

(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
2016年8月18日(18.08.2016)



(10) 国際公開番号
WO 2016/129490 A1

- (51) 国際特許分類:
C07C 69/732 (2006.01) C07D 319/06 (2006.01)
C07C 229/08 (2006.01) C07F 5/02 (2006.01)
C07C 229/30 (2006.01) C07F 7/18 (2006.01)
C07C 321/10 (2006.01) C09K 19/12 (2006.01)
C07D 213/55 (2006.01) C09K 19/34 (2006.01)
C07D 239/26 (2006.01) C09K 19/42 (2006.01)
C07D 295/145 (2006.01) C09K 19/54 (2006.01)
C07D 309/06 (2006.01) G02F 1/1337 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2016/053316
- (22) 国際出願日: 2016年2月4日(04.02.2016)
- (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 2015-023330 2015年2月9日(09.02.2015) JP
- (71) 出願人: JNC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). JNC石油化学株式会社
(JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) [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: 田中 裕之(TANAKA Hiroyuki); 〒2908551
千葉県市原市五井海岸5番地の1 JNC石油

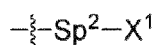
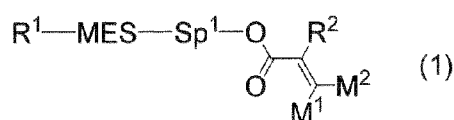
化学株式会社 市原研究所内 Chiba (JP). 矢野
匡一(YANO Masakazu); 〒2908551 千葉県市原市五
井海岸5番地の1 JNC石油化学株式会社
市原研究所内 Chiba (JP). 近藤 史尚(KONDOU
Fumitaka); 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番
地の1 JNC石油化学株式会社 市原研究所
内 Chiba (JP). 荻田 和寛(OGITA Kazuhiro); 〒
2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J
NC石油化学株式会社 市原研究所内 Chiba
(JP).

- (74) 代理人: 小林 浩, 外(KOBAYASHI Hiroshi et al.);
〒1040028 東京都中央区八重洲二丁目8番7号
福岡ビル9階 阿部・井窪・片山法律事務所
Tokyo (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, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES,
FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN,
IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, 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.

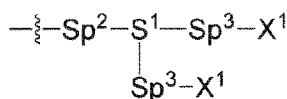
[続葉有]

(54) Title: POLYMERIZABLE POLAR COMPOUND, LIQUID CRYSTAL COMPOSITION, AND LIQUID CRYSTAL DIS-
PLAY ELEMENT

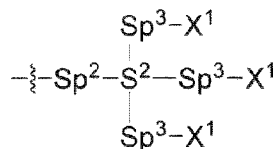
(54) 発明の名称: 重合性極性化合物、液晶組成物および液晶表示素子



(1a)



(1b)



(1c)

(57) Abstract: Provided is a polar compound having high chemical stability, high ability to align liquid crystal molecules, and high solubility in a liquid crystal composition, and which has a large voltage holding ratio when used in a liquid crystal display element. A compound represented by formula (1). For example, R² represents a C1-15 alkyl, MES represents a mesogenic group having at least one ring, Sp¹ represents a single bond or a C1-10 alkylen, M¹ and M² represent hydrogen, R² represents a group represented by formulas (1a) through (1c), Sp² and Sp³ are single bonds or C1-10 alkylenes, S¹ represents >CH-, S² represents >C<, and X¹ represents -OH.

(57) 要約: 化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、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極性化合物を提供する。式(1)で表される化合物とする。例えば、R²は炭素数1から15のアルキルであり; MESは少なくとも1つの環を有するメソゲン基であり; Sp¹は単結合または炭素数1から10のアルキレンであり; M¹およびM²は水素であり; R²は式(1a)から(1c)で表される基であり; Sp²およびSp³は単結合または炭素数1から10のアルキレンであり; S¹は>CH-であり; S²は>C<であり; X¹は-OHである。



(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, 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))

明 細 書

発明の名称：重合性極性化合物、液晶組成物および液晶表示素子 技術分野

[0001] 本発明は、重合性極性化合物、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、ヒドロキシアルキル基など極性基によって置換されたアクリロイルオキシ基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 (phase change)、T N (twisted nematic)、S T N (super twisted nematic)、E C B (electrically controlled birefringence)、O C B (optically compensated bend)、I P S (in-plane switching)、V A (vertical alignment)、F F S (fringe field switching)、F P A (field-induced photo-reactive alignment)などのモードである。素子の駆動方式に基づいた分類は、P M (passive matrix)とA M (active matrix)である。P Mは、スタティック (static)、マルチプレックス (multiplex)などに分類され、A Mは、T F T (thin film transistor)、M I M (metal insulator metal)などに分類される。T F Tの分類は非晶質シリコン (amorphous silicon)および多結晶シリコン (polycrystal silicon)である。後者は製造工程によって高温型と低温型とに分類される。光源に基づいた分類は、自然光を利用する反射型、バックライトを利用する透過型、そして自然光とバックライトの両方を利用する半透過型である。

[0003] 液晶表示素子はネマチック相を有する液晶組成物を含有する。この組成物は適切な特性を有する。この組成物の特性を向上させることによって、良好な特性を有するA M素子を得ることができる。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]

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。

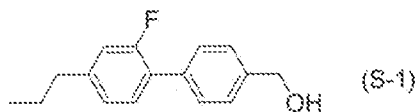
[0006] 高分子支持配向（PSA；polymer sustained alignment）型の液晶表示素子では、重合体を含有する液晶組成物が用いられる。まず、少量の重合性化合物を添加した組成物を素子に注入する。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。重合性化合物は重合して、組成物中に重合体の網目構造を生成する。この組成物では、重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。重合体のこのような効果は、TN、ECB、OCB、IPS、VA、FFS、FPAのようなモードを有する素子に期待できる。

[0007] 汎用の液晶表示素子において、液晶分子の垂直配向は、ポリイミド配向膜によって達成される。一方、配向膜を有しない液晶表示素子では、極性化合物および重合体を含有する液晶組成物が用いられる。まず、少量の極性化合物および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。ここで、極性化合物の作用によって液晶分子が配向される。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。ここで、重合性化合物が重合し、液晶分子の配向を安定化させる。この組成物では、極性化合物および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。さらに、配向膜を有しない素子では、配向膜を形成する工程が不要である。配向膜がないので、配向膜と組成物との相互作用によって、素子の電気抵抗が低下することはない。極性化合物と重合体の組合せによるこのような効果は、TN、E

CB、OCB、IPS、VA、FFS、FPAのようなモードを有する素子に期待できる。

[0008] これまでに、配向膜を有しない液晶表示素子において、液晶分子を垂直配向させることの出来る化合物として、末端に－OH基を有する化合物が種々合成されてきた。特許文献1には、末端に－OH基を有するビフェニル化合物（S-1）が記載されている。しかし、この化合物は液晶分子を垂直配向させる能力は高いが、液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が十分には大きく無い。

[0009] [化30]



先行技術文献

特許文献

- [0010] 特許文献1：国際公開第2014／090362号
特許文献2：国際公開第2014／094959号
特許文献3：国際公開第2013／004372号
特許文献4：国際公開第2012／104008号
特許文献5：国際公開第2012／038026号
特許文献6：特開昭50－35076号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

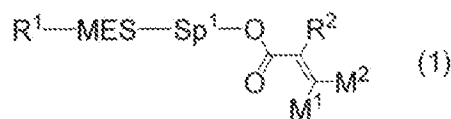
- [0011] 本発明の第一の課題は、化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、液晶組成物への高い溶解度を有し、そして液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きい極性化合物を提供することである。第二の課題は、この化合物を含み、そしてネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大

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、そして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、長い寿命のような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] 本発明は、式(1)で表される化合物、この化合物を含む液晶組成物、およびこの組成物を含む液晶表示素子に関する。

[化31]



式(1)において、

R¹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く；

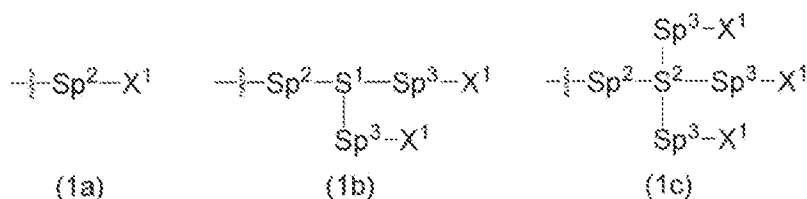
MESは、少なくとも1つの環を有するメソゲン基であり；

Sp¹は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの−CH₂−は、−O−、−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−(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く；

M¹およびM²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、式(1a)、式(1b)、または式(1c)で表される基であり：

[化,32]



式 (1 a)、式 (1 b)、および式 (1 c) において、

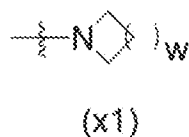
S p²およびS p³は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-NH-、-CO-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

S¹は、>CH-または>N-であり：

S^2 は、 $\succ C$ または $\succ S_i$ であり；

X¹は、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{OR}^3$ 、 $-\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、式(×1)、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{B}(\text{OH})_2$ 、または $-\text{Si}(\text{R}^3)_3$ で表される基であり、ここで、R³は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ 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、ハロゲンで置き換えられてもよく、式(×1)におけるwは1、2、3または4である。

[化33]



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、液晶分子を配向させる高い

能力、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極性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、そして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、長い寿命のような特性を有する液晶表示素子を提供することである。

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。

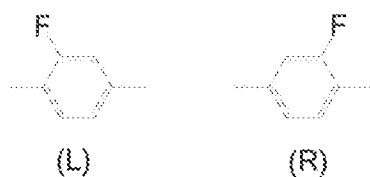
[0017] 末端基 R^{11} の記号を複数の成分化合物に用いた。これらの化合物において、任意の２つの R^{11} が表す２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。例えば、化合物（２）の R^{11} がエチルであり、化合物（３）の R^{11} がエチルであるケースがある。化合物（２）の R^{11} がエチルであり、化合物（３）の R^{11} がプロピルであるケースもある。このルールは、他の末端基、環、結合基などの記号にも適用される。式（８）において、 i が２のとき、２つの環 D^1 が存在する。この化合物において、２つの環 D^1 が表す２つの基は、同一であってもよいし、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、 $-(CH_2)_2-$ ）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、アルコキシアルキル、アルコキシアルケニル、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。

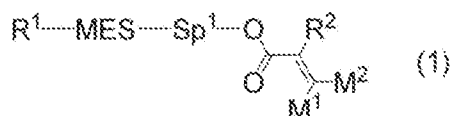
[化34]



[0020] 本発明は、下記の項などを包含する。

[0021] 項 1. 式 (1) で表される化合物。

[化35]



式 (1) において、

R¹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く；

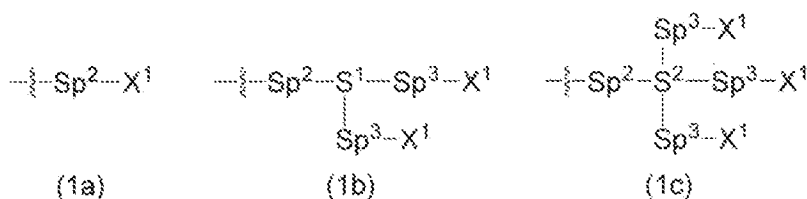
MES は、少なくとも 1 つの環を有するメソゲン基であり；

Sp¹ は、単結合または炭素数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの −CH₂− は、−O−、−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 −(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く；

M¹ および M² 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、式 (1a)、式 (1b)、または式 (1c) で表される基であり：

[化36]



式 (1a)、式 (1b)、および式 (1c) において、

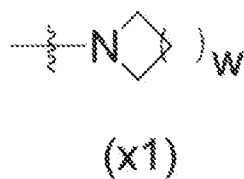
Sp^2 および Sp^3 は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

S^1 は、 $>CH-$ または $>N-$ であり；

S^2 は、 $>C<$ または $>Si<$ であり；

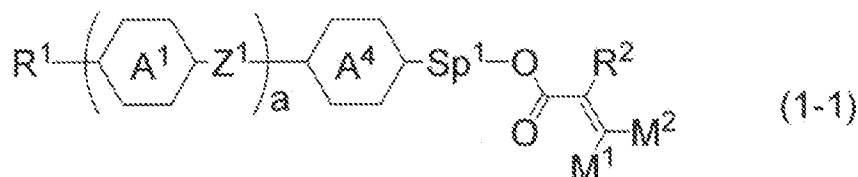
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式(x1)、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、式(x1)におけるwは1、2、3または4である。

[化37]



[0022] 項2. 式(1-1)で表される、項1に記載の化合物。

[化38]



式(1-1)において、

R^1 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く；

環 A^1 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、または2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から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く；

Z^1 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ 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く；

Sp^1 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、または $-\text{OCOO}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ で置き換えられ

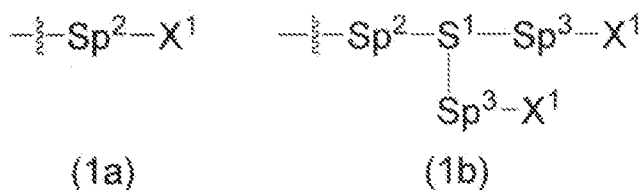
てもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

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のアルキルであり；

a は0、1、2、3、または4であり；

R^2 は、式(1a)または式(1b)で表される基であり；

[化39]



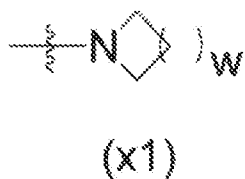
式(1a)および式(1b)において、

Sp^2 および Sp^3 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 $\text{---CH}_2\text{---}$ は、 ---O--- 、 ---NH--- 、 ---CO--- 、 ---COO--- 、 ---OCO--- 、または ---OCOO--- で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $\text{---(CH}_2\text{)}_2\text{---}$ は、 ---CH=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く；

S^1 は、 >CH--- または >N--- であり；

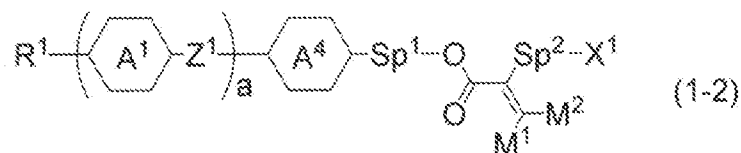
X^1 は、 ---OH 、 ---NH_2 、 ---OR^3 、 $\text{---N(R}^3\text{)}_2$ 、式(x1)、 ---COOH 、 ---SH 、 ---B(OH)_2 、または $\text{---Si(R}^3\text{)}_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $\text{---CH}_2\text{---}$ は、 ---O--- で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $\text{---(CH}_2\text{)}_2\text{---}$ は、 ---CH=CH--- 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、ハロゲンで置き換えられてもよく、式(x1)における w は1、2、3または4である。

[化40]



[0023] 項3. 式(1-2)で表される、項1または2に記載の化合物。

[化41]



式(1-2)において、

R¹は、炭素数1から15のアルキル、炭素数2から15のアルケニル、炭素数1から14のアルコキシ、または炭素数2から14のアルケニルオキシであり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環A¹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、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイル、または2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から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く；

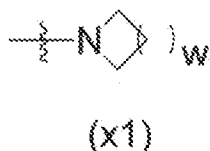
Z^1 は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ であり；

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、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、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；

M^1 および M^2 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つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式(x1)、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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、式(x1)におけるwは1、2、3または4であり；

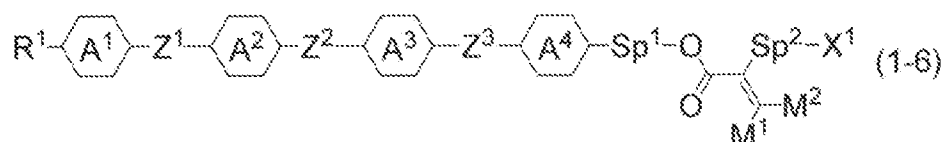
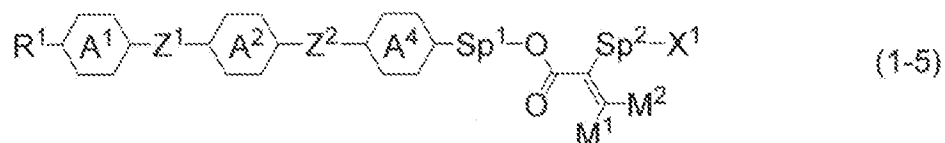
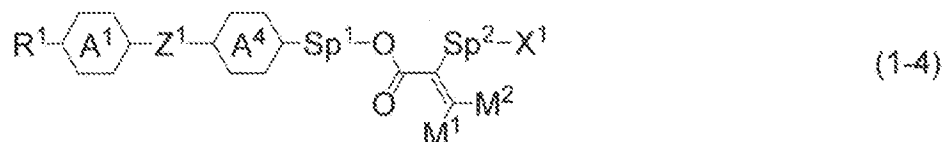
[化42]



aは0、1、2、3、または4である。

[0024] 項4. 式(1-3)から式(1-6)のいずれか1つで表される、項1から3のいずれか1項に記載の化合物。

[化43]



式(1-3)から式(1-6)において、

R^1 は、炭素数1から15のアルキル、炭素数2から15のアルケニル、炭素数1から14のアルコキシ、または炭素数2から14のアルケニルオキシであり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

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、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、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイル、または2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素はフッ素、塩素、炭素数1から7の

アルキル、炭素数2から7のアルケニル、または炭素数1から6のアルコキシで置き換えられてもよく；

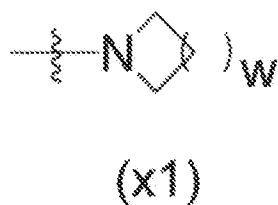
Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、または $-CF=CF-$ であり；

Sp^1 および Sp^2 は独立して、単結合または炭素数1から7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、フッ素で置き換えられてもよく；

