5)から式(7)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項9または10に記載の液晶組成物。



式(5)から式(7)において、

R^{13} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

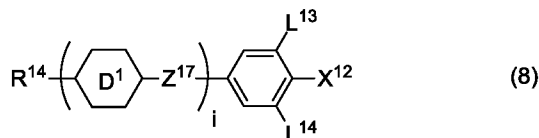
X^{11} は、フッ素、塩素、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、または $-\text{OCF}_2\text{CHFCF}_3$ であり；

環 C^1 、環 C^2 、および環 C^3 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレン、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、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

Z^{14} 、 Z^{15} 、および Z^{16} は独立して、単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CF}-$ または $-(\text{CH}_2)_4-$ であり；

L^{11} および L^{12} は独立して、水素またはフッ素である。

[請求項12] 式(8)で表される化合物の少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項9から11のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(8)において、

R^{14} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

く；

X^{12} は $-C \equiv N$ または $-C \equiv C - C \equiv N$ であり；

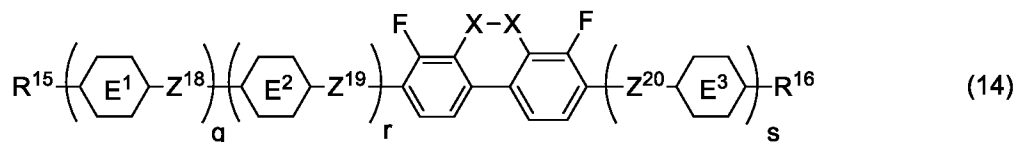
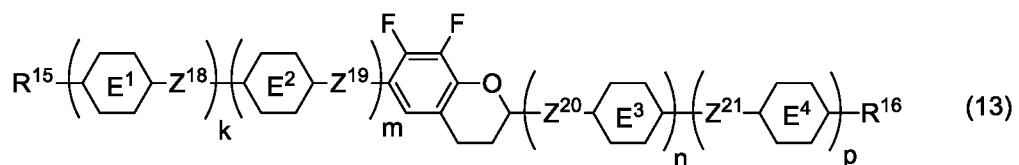
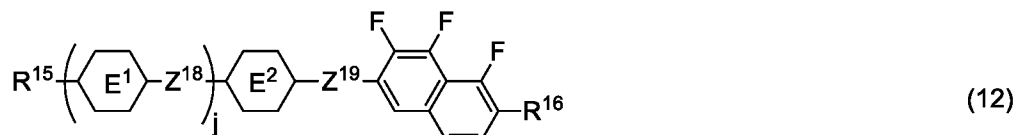
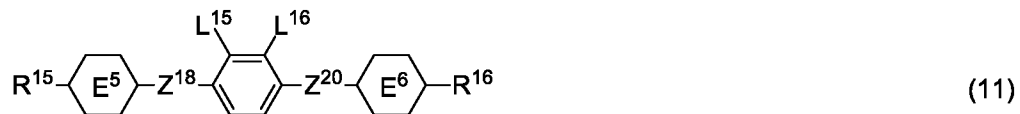
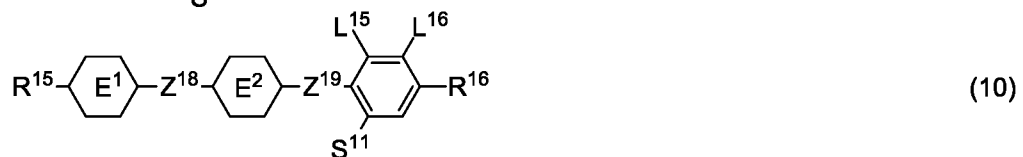
環 D^1 は、1, 4-シクロヘキシレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられてもよい1, 4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、またはピリジン-2, 5-ジイルであり；

Z^{17} は、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

L^{13} および L^{14} は独立して、水素またはフッ素であり；

i は、1、2、3、または4である。

[請求項13] 式(9)から式(15)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項9から12のいずれか1項に記載の液晶組成物。



式(9)から式(15)において、

R^{15} および R^{16} は独立して、炭素数 1 から 10 のアルキルまたは炭素数 2 から 10 のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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 つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

R^{17} は、水素、フッ素、炭素数 1 から 10 のアルキル、または炭素数 2 から 10 のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、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 つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