M^1 および M^2 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り；

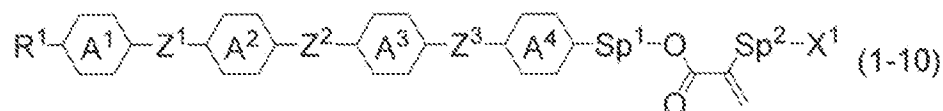
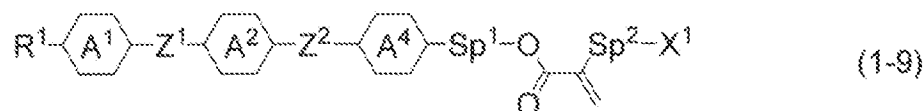
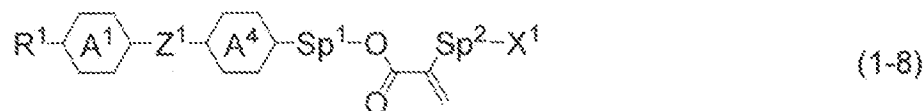
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式(x1)、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく、式(x1)におけるwは1、2、3または4である。

[化44]



[0025] 項5. 式(1-7)から式(1-10)のいずれか1つで表される、項1から4のいずれか1項に記載の化合物。

[化45]



式(1-7)から式(1-10)において、

R^1 は、炭素数1から10のアルキル、炭素数2から10のアルケニル、または炭素数1から9のアルコキシであり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

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、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、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイル、または2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素はフッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、炭素数2から5のアルケニル、または炭素数1から4のアルコキシで置き換えられてもよく；

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH$

=CH-であり；

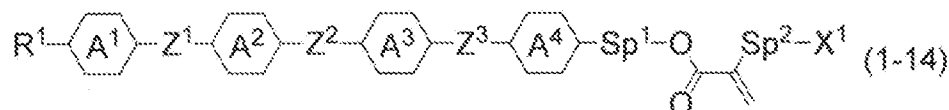
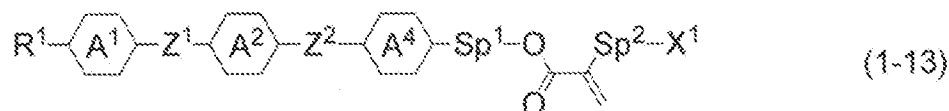
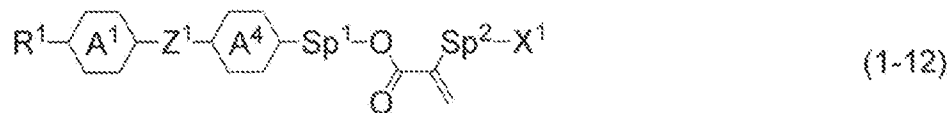
Sp¹は、単結合または炭素数1から7のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は、-CH=CH-で置き換えられてもよく；

Sp²は、炭素数1から7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-で置き換えられてもよく；

X¹は、-OH、-NH₂、または-N(R³)₂であり、ここで、R³は、水素または炭素数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-CH₂-は、-O-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、フッ素で置き換えられてもよい。

[0026] 項6. 式(1-11)から式(1-14)のいずれか1つで表される、項1から5のいずれか1項に記載の化合物。

[化46]



式 (1-11) から式 (1-14) において、

R^1 は、炭素数 1 から 10 のアルキル、炭素数 2 から 10 のアルケニル、または炭素数 1 から 9 のアルコキシであり、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

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、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く；

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合または $-(CH_2)_2-$ であり；

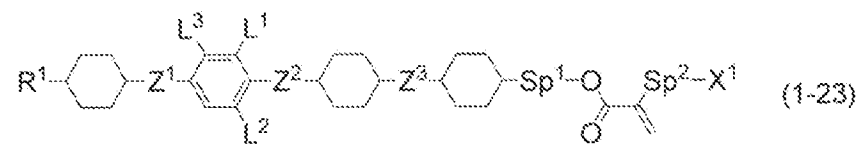
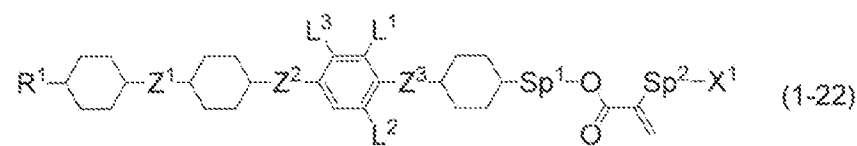
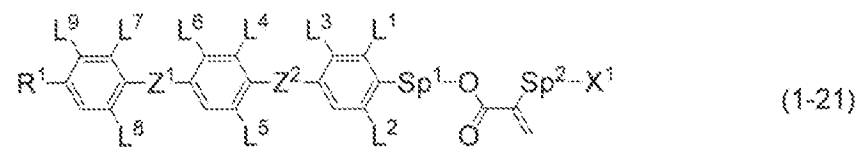
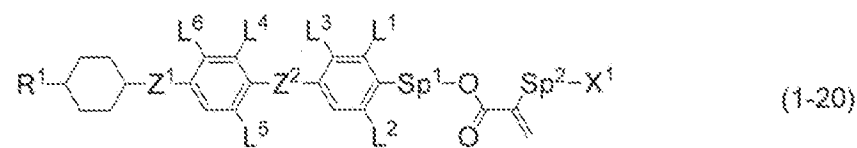
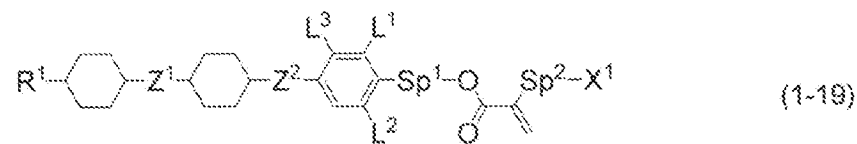
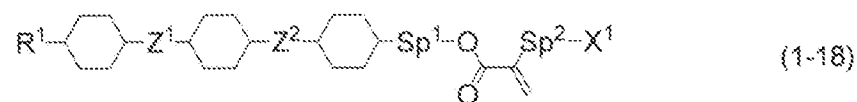
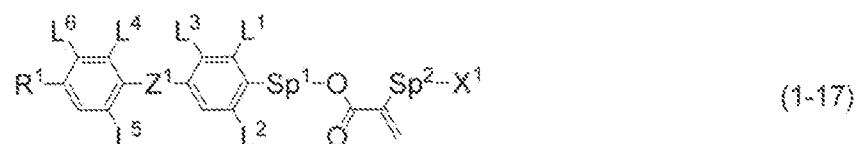
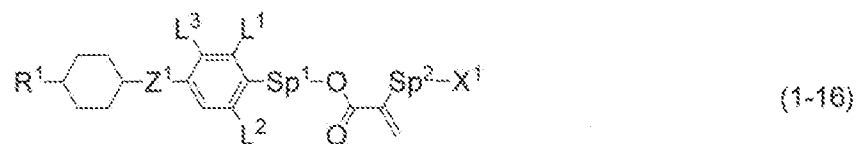
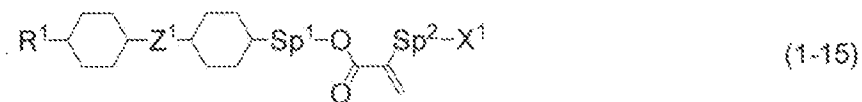
Sp^1 は、単結合または炭素数 1 から 5 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数 1 から 5 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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

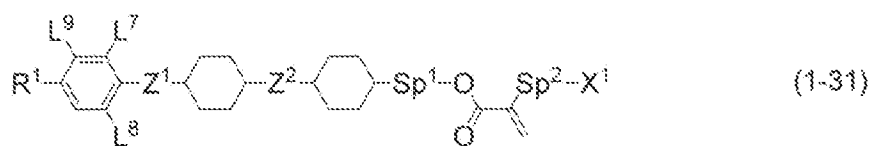
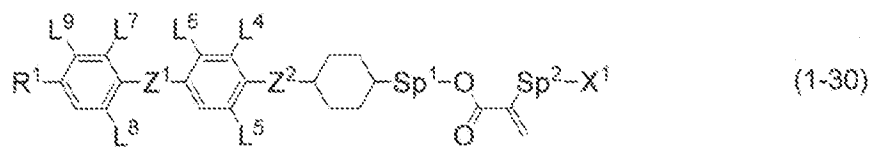
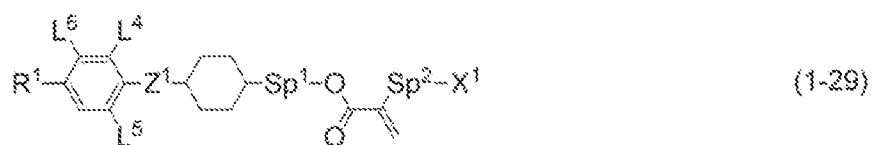
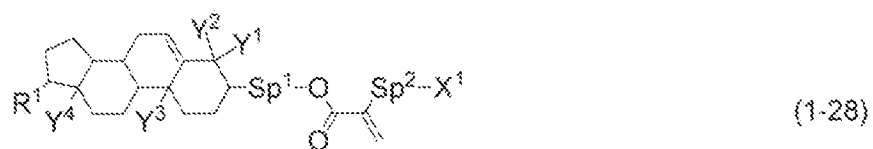
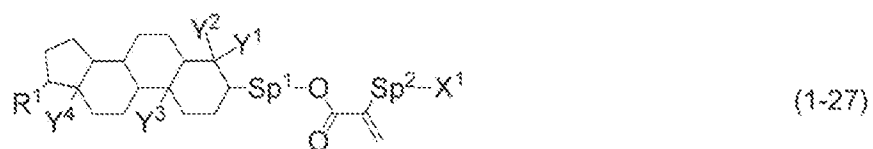
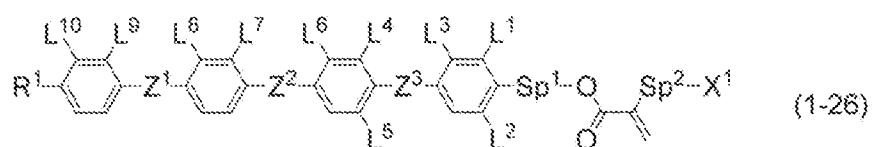
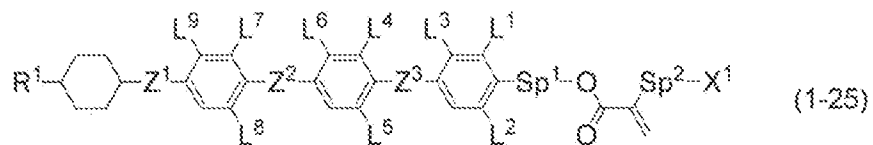
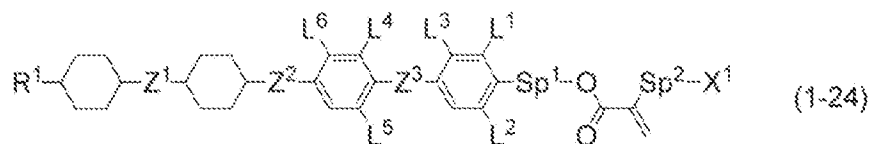
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数 1 から 5 のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

[0027] 項 7. 式 (1-15) から式 (1-31) のいずれか 1 つで表される、項 1 から 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

[化47]



[化48]



式(1-15)から式(1-31)において、

R¹は、炭素数1から10のアルキル、炭素数2から10のアルケニル、ま

たは炭素数 1 から 9 のアルコキシであり、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合または $-(CH_2)_2-$ であり；

Sp^1 は、単結合または炭素数 1 から 5 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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数 1 から 5 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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

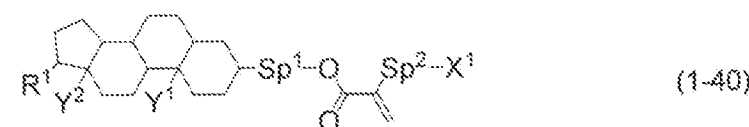
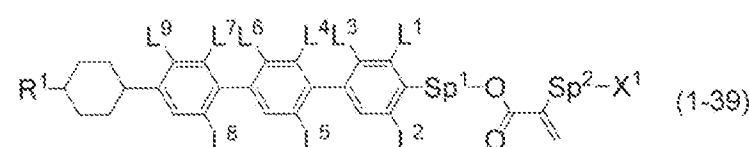
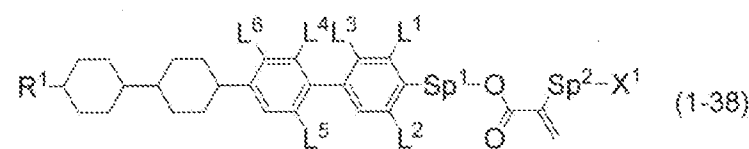
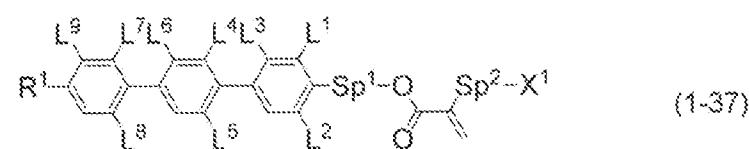
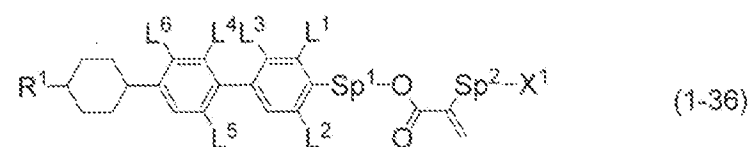
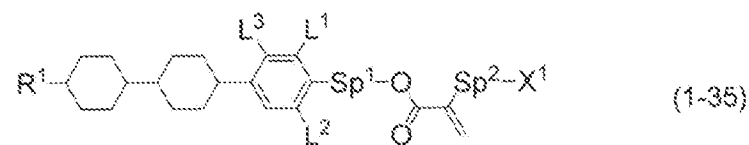
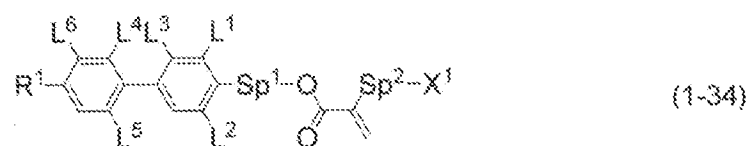
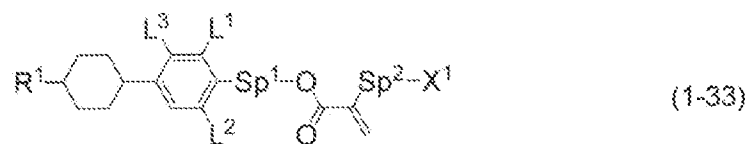
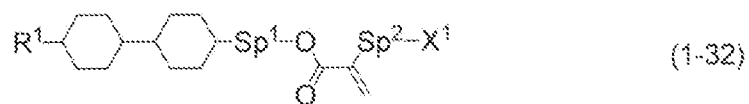
L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、および L^{10} は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、および Y^4 は独立して、水素またはメチルであり；

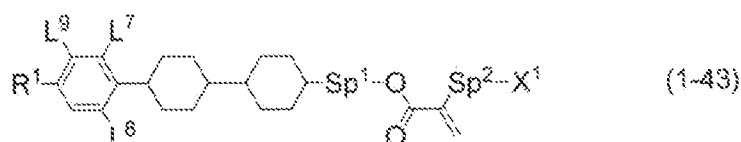
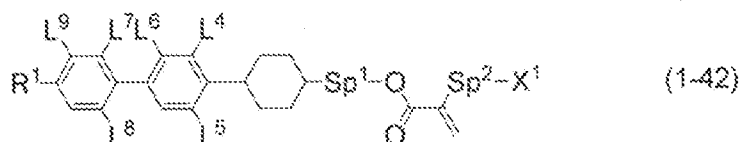
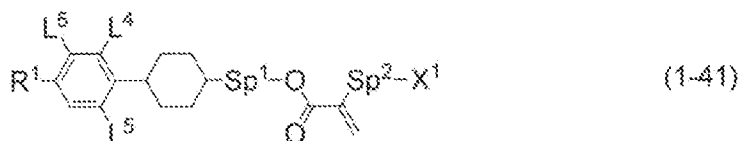
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数 1 から 4 のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

[0028] 項 8. 式 (1-32) から式 (1-43) のいずれか 1 つで表される、項 1 から 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

[化49]



[化50]



式（１－３２）から式（１－４３）において、

R^1 は、炭素数１から１０のアルキルであり；

Sp^1 は、単結合または炭素数１から５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、 $-O-$ 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、フッ素で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数１から５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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

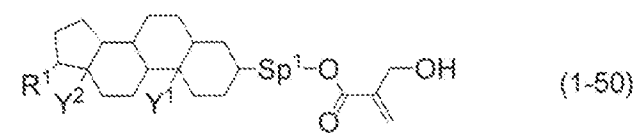
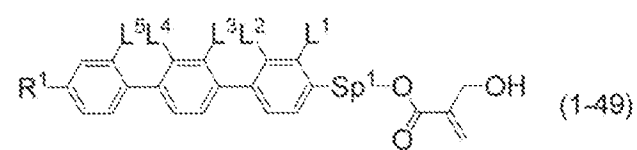
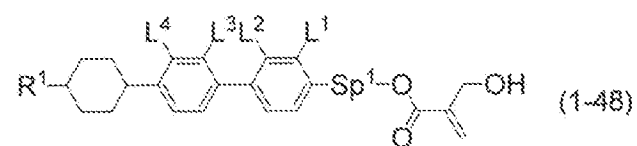
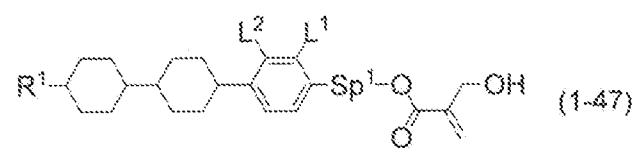
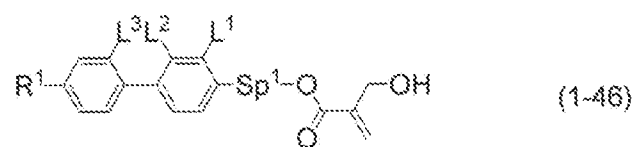
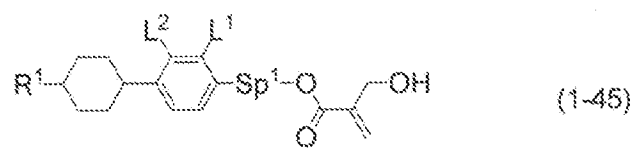
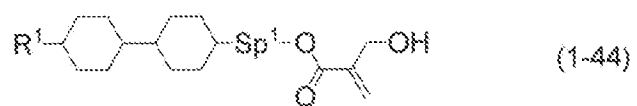
L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、および L^9 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Y^1 および Y^2 は独立して、水素またはメチルであり；