環 E^1 、環 E^2 、環 E^3 、および環 E^4 は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2, 6-ジイルであり；

環 E^5 および環 E^6 は独立して、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2, 6-ジイルであり；

Z^{18} 、 Z^{19} 、 Z^{20} 、および Z^{21} は独立して、単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-OCF_2CH_2CH_2-$ であり；

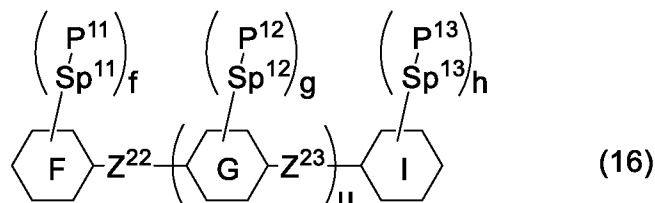
L^{15} および L^{16} は独立して、フッ素または塩素であり；

S^{11} は、水素またはメチルであり；

X は、 $-CHF-$ または $-CF_2-$ であり；

j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q 、 r 、および s は独立して、0 または 1 であり、 k 、 m 、 n 、および p の和は、1 または 2 であり、 q 、 r 、および s の和は、0、1、2、または 3 であり、 t は、1、2、または 3 である。

[請求項 14] 式 (16) で表される化合物の少なくとも 1 つの重合性化合物を含有する、請求項 9 から 13 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



式 (16) において、

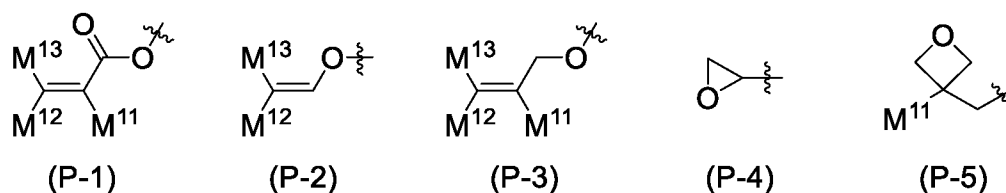
環 F および環 I は独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、テトラヒドロピラン-2-イル、1, 3-ジオキサソ-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも 1 つの水素は、ハロゲン、炭素数 1 から 12 のアルキル、または少なくとも 1 つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数 1 から 12 のアルキルで置き換えられてもよく；

環 G 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、ハロゲン、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つの水素がハロゲン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^{22} および Z^{23} は独立して、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、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^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} は独立して、式 (P-1) から式 (P-5) で表される基の群から選択された重合性基であり；