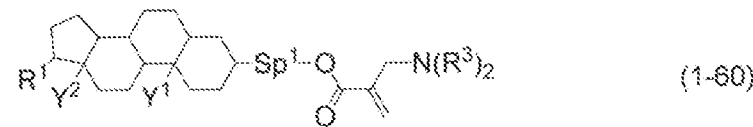
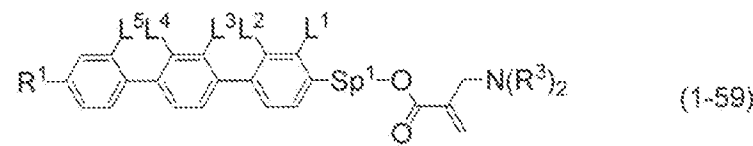
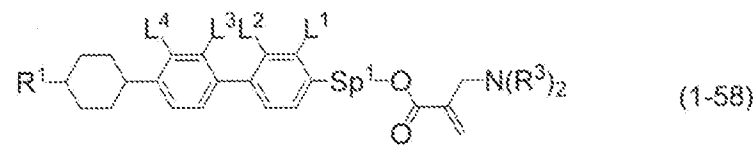
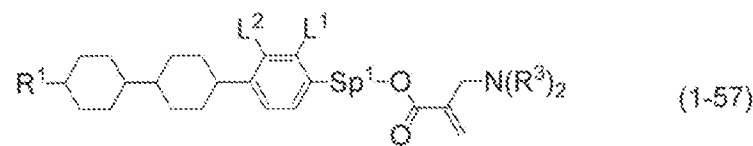
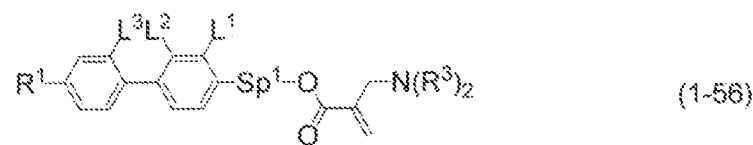
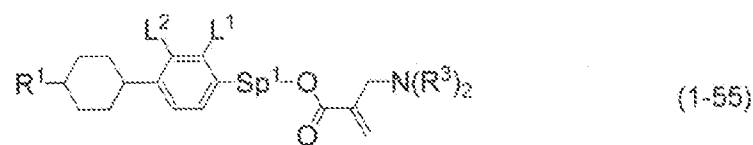
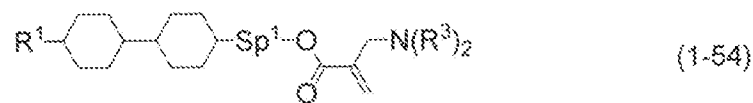
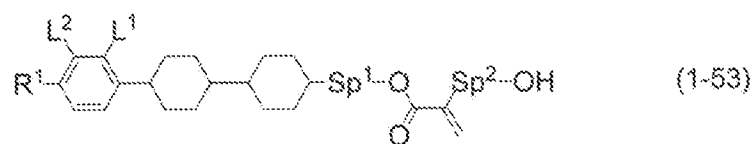
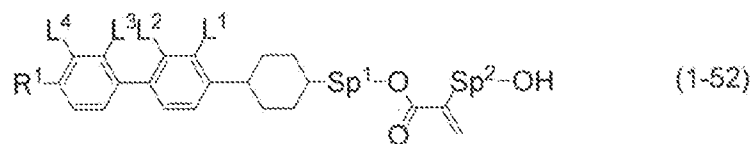
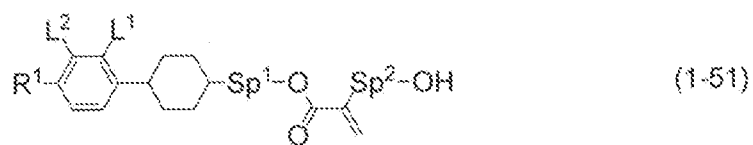
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数１から４のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよい。

[0029] 項９． 式（１－４４）から式（１－６３）のいずれか１つで表される、項１から８のいずれか１項に記載の化合物。

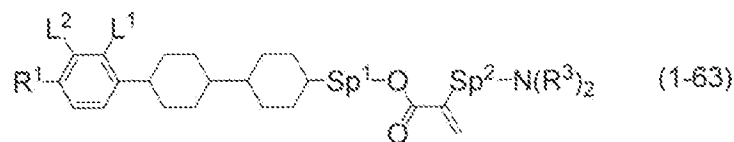
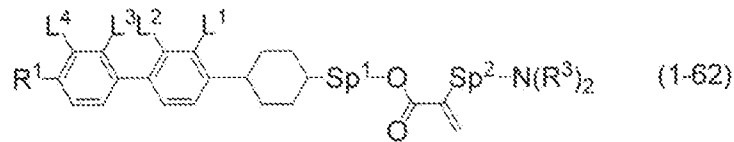
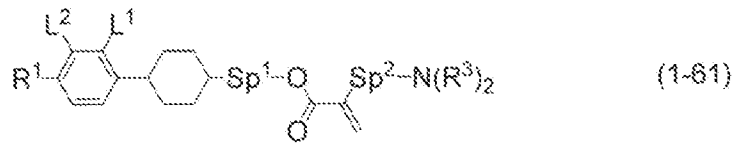
[化51]



[化52]



[化53]



式(1-44)から式(1-63)において、

R^1 は、炭素数1から10のアルキルであり；

Sp^1 は、単結合または炭素数1から3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、 $-\text{O}-$ 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、フッ素で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数1から5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、 $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、および L^5 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

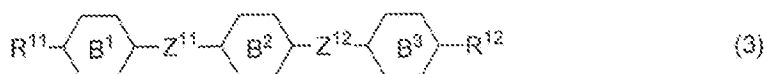
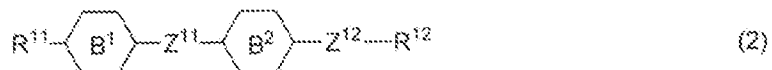
Y^1 および Y^2 は独立して、水素またはメチルであり；

R^3 は、水素、メチルまたはエチルである。

[0030] 項10. 項1から9のいずれか1項に記載の化合物の少なくとも1つを含有する液晶組成物。

[0031] 項11. 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、項10に記載の液晶組成物。

[化54]



式(2)から式(4)において、

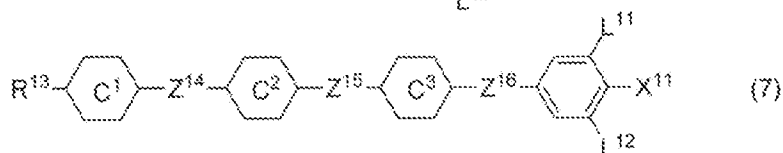
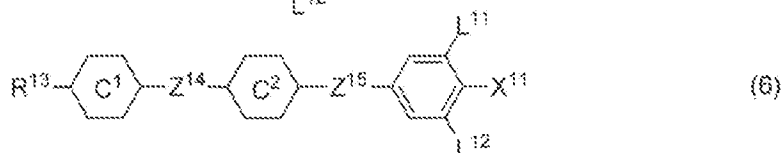
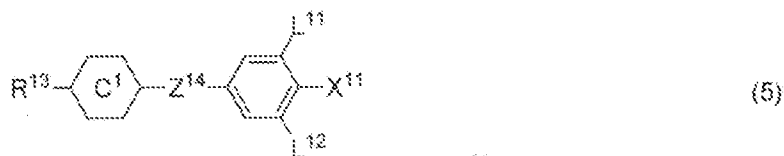
R^{11} および R^{12} は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

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、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、または $-\text{COO}-$ である。

[0032] 項12. 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、項10または11に記載の液晶組成物。

[化55]



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；

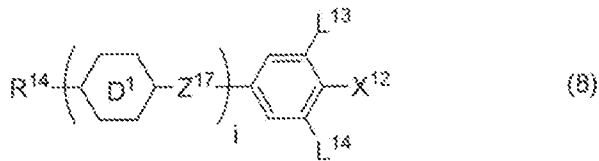
環 C^1 、環 C^2 、および環 C^3 は独立して、１，４－シクロヘキシレン、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられてもよい１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、またはピリミジン－２，５－ジイルであり；

Z^{14} 、 Z^{15} 、および Z^{16} は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、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。

[0033] 項１３． 式（８）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、項１０または１１に記載の液晶組成物。

[化56]



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；

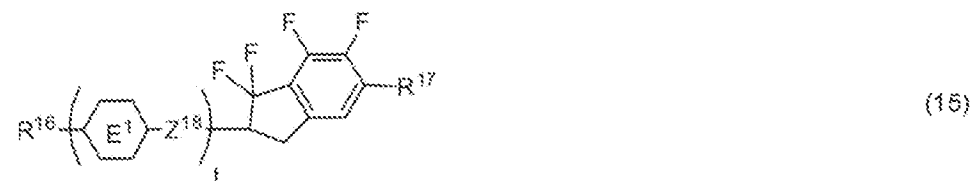
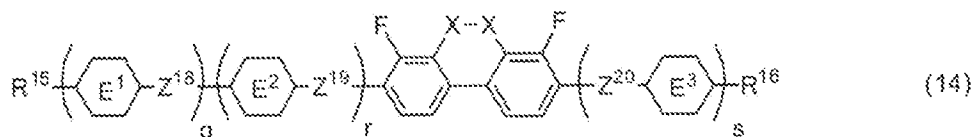
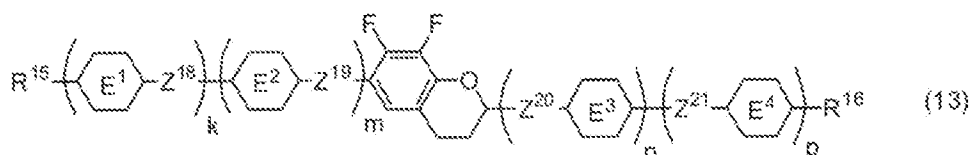
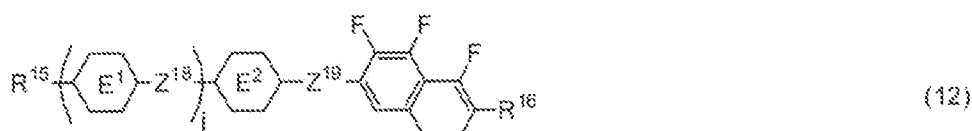
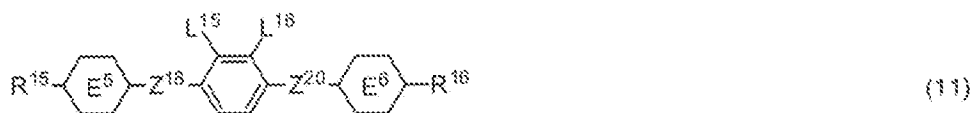
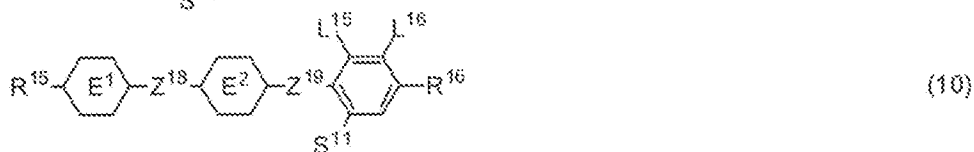
Z^{17} は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

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。

[0034] 項１４． 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、項１０または１１に記載の液晶組成物。

[化57]



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 $-\text{CH}_2-$ 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；

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 $-\text{CH}_2-$ 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；

環E¹、環E²、環E³、および環E⁴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、-(CH₂)₂-、-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；

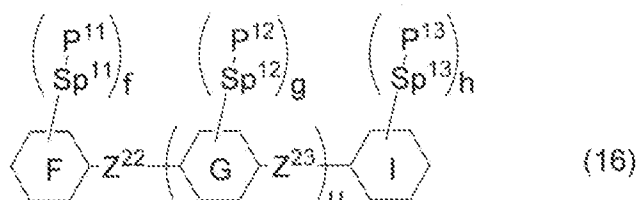
S¹¹は、水素またはメチルであり；

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。

[0035] 項15. 式(16)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの重合性化合物を含有する、項10から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[化58]



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

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；

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-(CH₂)₂-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；

P¹¹、P¹²、およびP¹³は独立して、重合性基であり；

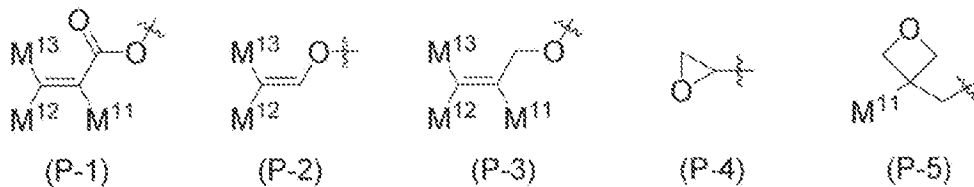
S_p¹¹、S_p¹²、およびS_p¹³は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの-CH₂-は、-O-、-COO-、-OCO-、または-OCOO-で置き換えられてもよく、少なくとも1つの-(CH₂)₂-は、-CH=CH-または-C≡C-で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

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。

[0036] 項16. 項15に記載の式(16)において、 P^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} が独立して式(P-1)から式(P-5)で表される基の群から選択される重合性基である、項15に記載の液晶組成物。

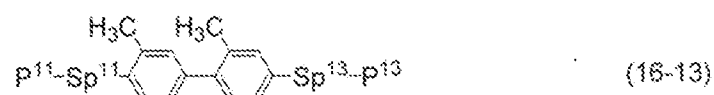
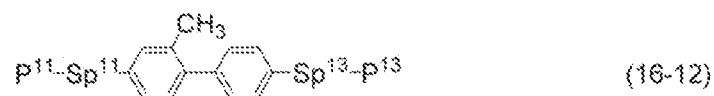
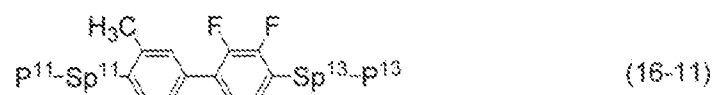
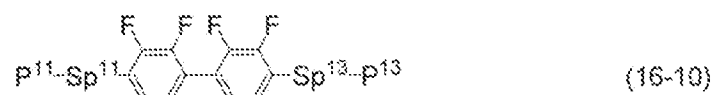
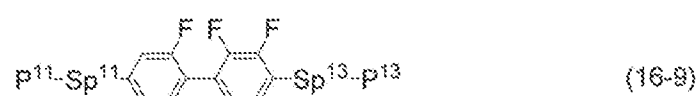
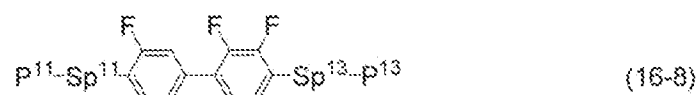
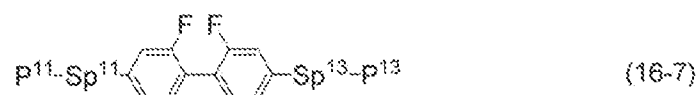
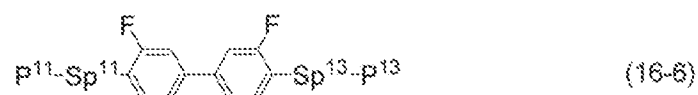
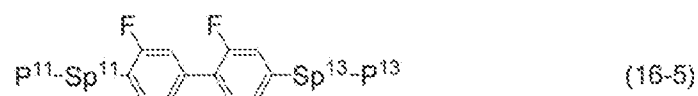
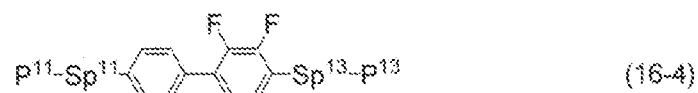
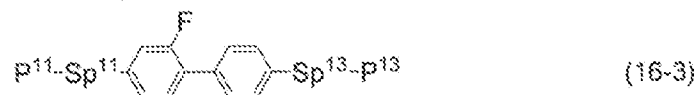
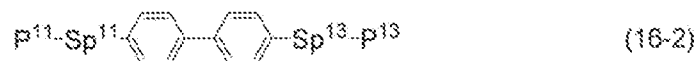
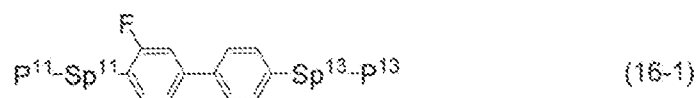
[化59]