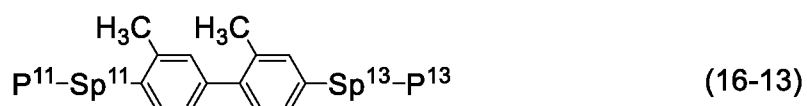
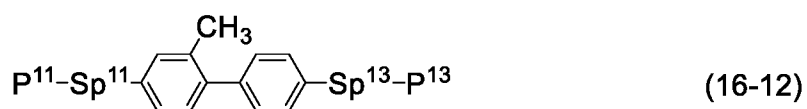
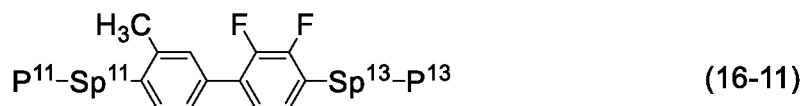
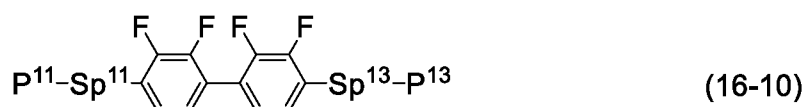
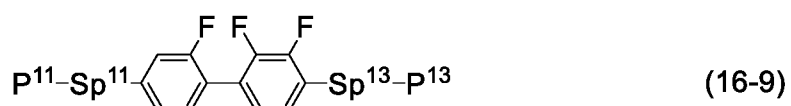
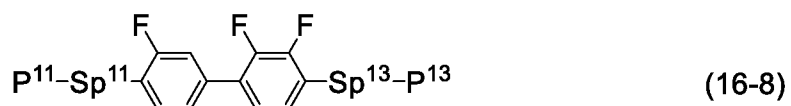
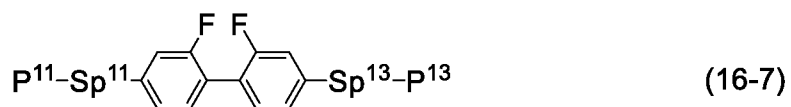
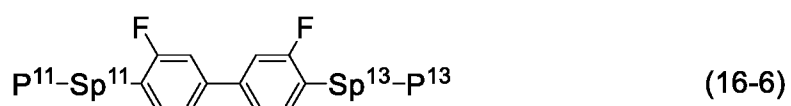
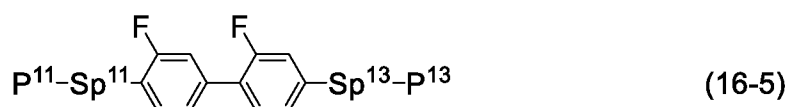
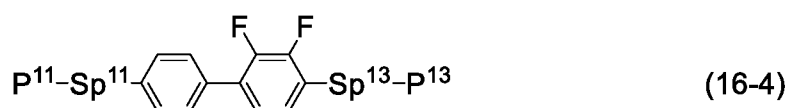
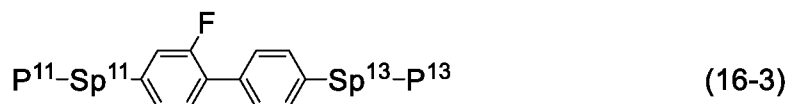
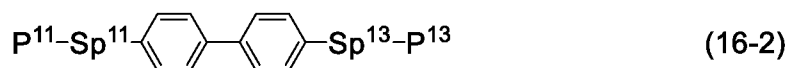
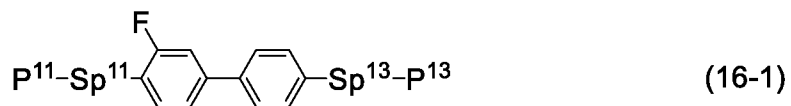
M^{11} 、 M^{12} 、および M^{13} は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

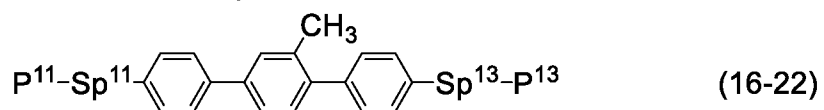
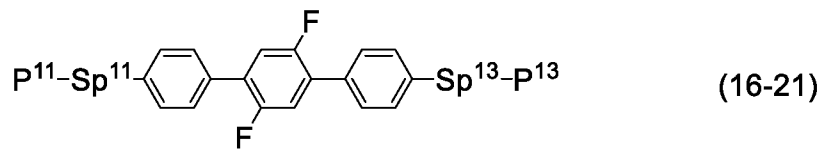
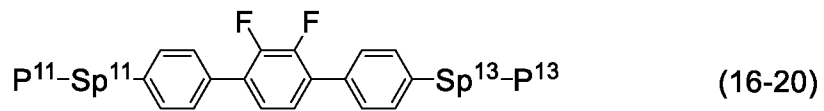
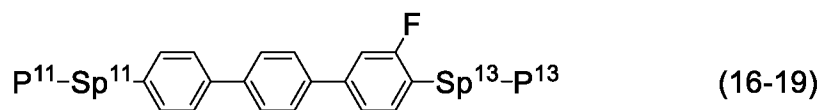
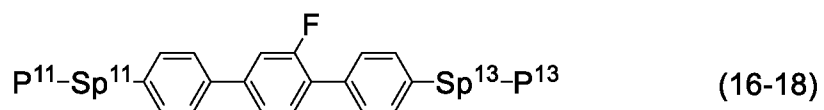
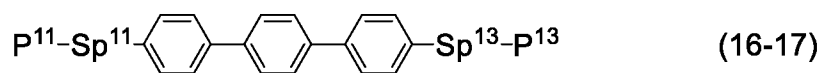
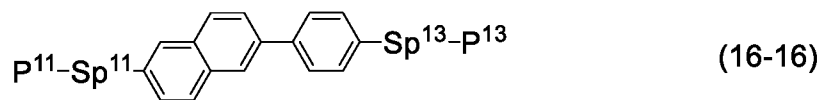
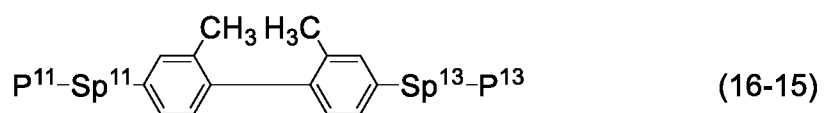
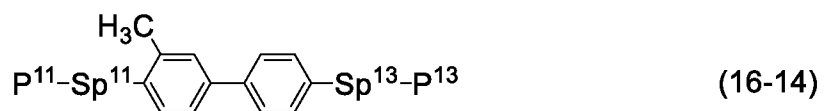
Sp^{11} 、 Sp^{12} 、および Sp^{13} は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