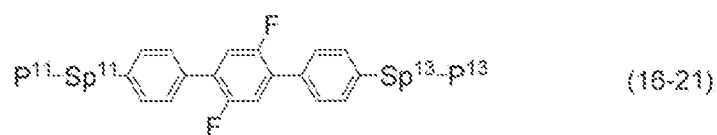
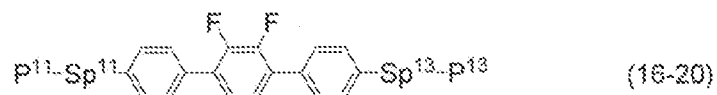
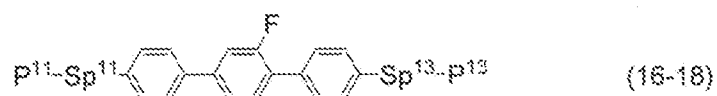
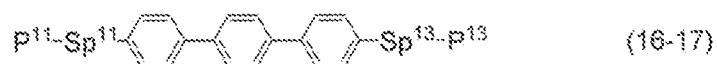
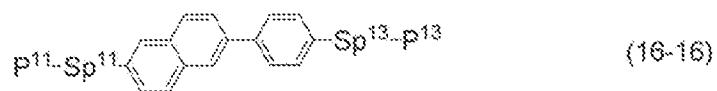
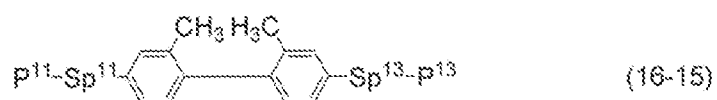
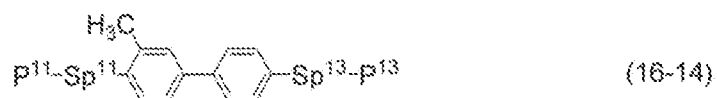
式(P-1)から式(P-5)において、 M^{11} 、 M^{12} 、および M^{13} は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。

[0037] 項17. 式(16-1)から式(16-27)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの重合性化合物を含有する、項10から16のいずれか1項に記載の液晶組成物。

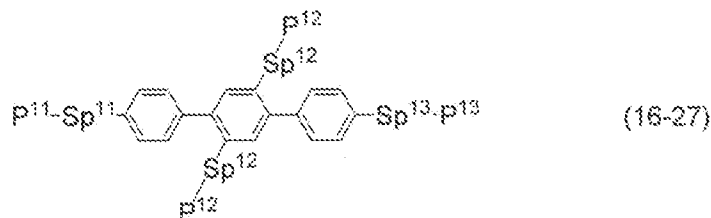
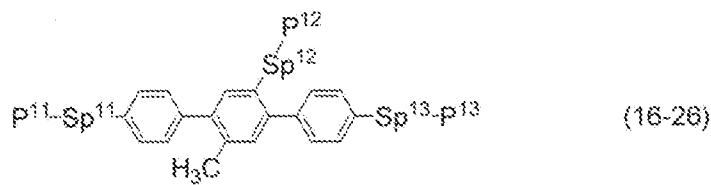
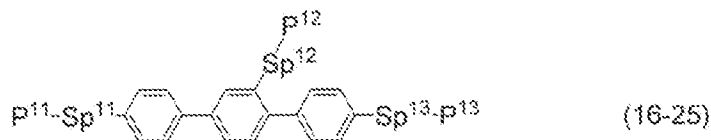
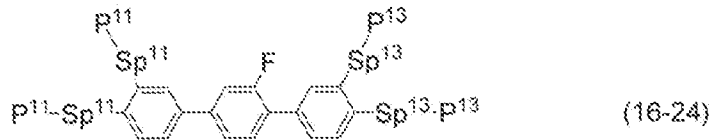
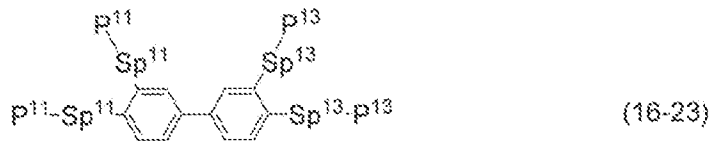
[化60]



[化61]



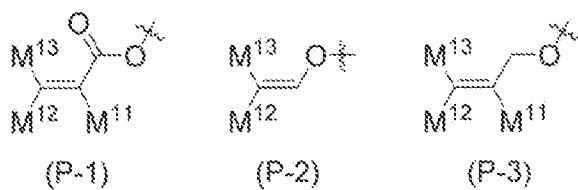
[化62]



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る重合性基であり、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：

[化63]



p^{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 $-(CH_2)_2-$ 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、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[0038] 項18. 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、および消泡剤から選択される少なくとも1つをさらに含有する、項10から17のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0039] 項19. 項10から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を少なくとも1つ含有する液晶表示素子。

[0040] 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製した高分子支持配向型の素子。

[0041] 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。

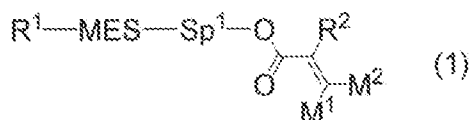
[0042] 1. 化合物(1)の態様

本発明の化合物(1)は、少なくとも1つの環より構成されるメソゲン部位と、ヒドロキシアルキル基などの極性基により置換されたアクリロイルオキシ基とを有することを特徴とする。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するので有用である。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。

[0043] 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 、MES、 Sp^1 、 R^2 、 M^1 、または M^2 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。

[化64]



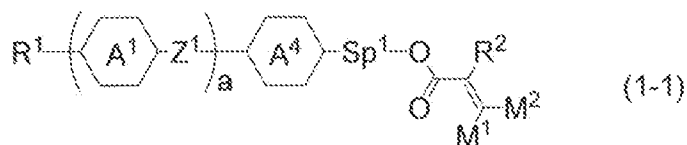
[0044] 式(1)において、 R^1 は、炭素数1から15のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ または $-S-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

[0045] 好ましい R^1 は、炭素数1から15のアルキル、炭素数2から15のアルケニル、炭素数1から14のアルコキシ、または炭素数2から14のアルケニルオキシである。さらに好ましい R^1 は、炭素数1から10のアルキル、炭素数2から10のアルケニル、または炭素数1から9のアルコキシである。特に好ましい R^1 は、炭素数1から10のアルキルである。

[0046] 式(1)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。メソゲン基は、当業者に周知である。メソゲン基は、化合物が液晶相（中間相）を有するとき、液晶相の形成に寄与する部分を意味する。化合物（1）の好ましい例は、化合物（1-1）である。

[化65]



[0047] 好ましい環A¹または環A⁴は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-シクロヘキセニレン、1, 4-フェニレン、ナフタレン-2, 6-ジイル、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、テトラヒドロピラン-2, 5-ジイル、1, 3-ジオキサ-2, 5-ジイル、ピリミジン-2, 5-ジイル、ピリジン-2, 5-ジイル、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3, 17-ジイル、または2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から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。さらに好ましい環A¹または環A⁴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。特に好ましい環A¹または環A⁴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-ジイルであり、これらの環において、例えば

、1-メチル-1,4-シクロヘキシレン、2-エチル-1,4-シクロヘキシレン、2-フルオロ-1,4-フェニレンのように、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。

[0048] 式(1-1)において、 Z^1 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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。

[0049] 好ましい Z^1 は、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。さらに好ましい Z^1 は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ である。特に好ましい Z^1 は、単結合である。

[0050] 式(1-1)において、 a は、0、1、2、3、または4である。好ましい a は、0、1、2、または3である。さらに好ましい a は、0、1、または2である。

[0051] 式(1)において、 Sp^1 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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。

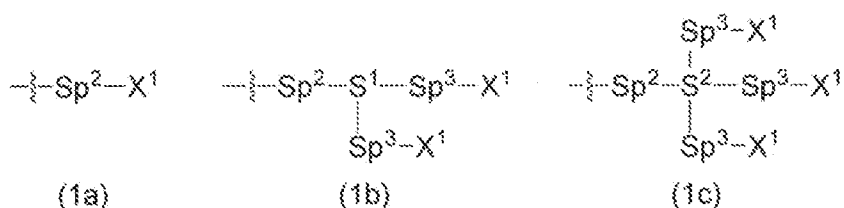
[0052] 好ましい Sp^1 は、単結合、炭素数1から5のアルキレン、または1つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数1から5のアルキレンである。さらに好ましい Sp^1 は、単結合、炭素数1から3のアルキレン、または1つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられた炭素数1から3のアルキレンである。

[0053] 式(1)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。好ましい M^1 または M^2 は、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。さらに好ましい M^1 または M^2 は、水素である。

[0054] 式(1)において、 R^2 は、式(1a)、式(1b)、または式(1c)で表される基である。好ましい R^2 は、式(1a)または式(1b)で表される基である。さらに好ましい R^2 は、式(1a)で表される基である。

[0055] [化66]



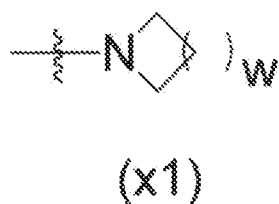
[0056] 式(1a)、式(1b)、および式(1c)において、 Sp^2 および Sp^3 は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $\text{---CH}_2\text{---}$ は、 ---O--- 、 ---NH--- 、 ---CO--- 、 ---COO--- 、 ---OCO--- 、または ---OCOO--- で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $\text{---(CH}_2)_2\text{---}$ は、 ---CH=CH--- または $\text{---C}\equiv\text{C---}$ 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。

[0057] 好ましい Sp^2 または Sp^3 は、炭素数1から7のアルキレン、または1つの $\text{---CH}_2\text{---}$ が ---O--- で置き換えられた炭素数1から5のアルキレンである。さらに好ましい Sp^2 または Sp^3 は、炭素数1から5のアルキレン、または1つの $\text{---CH}_2\text{---}$ が ---O--- で置き換えられた炭素数1から5のアルキレンである。特に好ましい Sp^2 または Sp^3 は、 $\text{---CH}_2\text{---}$ である。

[0058] 式(1a)から(1c)において、 S^1 は、 >CH--- または >N--- であり； S^2 は、 >C< または >Si< である。好ましい S^1 は、 >CH--- または >N--- であり、好ましい S^2 は、 >C< である。式(1c)よりも式(1b)の方が好ましい。

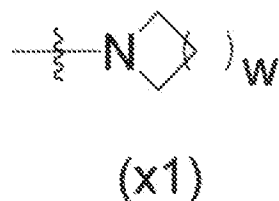
[0059] 式(1a)から(1c)において、 X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式(x1)、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、式(x1)における w は1、2、3または4である。

[化67]



[0060] 好ましい X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式(x1)、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数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 $-CH_2-$ は、 $-O-$ 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、フッ素で置き換えられてもよく、式(x1)における w は1、2、3または4である。さらに好ましい X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ である。特に好ましい X^1 は、 $-OH$ である。

[化68]

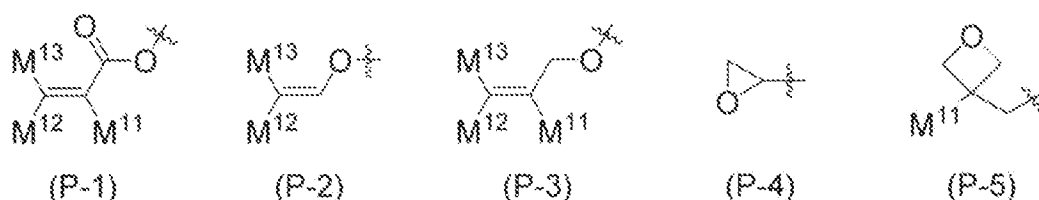


[0061] 式(2)から(15)において、液晶組成物の成分化合物が示されている。化合物(2)から(4)は小さな誘電率異方性を有する。化合物(5)か

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(15)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、あとで述べる。

[0062] 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。好ましい P^{11} 、 P^{12} 、または 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る重合性基である。さらに好ましい P^{11} 、 P^{12} 、または 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。

[化69]



[0063] 基(P-1)から基(P-5)において、 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のアルキルである。好ましい M^{11} 、 M^{12} 、または M^{13} は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましい M^{11} はメチルであり、さらに好ましい M^{12} 、または M^{13} は水素である。

[0064] $S p^{11}$ 、 $S p^{12}$ 、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 $-(CH_2)_2-$ 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、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい $S p^{11}$ 、 $S p^{12}$

2、または Sp^{13} 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。好ましい環Fまたは環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。

[0066] 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 $-(CH_2)_2-$ 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。好ましい Z^7 または Z^8 は、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ である。さ

らに好ましい Z^{22} または Z^{23} は、単結合である。

[0067] u は、0、1、または2である。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。

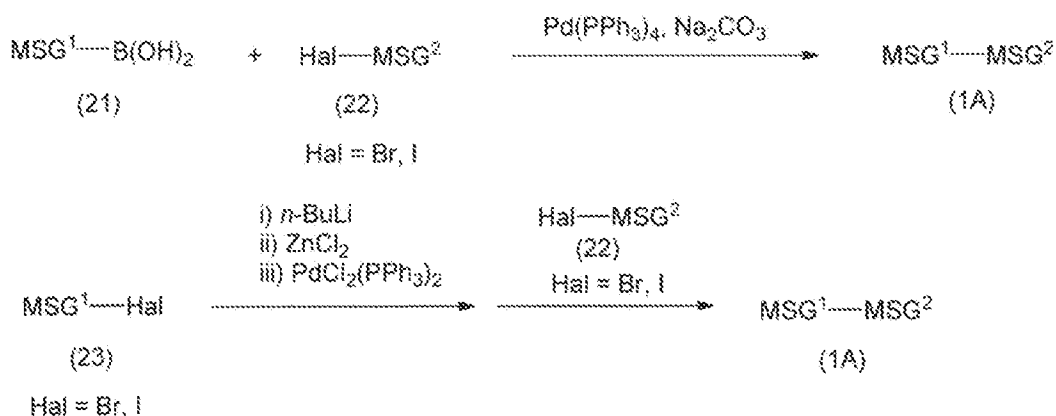
[0068] 2. 化合物(1)の合成

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。

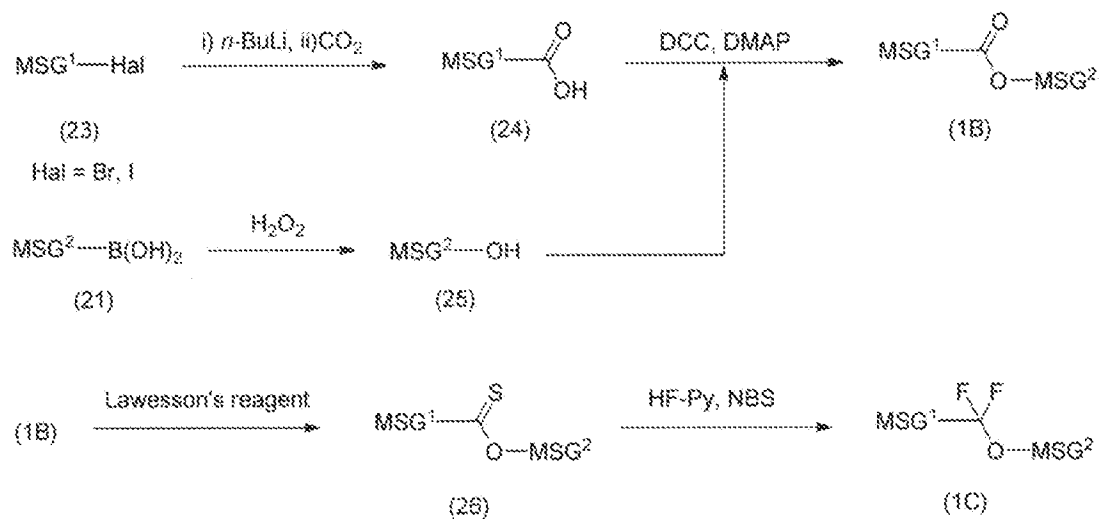
[0069] 2-1. 結合基の生成

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)から(1G)は、化合物(1)または化合物(1)の中間体に相当する。

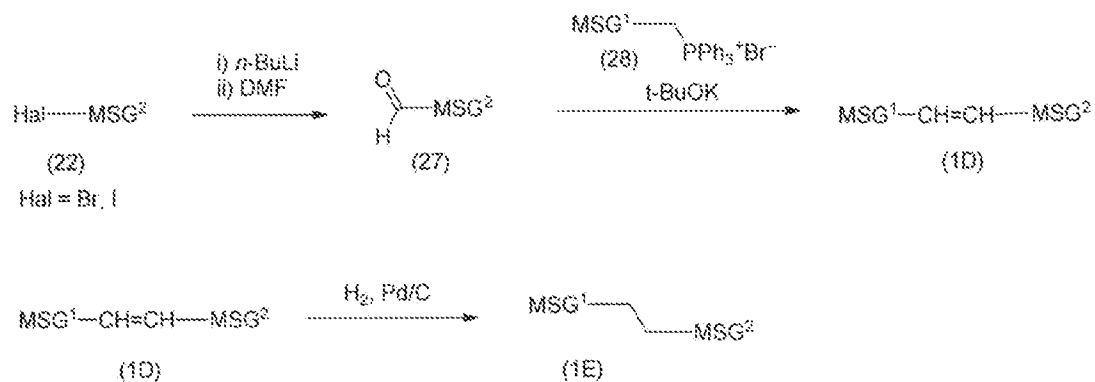
[0070] [化70]



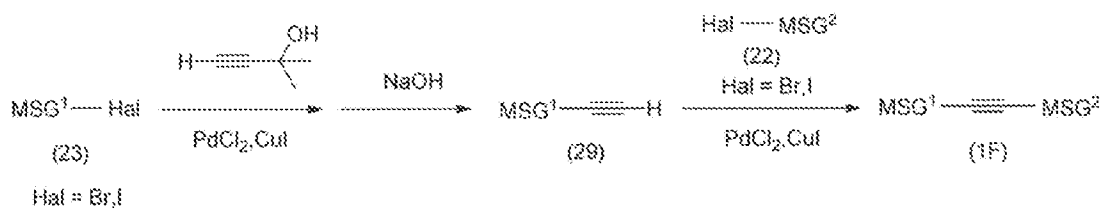
[0071] [化71]



[0072] [化72]