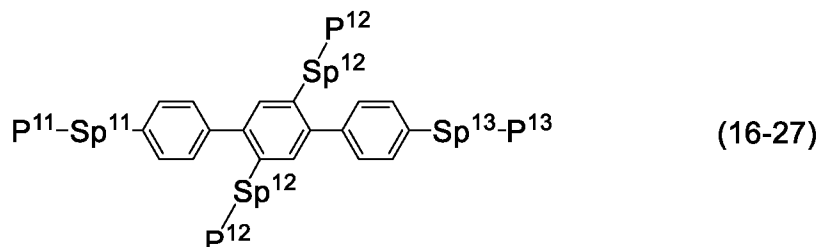
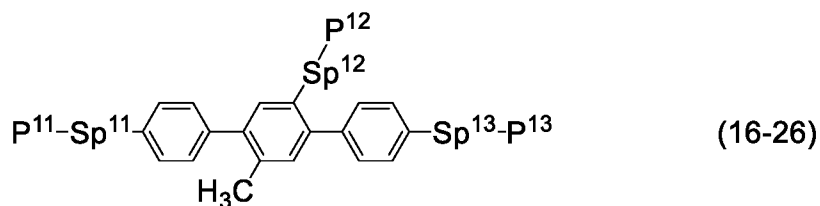
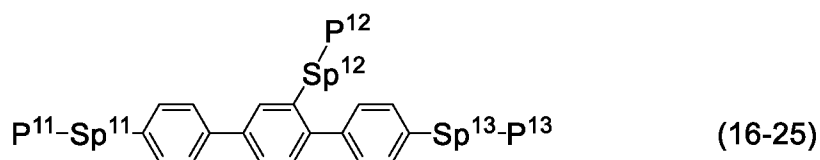
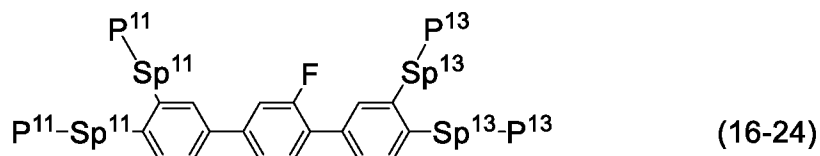
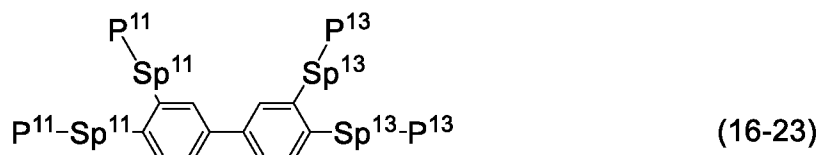
u は、0、1、または2であり；

f、g、および h は独立して、0、1、2、3、または4であり、そして f、g、および h の和は2以上である。

[請求項15] 式 (16-1) から式 (16-27) で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの重合性化合物を含有する、請求項9から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。





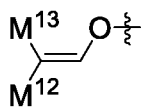


式(16-1)から式(16-27)において、

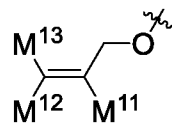
P^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} は独立して、式(P-1)から式(P-3)で表される基の群から選択された重合性基であり、ここで M^{11} 、 M^{12} 、および M^{13} は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり：



(P-1)



(P-2)



(P-3)

Sp^{11} 、 Sp^{12} 、および Sp^{13} は独立して、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、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。

[請求項16] 式(1)および式(16)以外の重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、および消泡剤の少なくとも1つをさらに含有する、請求項9から15のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項17] 請求項9から16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。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2019/023312

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl. [see extra sheet]

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl. C07C69/92, C07C69/94, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/16, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/38, C09K19/42, C09K19/54, C09K19/56, G02F1/13

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

Published examined utility model applications of Japan	1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2019
Registered utility model specifications of Japan	1996-2019
Published registered utility model applications of Japan	1994-2019

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

CPlus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	JP 2011-227187 A (DIC CORP.) 10 November 2011, claims, paragraphs [0043]-[0054], [0058]-[0108], [0113], [0114], examples & US 2011/0253933 A1, claims, pages 11-25, paragraphs [0059]-[0093], [0098], [0099], examples	1-14, 16, 17 10-13, 15
Y	WO 2016/152340 A1 (JNC CORPORATION) 29 September 2016, claims, page 97 & US 2018/0057747 A1, claims, paragraph [0116] & EP 3275973 A1 & CN 107406771 A & KR 10-2017-0131399 A	14, 15



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
15.08.2019

Date of mailing of the international search report
27.08.2019

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2019/023312

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2001-81465 A (FUJI PHOTO FILM CO., LTD.) 27 March 2001, claims, paragraphs [0050]-[0053], examples (Family: none)	1-6, 9, 16, 17
X	JP 2016-11347 A (JNC CORPORATION; JNC PETROCHEMICAL CORP.) 21 January 2016, claims, paragraphs [0088]-[0107], [0111], [0226]-[0241], examples	1-4, 6, 9-13, 16, 17
Y	& US 2015/0376505 A1, claims, paragraphs [0143]-[0151], [0155], pages 172-203, examples	10-15
X	JP 2007-119415 A (ADEKA CORPORATION) 17 May 2007, claims, paragraphs [0023]-[0043], [0047], [0067]-[0073], examples	1-6, 9, 10, 14, 16, 17
Y	& US 2009/0137761 A1, claims, pages 3-5, paragraphs [0019], [0026]-[0031], examples & WO 2007/052403 A1 & EP 1944287 A1 & KR 10-2008-0046224 A & CN 101282922 A	11-13, 15
X	WO 2017/170701 A1 (ADEKA CORPORATION) 05 October 2017, claims, paragraphs [0034]-[0064], [0111], [0112], [0124]-[0144], examples	1-6, 9-12, 16, 17
Y	& EP 3438134 A1, claims, pages 7-12, paragraphs [0056], [0068]-[0077], examples & CN 108602907 A & KR 10-2018-0128896 A	13-15
X	CN 105219401 A (JIANGSU HECHENG ADVANCED MATERIALS CO., LTD.) 06 January 2016, claims, examples	1-3, 6, 9, 16, 17
Y	(Family: none)	10-15
X	JP 2002-521354 A (ROLIC AG) 16 July 2002, claims, pages 29, 30, 42, 43, 49, 50, paragraph [0015]	1-8, 9, 14, 16, 17
Y	& US 6613245 B1, claims, columns 17-20, 31-34, 41-46 & WO 2000/005189 A1 & EP 1100766 A1 & CN 1311768 A	10-13, 15
X	JP 2016-17034 A (DIC CORP.) 01 February 2016, claims, pages 12, 18, 21, paragraphs [0081]-[0112], examples	1-6, 9, 14, 16, 17
Y	(Family: none)	10-13, 15
X	JP 2010-83781 A (DIC CORP.) 15 April 2010, claims, paragraphs [0078]-[0080], examples	1-6, 9, 14, 16, 17
Y	(Family: none)	10-13, 15
P, X	JP 2019-66758 A (JNC CORPORATION; JNC PETROCHEMICAL CORP.; TOKYO INSTITUTE OF TECHNOLOGY) 25 April 2019, claims, paragraphs [0060]-[0091], examples (Family: none)	1-17

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2019/023312

(Continuation of Box No. A)

CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07C69/92(2006.01)i, C07C69/94(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i,
C09K19/14(2006.01)i, C09K19/16(2006.01)i, C09K19/18(2006.01)i,
C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/32(2006.01)i,
C09K19/34(2006.01)i, C09K19/38(2006.01)i, C09K19/42(2006.01)i,
C09K19/54(2006.01)i, C09K19/56(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. 特別ページ参照