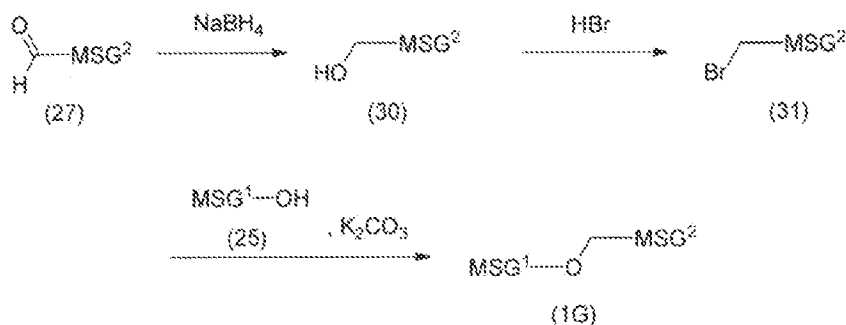


[0073] [化73]

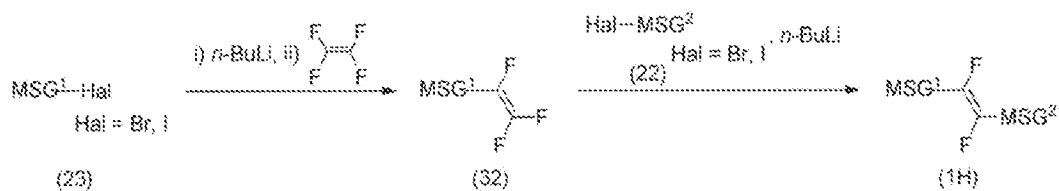


[0074]

[化74]



[0075] [化75]



[0076] (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。

[0077] (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。

[0078] (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、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ を有する化合物（1 C）を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827.を参照。化合物（1 C）は化合物（2 6）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. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768.を参照。この方法によって $-\text{OCF}_2-$ を有する化合物も合成する。

[0079] (I V) $-\text{CH}=\text{CH}-$ の生成

化合物（2 2）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（2 7）を得る。ホスホニウム塩（2 8）とカリウムt-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（2 7）と反応させて化合物（1 D）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。

[0080] (V) $-(\text{CH}_2)_2-$ の生成

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

[0081] (V I) $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 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（2 3）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（2 9）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（2 9）を化合物（2 2）と反応させて、化合物（1 F）を合成する。

[0082] (V I I) $-\text{CH}_2\text{O}-$ と $-\text{OCH}_2-$ の生成

化合物（2 7）を水素化ホウ素ナトリウムで還元して化合物（3 0）を得る。これを臭化水素酸で臭素化して化合物（3 1）を得る。炭酸カリウムの存在下、化合物（2 5）と化合物（3 1）を反応させて、化合物（1 G）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。

[0083] (V I I I) $-\text{CF}=\text{CF}-$ の生成

化合物（2 3）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。

[0084] 2-2. 環A¹および環A²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。

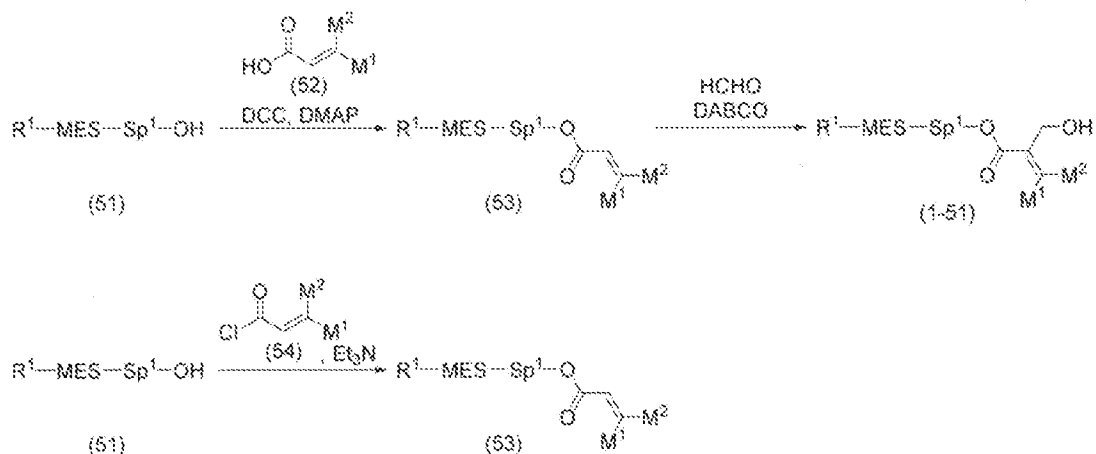
[0085] 2-3. 合成例

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、R¹、MES、M¹、およびM²の定義は、前記と同一である。

[0086] R²が式(1a)で表される基であり、Sp²が-CH₂-であり、X¹が-OHである化合物(1-51)は、以下の方法で合成できる。化合物(51)と化合物(52)を、DCCおよびDMAPの存在下で反応させ、化合物(53)を得る。化合物(53)とホルムアルデヒドを、DABCO(1,4-ジアザビスシクロ[2.2.2]オクタン)の存在下で反応させる事によって、化合物(1-51)へと導く事ができる。なお、化合物(53)は、化合物(51)と化合物(54)をトリエチルアミンなどの塩基の存在下で反応させる事によっても合成できる。

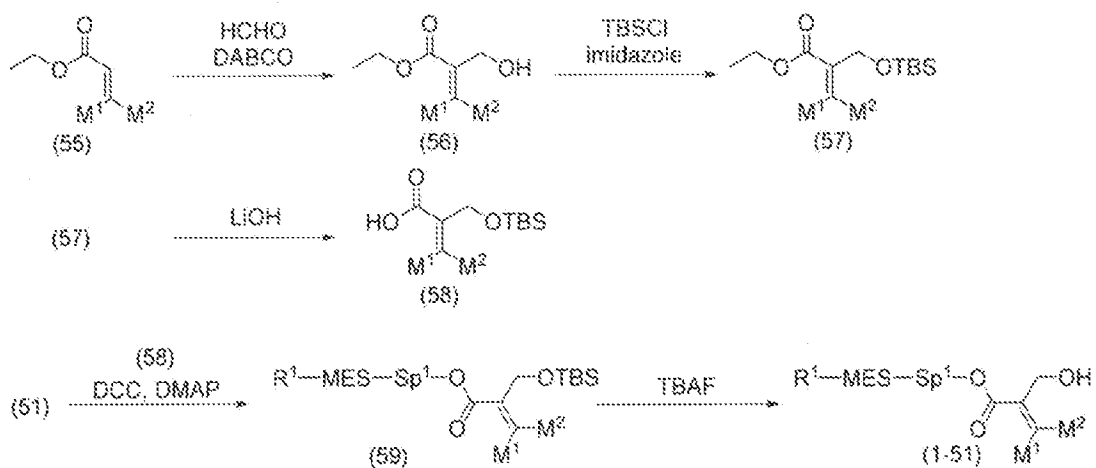
[0087]

[化76]



[0088] 化合物（１－５１）は、以下の方法でも合成できる。化合物（５５）とホルムアルデヒドを、ＤＡＢＣＯの存在下で反応させ、化合物（５６）を得る。次にｔ－ブチルジメチルシリルクロリドとイミダゾールを作用させて化合物（５７）を得た後、水酸化リチウムなどの塩基で加水分解させて化合物（５８）を得る。化合物（５１）と化合物（５８）をＤＣＣおよびＤＭＡＰの存在下で反応させ、化合物（５９）を得た後、ＴＢＡＦ（テトラブチルアンモニウムフルオリド）を用いて脱保護させる事により、化合物（１－５１）へと導く事ができる。

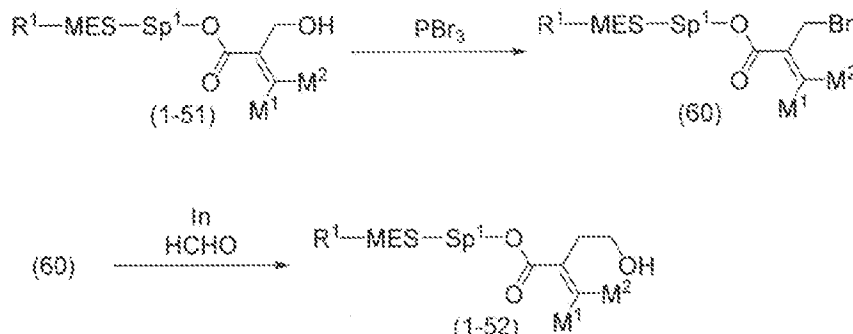
[0089] [化77]



[0090] R^2 が式（１ａ）で表される基であり、 Sp^2 が $-(CH_2)_2-$ であり、 X^1 が $-OH$ である化合物（１－５２）は、以下の方法で合成できる。化合物（

1-51) に三臭化リンを作用させて、化合物(60)を得る。次に化合物(60)にインジウムを作用させた後、ホルムアルデヒドと反応させる事によって、化合物(1-52)へと導く事ができる。

[0091] [化78]



[0092] 3. 液晶組成物

本発明の液晶組成物は、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、液晶分子の配向を制御することができる。この組成物は、化合物(1)を成分Aとして含み、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(15)である。この組成物は、化合物(2)から(15)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。

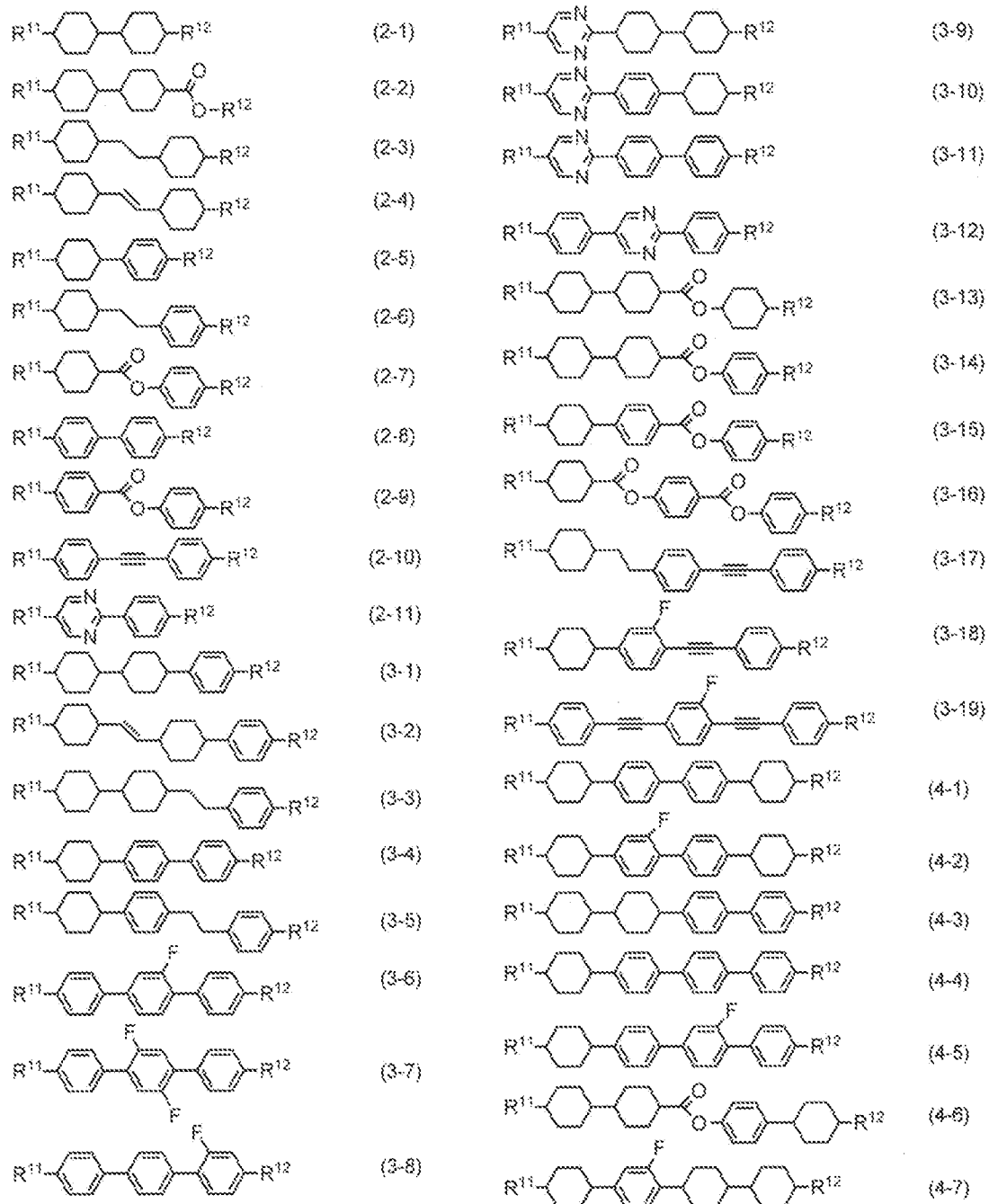
[0093] 化合物(1)の好ましい割合は、紫外線に対して高い安定性を維持するために約0.01重量%以上であり、液晶組成物へ溶解させるために約5重量%以下である。さらに好ましい割合は約0.05重量%から約2重量%の範

囲である。最も好ましい割合は、約 0.05 重量%から約 1 重量%の範囲である。

[0094] 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。

[0095]

[化79]



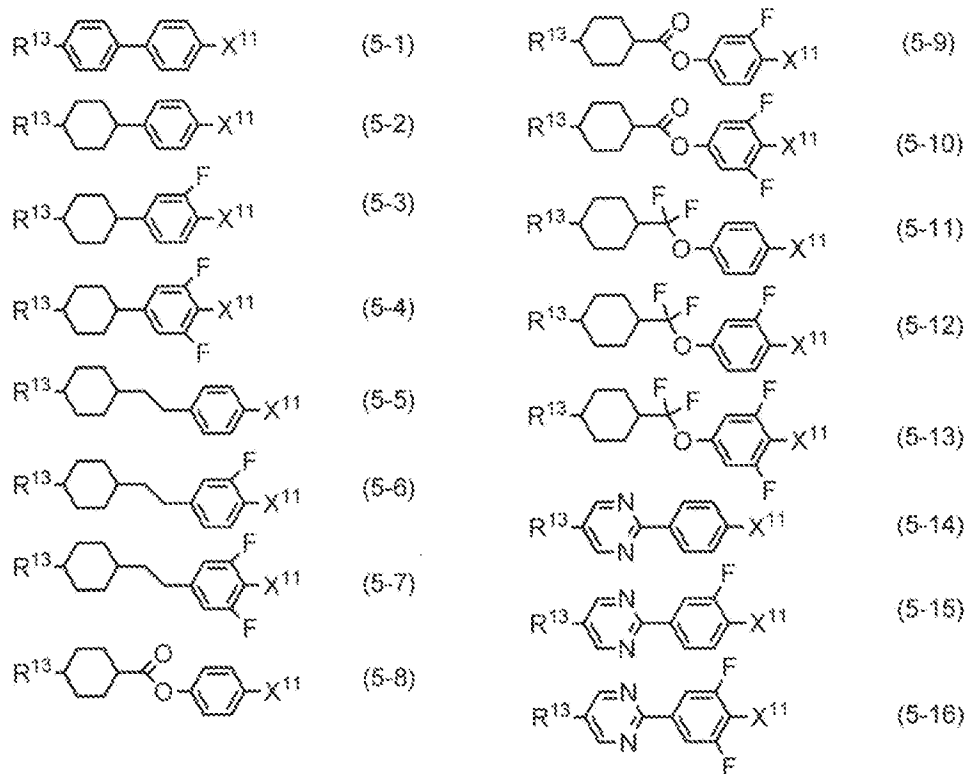
[0096] 成分Bは、誘電率異方性の絶対値が小さいので、中性に近い化合物である。化合物(2)は、主として粘度の減少または光学異方性の調整に効果がある。化合物(3)および(4)は、上限温度を高くすることによってネマチック相の温度範囲を広げる効果、または光学異方性の調整に効果がある。

[0097] 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。

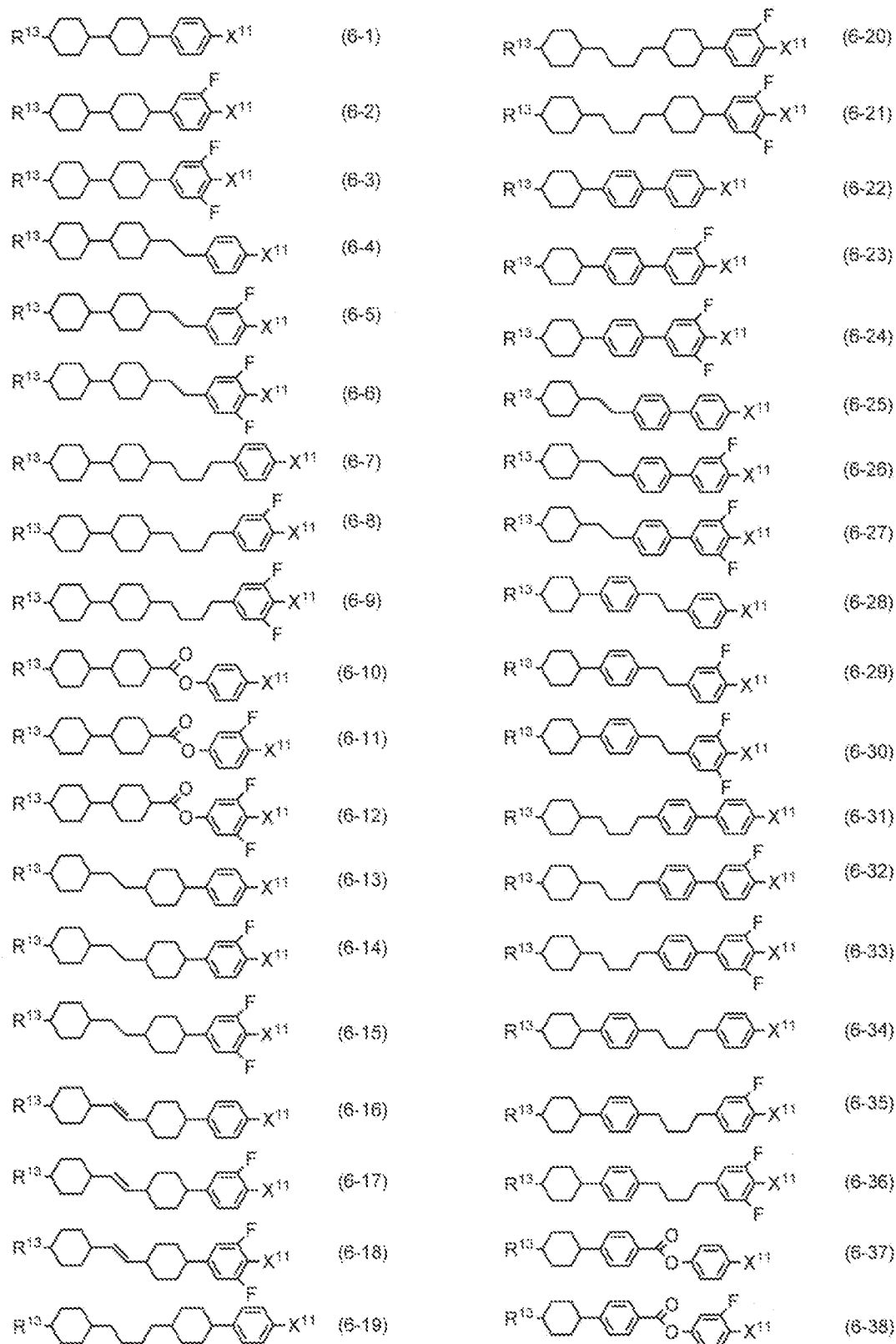
[0098] 成分Cは、右末端にハロゲンまたはフッ素含有基を有する化合物である。成分Cの好ましい例として、化合物(5-1)から(5-16)、化合物(6-1)から(6-113)、化合物(7-1)から(7-57)を挙げることができる。成分Cの化合物において、 R^{13} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^{11} は、フッ素、塩素、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、または $-OCF_2CHFCF_3$ である。

[0099] [化80]



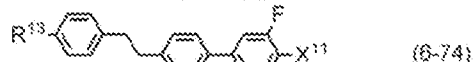
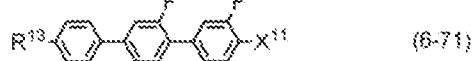
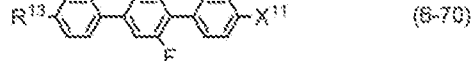
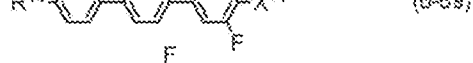
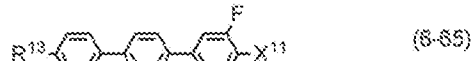
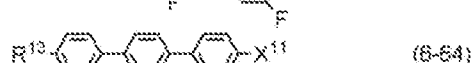
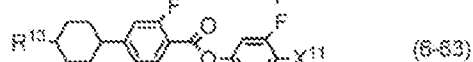
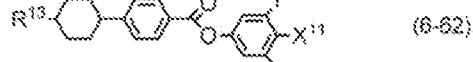
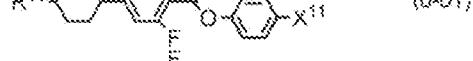
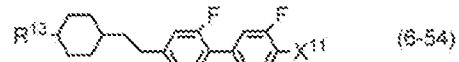
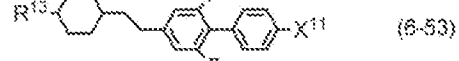
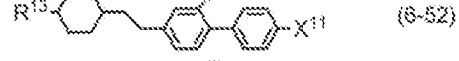
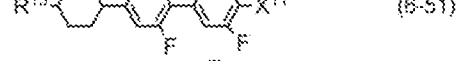
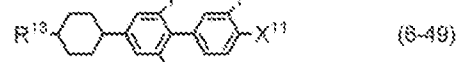
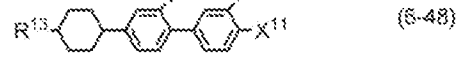
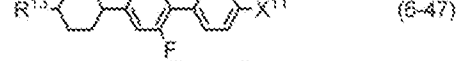
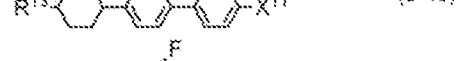
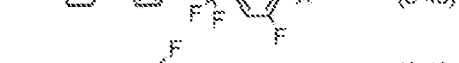
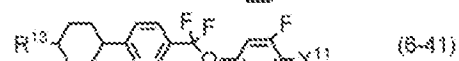
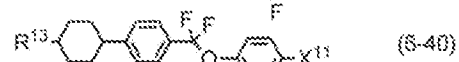
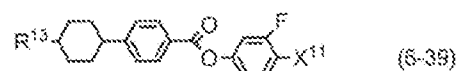
[0100]

[化81]

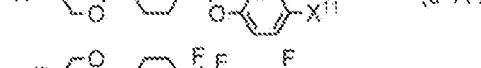
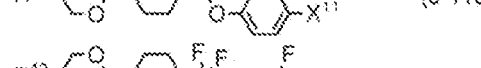
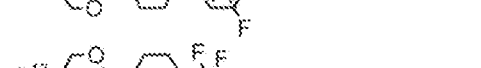
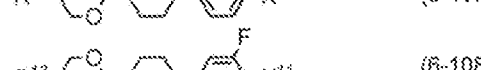
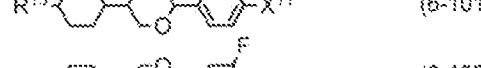
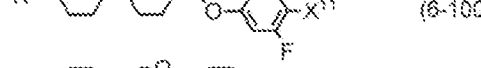
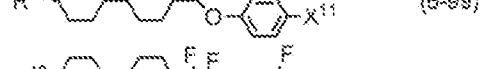
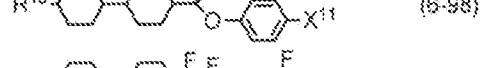
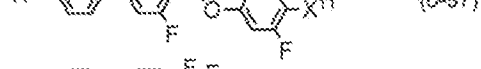
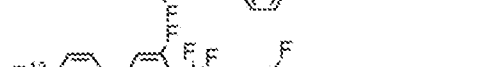
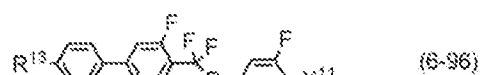
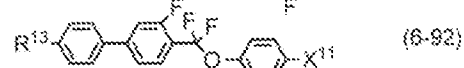
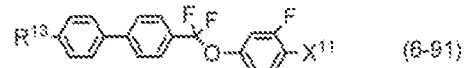
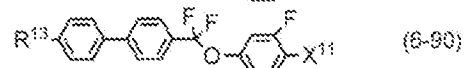
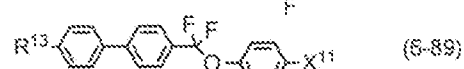
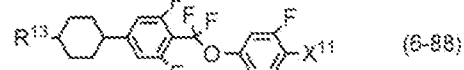
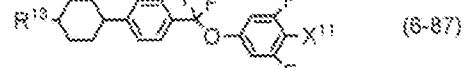
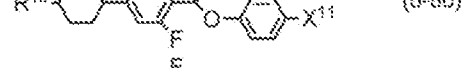
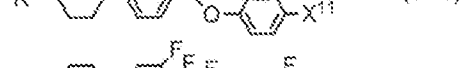
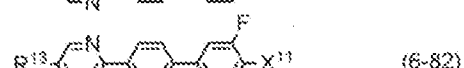


[0101]

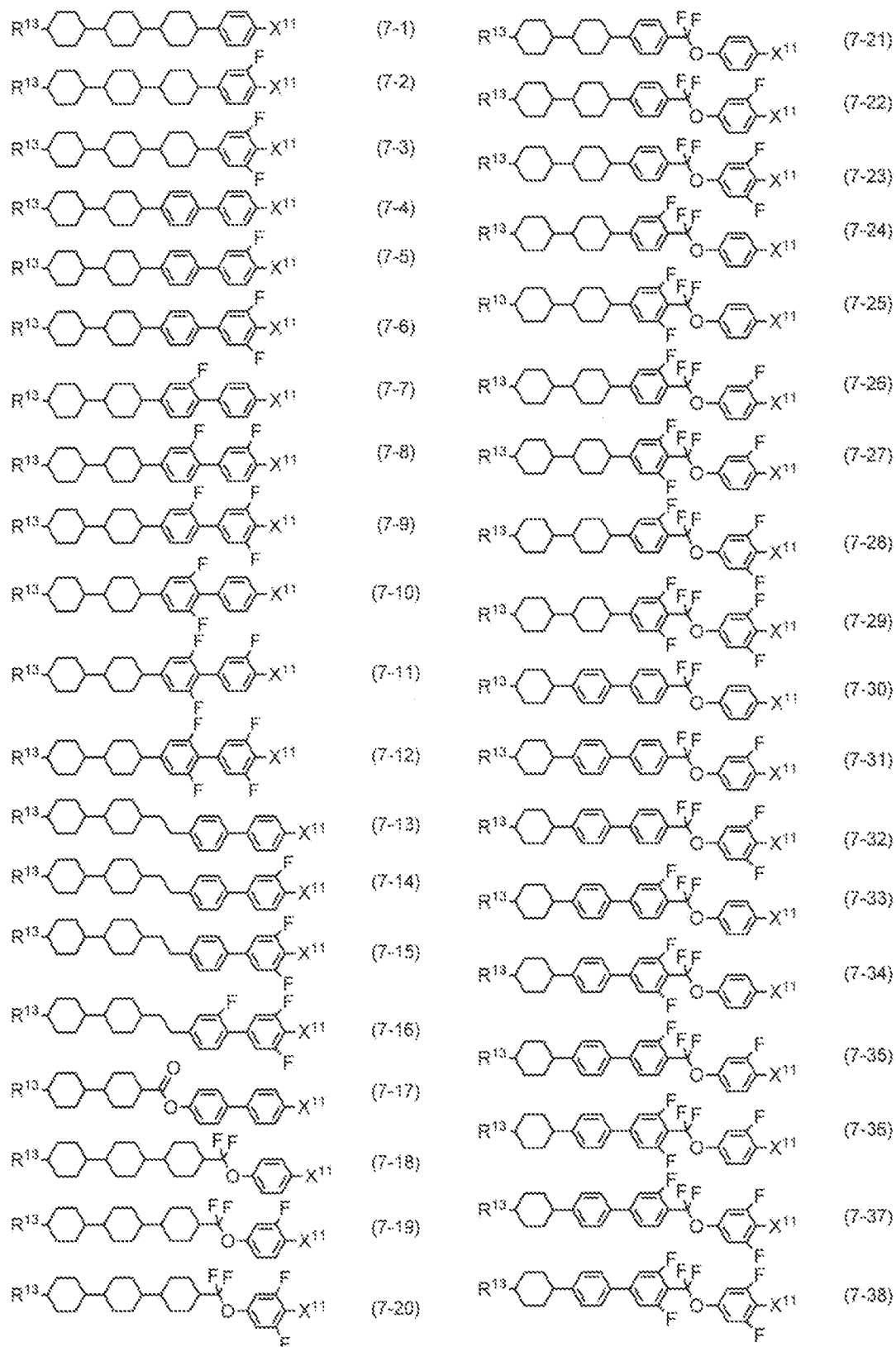
[化82]



[0102] [化83]

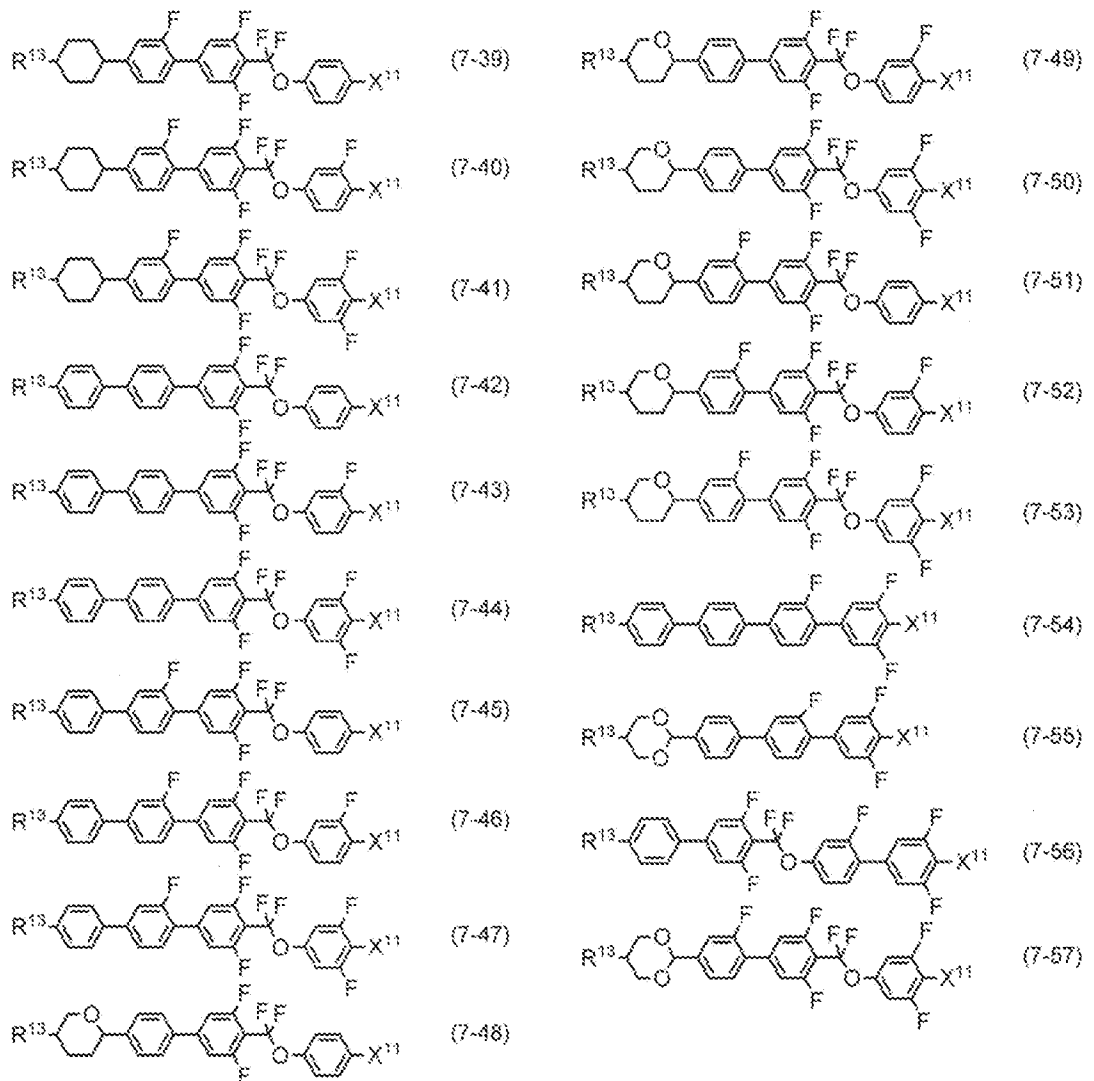


[0103] [化84]



[0104]

[化85]

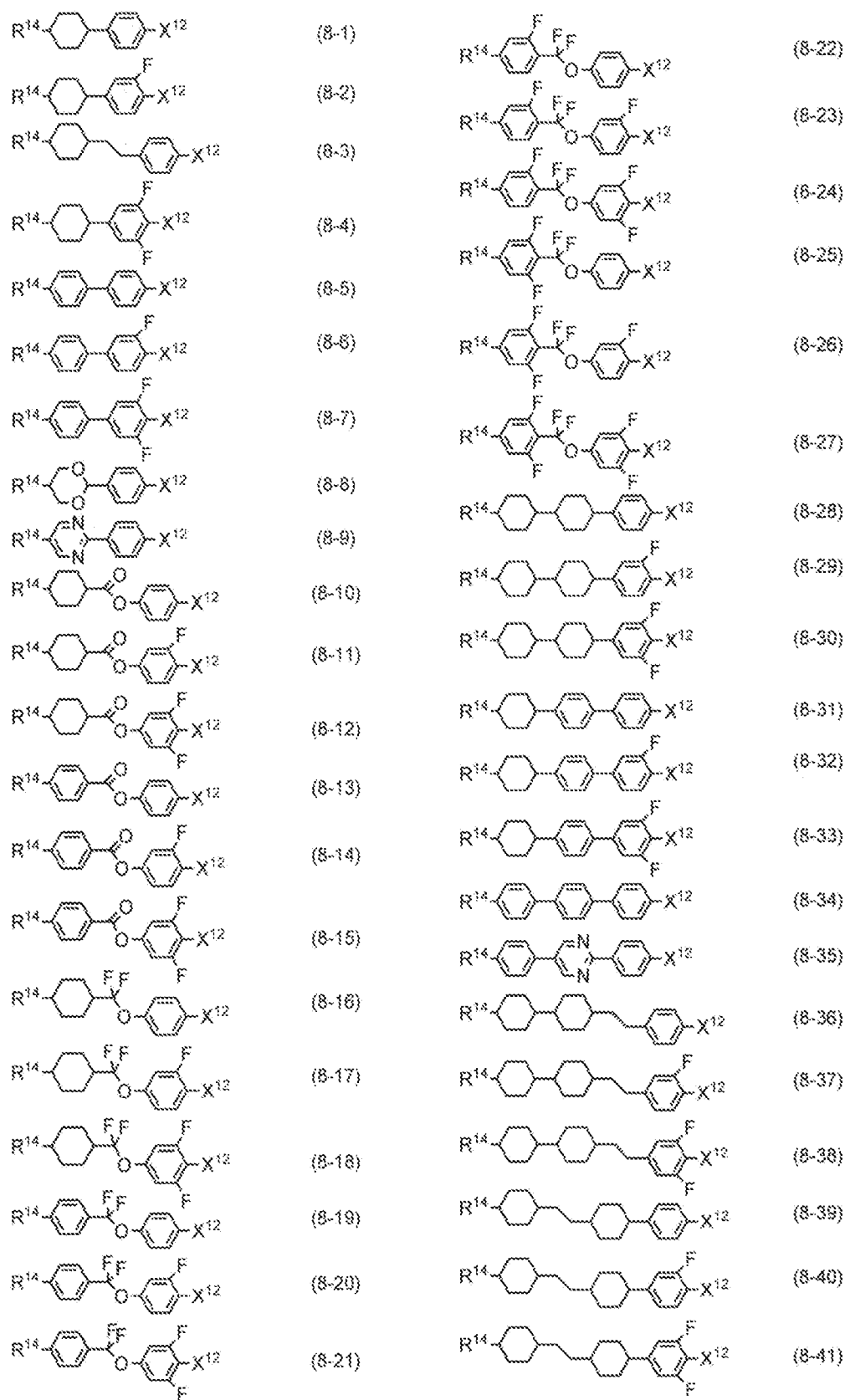


[0105] 成分Cは、誘電率異方性が正であり、熱、光などに対する安定性が非常に優れているので、IPS、FFS、OCBなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分Cの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1重量%から99重量%の範囲が適しており、好ましくは10重量%から97重量%の範囲、さらに好ましくは40重量%から95重量%の範囲である。成分Cを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Cの含有量は液晶組成物の重量に基づいて30重量%以下が好ましい。成分Cを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧-透過率曲線を調整することが可能となる。