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. C07C69/92, C07C69/94, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/16, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, C09K19/38, C09K19/42, C09K19/54, C09K19/56, G02F1/13

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2019年
日本国実用新案登録公報	1996-2019年
日本国登録実用新案公報	1994-2019年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X Y	JP 2011-227187 A (D I C株式会社) 2011.11.10, 特許請求の範囲、 [0043] - [0054]、[0058] - [0108]、[0113]、[0114]、実施例 & US 2011/0253933 A1, claims, p.11-25, [0059]-[0093], [0098], [0099], EXAMPLES	1-14, 16, 17 10-13, 15
Y	WO 2016/152340 A1 (J N C株式会社) 2016.09.29, 請求の範囲、第 97頁 & US 2018/0057747 A1, claims, [0116] & EP 3275973 A1 & CN 107406771 A & KR 10-2017-0131399 A	14, 15

☑ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)
「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

15.08.2019

国際調査報告の発送日

27.08.2019

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)

郵便番号 100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

薄井 慎矢

4 H

7882

電話番号 03-3581-1101 内線 3443

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	JP 2001-81465 A (富士写真フイルム株式会社) 2001.03.27, 特許請求の範囲、[0050] - [0053]、実施例 (ファミリーなし)	1-6, 9, 16, 17
X	JP 2016-11347 A (JNC株式会社、JNC石油化学株式会社) 2016.01.21, 特許請求の範囲、[0088] - [0107]、[0111]、[0226] - [0241]、実施例 & US 2015/0376505 A1, claims, [0143]-[0151], [0155], p.172-203, Examples	1-4, 6, 9-13, 16, 17
Y		10-15
X	JP 2007-119415 A (株式会社ADEKA) 2007.05.17, 特許請求の範囲、[0023] - [0043]、[0047]、[0067] - [0073]、実施例 & US 2009/0137761 A1, claims, p.3-5, [0019], [0026]-[0031], EXAMPLES & WO 2007/052403 A1 & EP 1944287 A1 & KR 10-2008-0046224 A & CN 101282922 A	1-6, 9, 10, 14, 16, 17
Y		11-13, 15
X	WO 2017/170701 A1 (株式会社ADEKA) 2017.10.05, 請求の範囲、[0034] - [0064]、[0111] - [0112]、[0124] - [0144]、実施例 & EP 3438134 A1, Claims, p.7-12, [0056], [0068]-[0077], Examples & CN 108602907 A & KR 10-2018-0128896 A	1-6, 9-12, 16, 17
Y		13-15
X	CN 105219401 A (JIANGSU HECHENG ADVANCED MATERIALS CO LTD) 2016.01.06, 請求の範囲、実施例 (ファミリーなし)	1-3, 6, 9, 16, 17
Y		10-15
X	JP 2002-521354 A (ロリク アーゲー) 2002.07.16, 特許請求の範囲、第29頁、第30頁、[0015]、第42頁、第43頁、第49頁、第50頁 & US 6613245 B1, claims, column 17-20, 31-34, 41-46 & WO 2000/005189 A1 & EP 1100766 A1 & CN 1311768 A	1-8, 9, 14, 16, 17
Y		10-13, 15
X	JP 2016-17034 A (DIC株式会社) 2016.02.01, 特許請求の範囲、第12頁、第18頁、第21頁、[0081] - [0112]、実施例 (ファミリーなし)	1-6, 9, 14, 16, 17
Y		10-13, 15
X	JP 2010-83781 A (DIC株式会社) 2010.04.15, 特許請求の範囲、[0078] - [0080]、実施例 (ファミリーなし)	1-6, 9, 14, 16, 17
Y		10-13, 15
P, X	JP 2019-66758 A (JNC株式会社、JNC石油化学株式会社、国立大学法人東京工業大学) 2019.04.25, 特許請求の範囲、[0060] - [0091]、実施例 (ファミリーなし)	1-17

発明の属する分野の分類

C07C69/92(2006.01)i, C07C69/94(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i,
C09K19/16(2006.01)i, C09K19/18(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i,
C09K19/32(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i, C09K19/38(2006.01)i, C09K19/42(2006.01)i,
C09K19/54(2006.01)i, C09K19/56(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i