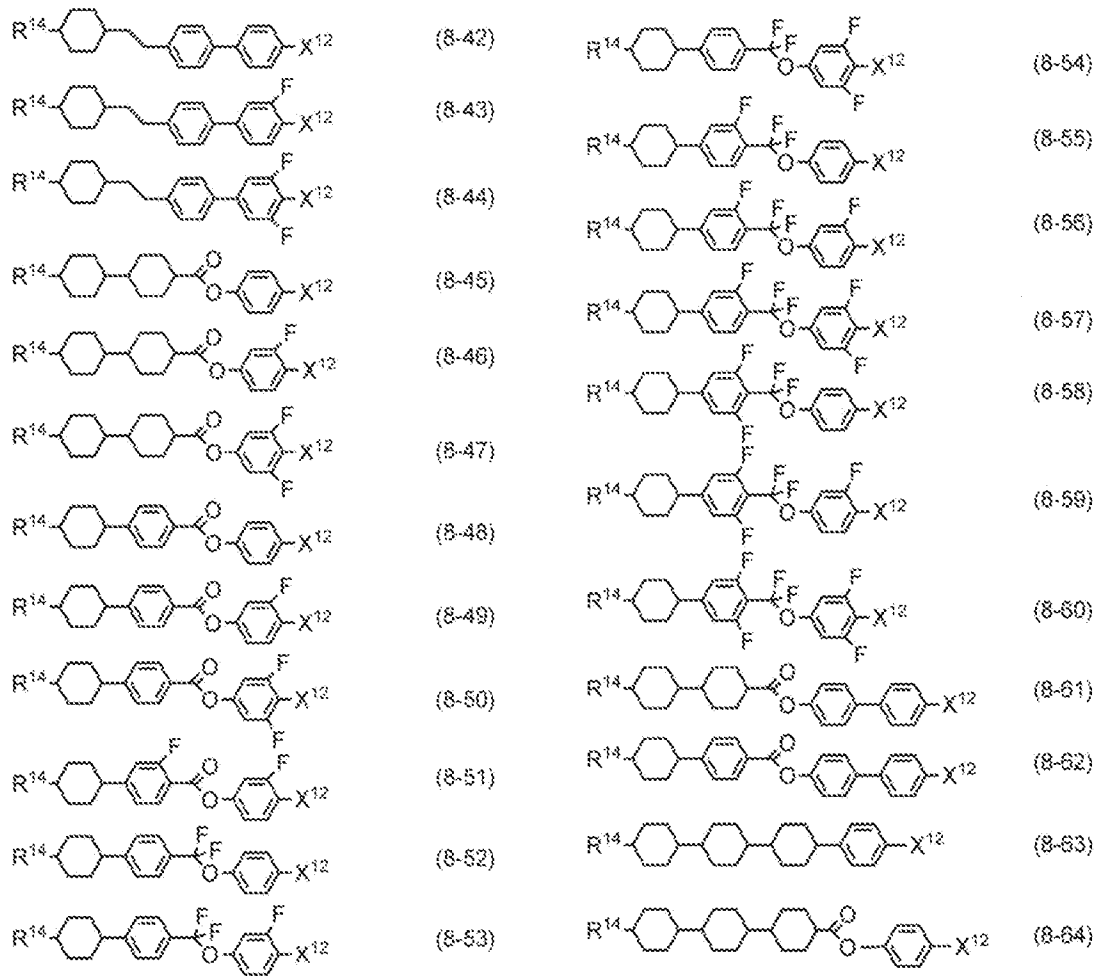
[0106] 成分Dは、右末端基が $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ である化合物(8)である。成分Dの好ましい例として、化合物(8-1)から(8-64)を挙げることができる。成分Dの化合物において、 R^{14} は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく； $-X^{12}$ は $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ である。

[0107]

[化86]



[0108] [化87]



[0109] 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、という効果がある。成分Dは、素子の電圧－透過率曲線の調整にも有用である。

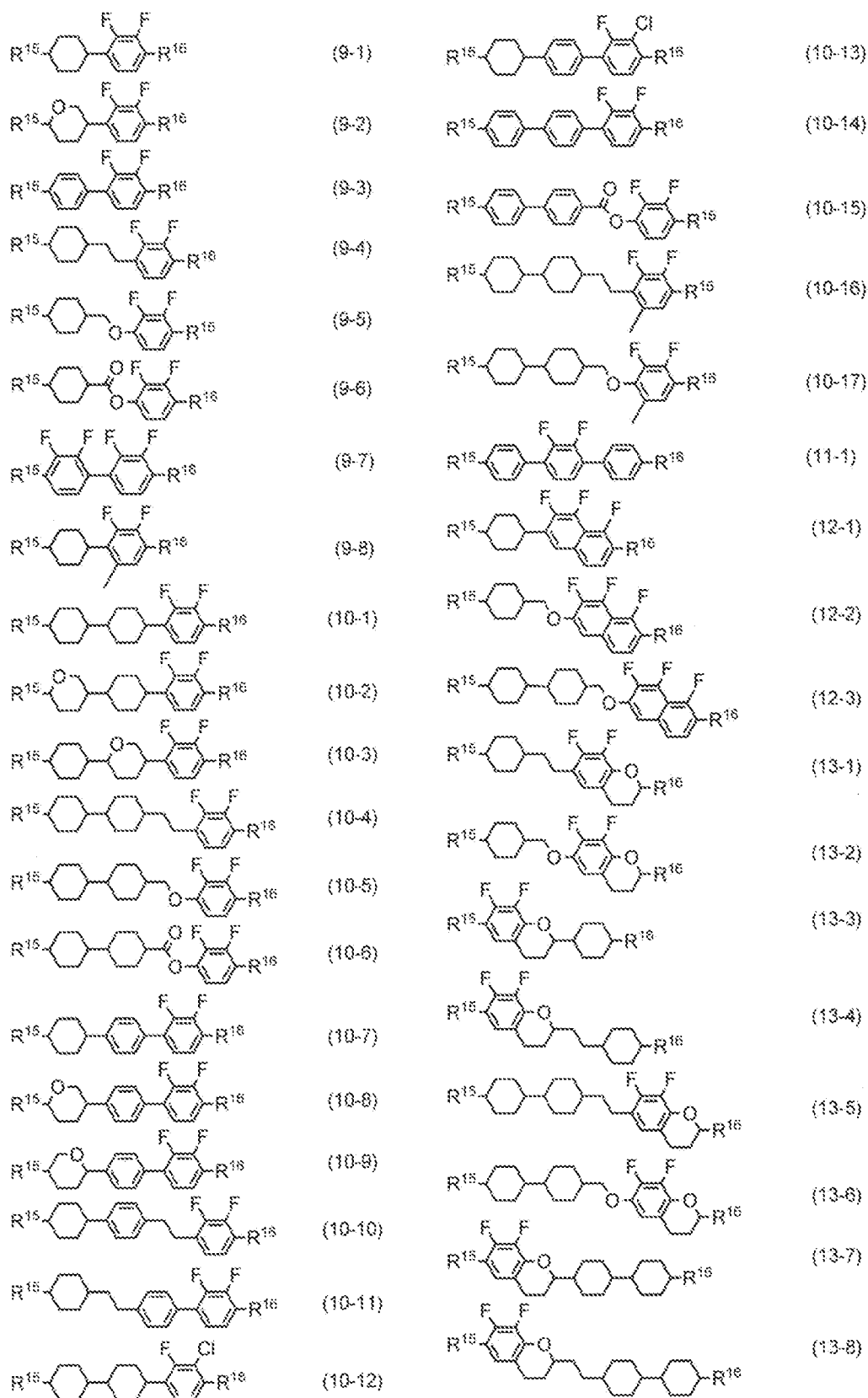
[0110] TNなどのモード用の組成物を調製するには、成分Dの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1重量%から99重量%の範囲が適しており、好ましくは10重量%から97重量%の範囲、さらに好ましくは40重量%から95重量%の範囲である。成分Dを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Dの含有量は液晶組成物の重量に基づいて30重量%以下が

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。

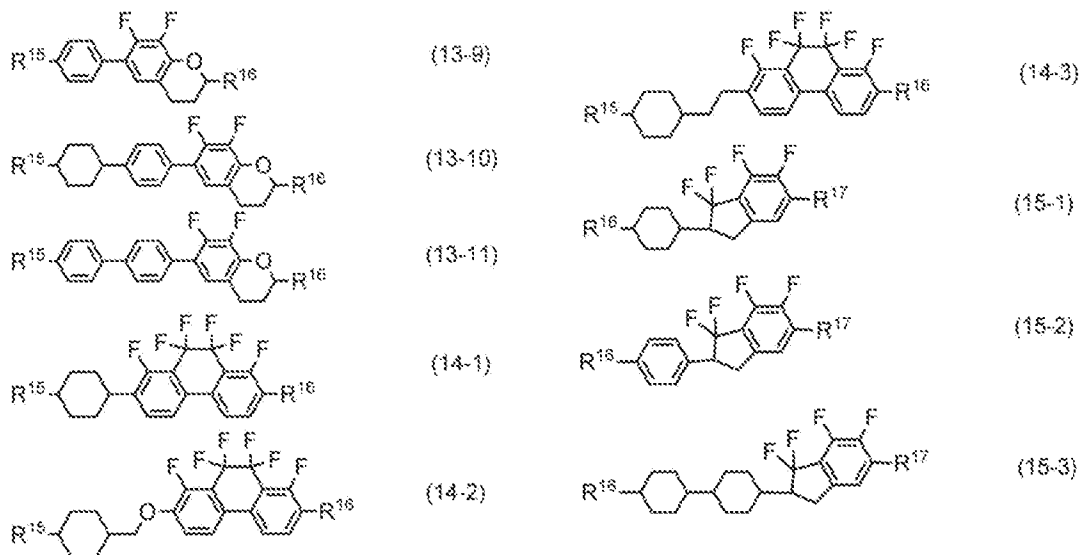
[0111] 成分Eは、化合物(9)から(15)である。これらの化合物は、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレンのように、ラテラル位が2つのハロゲンで置換されたフェニレンを有する。成分Eの好ましい例として、化合物(9-1)から(9-8)、化合物(10-1)から(10-17)、化合物(11-1)、化合物(12-1)から(12-3)、化合物(13-1)から(13-11)、化合物(14-1)から(14-3)、および化合物(15-1)から(15-3)を挙げることができる。成分Eの化合物において、 R^{15} および R^{16} は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、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。

[0112]

[化88]



[0113] [化89]



[0114] 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、含有量が40重量%以上であることが好ましい。

[0115] 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(15)は、誘電率異方性を大きくするという効果がある。

[0116] 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の含有量が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。

[0117] 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。

[0118] 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。

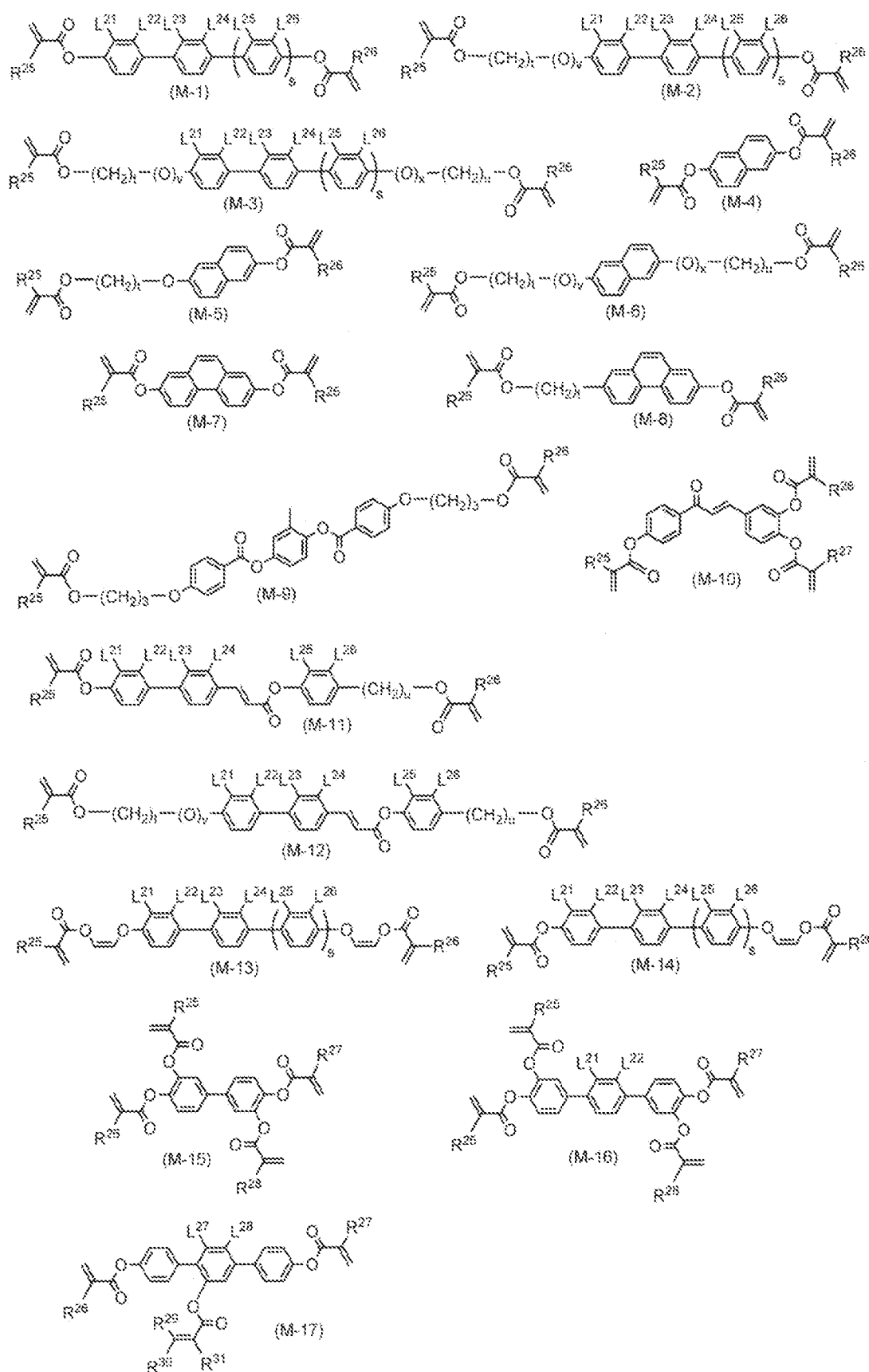
[0119] 重合性化合物は、液晶組成物中に重合体を生成させる目的で添加される。電極間に電圧を印加した状態で紫外線を照射して、重合性化合物と化合物(1)とを共重合させることによって、液晶組成物の中に重合体を生成させる。この際、化合物(1)は、極性基がガラス（または金属酸化物）の基板表面と非共有結合的に相互作用した状態で固定化される。これにより、液晶分子の配向を制御する能力がさらに向上すると同時に、極性化合物が液晶組成物中に漏れ出す事が無くなる。また、ガラス（または金属酸化物）の基板表面においても、適切なプレチルトが得られるので、応答時間が短縮され、かつ電圧保持率の大きな液晶表示素子が得られる。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。

[0120] 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。

[0121]

[化90]



[0122] 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。

[0123] 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/ミヒラーズケトン混合物、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。

[0124] 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。

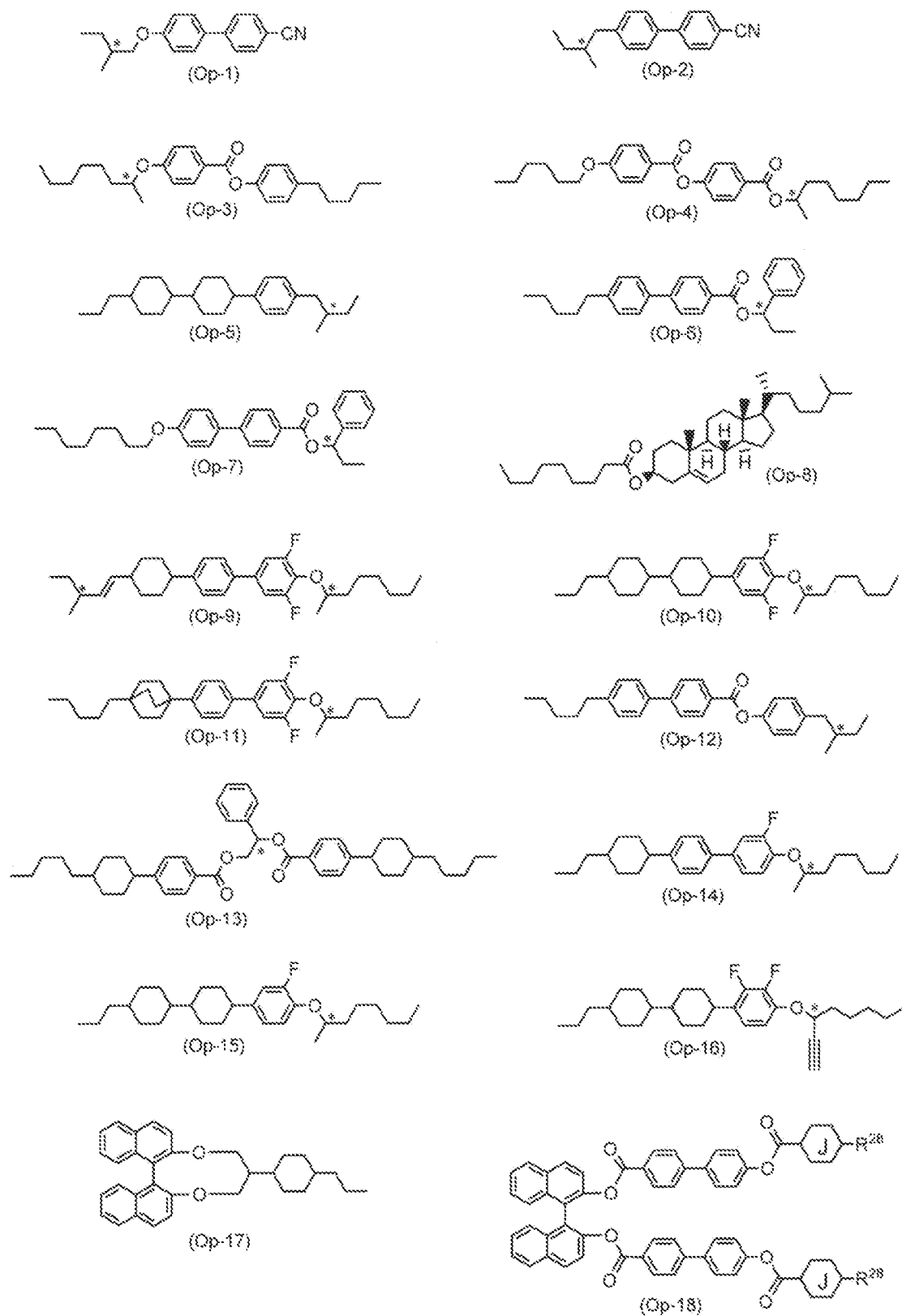
[0125] 重合性化合物を保管するとき、重合を防止するために重合禁止剤を添加してもよい。重合性化合物は、通常は重合禁止剤を除去しないまま組成物に添加される。重合禁止剤の例は、ヒドロキノン、メチルヒドロキノンのような

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。

[0126] 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、という効果を有する。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。

[0127]

[化91]



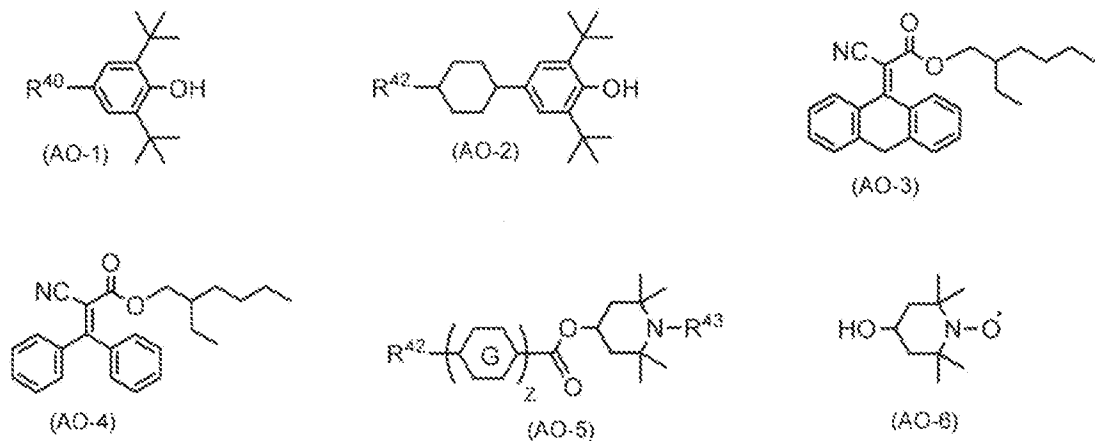
[0128] 酸化防止剤は、大きな電圧保持率を維持するために有効である。酸化防止

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）； I R G A N O X 4 1 5、I R G A N O X 5 6 5、I R G A N O X 1 0 1 0、I R G A N O X 1 0 3 5、I R G A N O X 3 1 1 4、および I R G A N O X 1 0 9 8（商品名：B A S F 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（A O - 3）および（A O - 4）； T I N U V I N 3 2 9、T I N U V I N P、T I N U V I N 3 2 6、T I N U V I N 2 3 4、T I N U V I N 2 1 3、T I N U V I N 4 0 0、T I N U V I N 3 2 8、および T I N U V I N 9 9 - 2（商品名：B A S F 社）；および 1, 4 - ジアザビシクロ [2. 2. 2] オクタン（D A B C O）を挙げることができる。

[0129] 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（A O - 5）および（A O - 6）； T I N U V I N 1 4 4、T I N U V I N 7 6 5、および T I N U V I N 7 7 0 D F（商品名：B A S F 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 I R G A F O S 1 6 8（商品名：B A S F 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。

[0130]

[化92]



- [0131] 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、 $-COOR^{41}$ 、または $-CH_2CH_2COOR^{41}$ 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(AO-2)および(AO-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(AO-5)において、 R^{43} は水素、メチル、または $O\cdot$ (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。

[0132] 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。

- [0133] 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(PDLC)、そしてポリマーネットワーク液晶表示素子(PNLC)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

、P S Aモードの液晶表示素子が作製される。好ましい割合は約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、約0.2重量%から約1.0重量%の範囲である。P S Aモードの素子は、アクティブマトリックス、パッシブマトリッ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。

[0134] 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。極性化合物は、液晶分子が配列するのを援助する。すなわち、極性化合物は、配向膜に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を添加する。必要に応じて添加物をさらに添加してもよい。この組成物を素子に注入する。この素子に電圧を印加した状態で光照射する。紫外線が好ましい。光照射によって重合性化合物を重合させる。この重合によって、重合体を含む組成物が生成し、P S Aモードを有する素子が作製される。

[0135] この手順において、極性化合物は、極性基が基板表面と相互作用するので、基板上に配列する。この極性化合物が、液晶分子を配向させる。電圧を印加したとき、電場の作用によって液晶分子の配向がさらに促進される。この配向に従って重合性化合物も配向する。この状態で重合性化合物が紫外線によって重合するので、この配向を維持した重合体が生成する。この重合体の効果によって、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

[0136] 実施例（合成例、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。

[0137] 1. 化合物（1）の実施例

化合物（1）は、実施例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。化合物（1）は、実施例1などに示した手順により合成した。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。

[0138] NMR分析：測定には、ブルカーバイオスピン社製のDRX-500を用いた。¹H-NMRの測定では、試料をCDCl₃などの重水素化溶媒に溶解させ、測定は、室温で、500MHz、積算回数16回の条件で行った。テトラメチルシランを内部標準として用いた。¹⁹F-NMRの測定では、CFCl₃を内部標準として用い、積算回数24回で行った。核磁気共鳴スペクトルの説明において、sはシングレット、dはダブルット、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。

[0139] 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0.25μm）を用いた。キャリアー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1μLを試料気化室に注入した。記録計には島津製作所製のGC Solutionシステムなどを用いた。

[0140] HPLC分析：測定には、島津製作所製のProminence (LC-20AD; SPD-20A) を用いた。カラムはワイエムシー製のYMC-Pack ODS-A (長さ150mm、内径4.6mm、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UV検出器、RI検出器、CORONA検出器などを適宜用いた。UV検出器を用いた場合、検出波長は254nm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-R7Aplusを用いた。

[0141] 紫外可視分光分析：測定には、島津製作所製のPharmaSpec UV-1700を用いた。検出波長は190nmから700nmとした。試料はアセトニトリルに溶解して、0.01mmol/Lの溶液となるように調製し、石英セル（光路長1cm）に入れて測定した。

[0142] 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。

[0143] 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（JEITA; Japan Electronics and Information Technology Industries Association）で審議制定されるJEITA規格（JEITA・ED-2521B）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TN素子には、薄膜トランジスター（TFT）を取り付けなかった。

[0144] (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FP-52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。

[0145] (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、Diamond DSC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。

[0146] 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C₁、C₂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。

[0147] (3) ネマチック相の上限温度 (T_{N I} 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_{N I}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。

[0148] (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≤-20℃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。

[0149] (5) 粘度 (バルク粘度 ; η ; 20℃で測定 ; mPa · s)

測定には、東京計器株式会社製のE型回転粘度計を用いた。

[0150] (6) 光学異方性（屈折率異方性；25℃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プ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。

[0151] (7) 比抵抗（ ρ ；25℃で測定； $\Omega \cdot \text{cm}$ ）

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）}。

[0152] 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。

[0153] (8a) 粘度（回転粘度； γ_1 ；25℃で測定； $\text{mPa} \cdot \text{s}$ ）

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。

[0154] (8b) 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。

[0155] (9a) 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。

[0156] (9b) 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 (0.5V、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 ($\varepsilon_{\parallel}$) を測定した。

2) 誘電率 ($\varepsilon_{\perp}$) 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° である TN 素子に試料を入れた。この素子にサイン波 ($0.5\ \text{V}$ 、 $1\ \text{kHz}$) を印加し、2秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率 ($\varepsilon_{\perp}$) を測定した。

[0157] (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。

[0158] (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。

[0159] (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。

[0160] (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。

[0161] (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に透過率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。

[0162] (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。

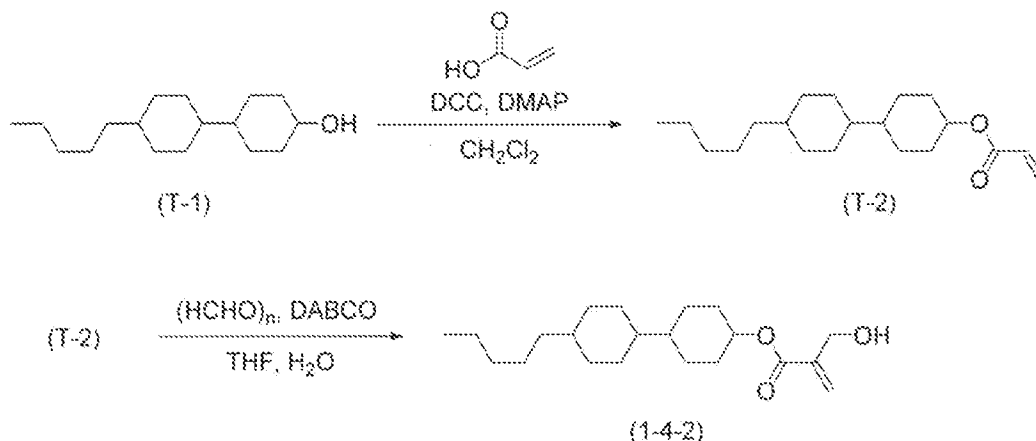
[0163] 原料

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。

[0164] [合成例1]

化合物 (1-4-2) の合成

[化93]



[0165] 第1工程

化合物 (T-1) (25.0 g)、アクリル酸 (7.14 g)、DMAP (1.21 g)、およびジクロロメタン (300 ml) を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへDCC (24.5 g) のジクロロメタン (125 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒に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、ヘプタン：トルエン＝2：1) で精製した。さらにソルミックス (登録商標) A-11からの再結晶により精製して、化合物 (T-2) (11.6 g；38%) を得た。

[0166] 第2工程

パラホルムアルデヒド (2.75 g)、DABCO (4.62 g)、および水 (40 ml) を反応器に入れ、室温で15分間攪拌した。そこへ化合物 (T-2) (6.31 g) のTHF (90 ml) 溶液を滴下し、室温で72時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (容積比、トルエン：酢酸エチル＝5：1) で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの

混合溶媒（容積比、1 : 1）からの再結晶により精製して、化合物（1-4-2）（1.97 g ; 29%）を得た。

[0167] 得られた化合物（1-4-2）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) : 6.23 (s, 1H)、5.79 (d, $J = 1.2 \text{ Hz}$, 1H)、4.79-4.70 (m, 1H)、4.32 (d, $J = 6.7 \text{ Hz}$, 2H)、2.29 (t, $J = 6.7 \text{ Hz}$, 1H)、2.07-2.00 (m, 2H)、1.83-1.67 (m, 6H)、1.42-1.18 (m, 8H)、1.18-0.91 (m, 9H)、0.91-0.79 (m, 5H)。

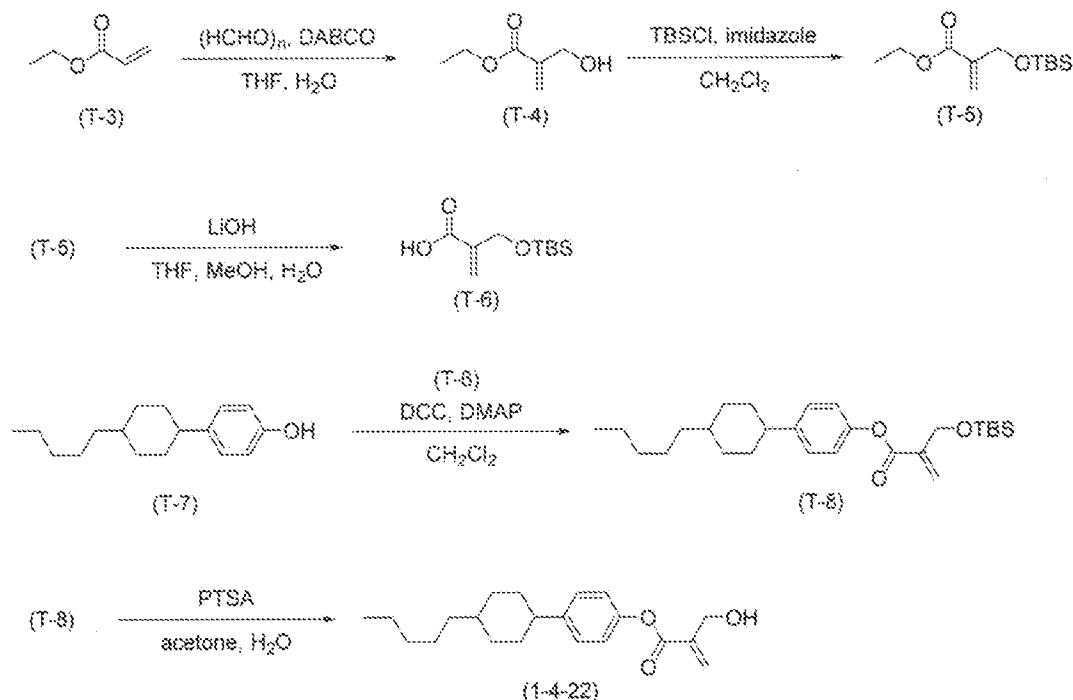
[0168] 化合物（1-4-2）の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C \ 40.8 \ S_A \ 109 \ I.$

[0169] [合成例2]

化合物（1-4-22）の合成

[化94]



[0170] 第1工程

化合物（T-3）（50.0 g）を原料として用い、合成例1の第2工程

と同様の手法により、化合物（T-4）（42.5 g ; 65 %）を得た。

[0171] 第2工程

化合物（T-4）（42.5 g）、イミダゾール（24.5 g）、およびジクロロメタン（740 ml）を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへ t-ブチルジメチルシリルクロリド（54.1 g）のジクロロメタン（110 ml）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。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。一緒に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、ヘプタン：酢酸エチル = 10 : 1）で精製して、化合物（T-5）（79.8 g ; 100 %）を得た。

[0172] 第3工程

化合物（T-5）（79.8 g）、THF（640 ml）、メタノール（160 ml）、および水（80 ml）を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへ水酸化リチウム一水和物（27.4 g）を加え、室温に戻しつつ12時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、6 N 塩酸（15 ml）をゆっくりと加え酸性にした後、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒に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て、化合物（T-6）（60.6 g ; 86 %）を得た。

[0173] 第4工程

化合物（T-7）（2.83 g）、化合物（T-6）（2.98 g）、DMAP（0.140 g）、およびジクロロメタン（80 ml）を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへ DCC（2.84 g）のジクロロメタン（40 ml）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒に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、ヘプタン：トルエン = 2 : 1）で精製して、化合物（T-8）（3.22 g

; 63%)を得た。

[0174] 第5工程

化合物 (T-8) (3.22 g)、p-トルエンスルホン酸一水和物 (PTSA、0.551 g)、アセトン (50 ml)、および水 (3.5 ml) を反応器に入れ、室温で1時間攪拌した。次にピリジン (0.30 ml) を加えた後、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。一緒に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、ヘプタン : 酢酸エチル = 2 : 1) で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒 (容積比、1 : 1) からの再結晶により精製して、化合物 (1-4-22) (2.05 g; 86%)を得た。

[0175] 得られた化合物 (1-4-22) 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) : 7.23 (d, $J=8.6\text{ Hz}$, 2H)、7.03 (d, $J=8.6\text{ Hz}$, 2H)、6.50 (s, 1H)、6.03 (d, $J=1.0\text{ Hz}$, 1H)、4.44 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、2.47 (tt, $J=12.2\text{ Hz}$, $J=3.3\text{ Hz}$, 1H)、2.24 (t, $J=6.6\text{ Hz}$, 1H)、1.93–1.83 (m, 4H)、1.48–1.37 (m, 2H)、1.37–1.18 (m, 9H)、1.10–0.98 (m, 2H)、0.90 (t, $J=7.2\text{ Hz}$, 3H)。

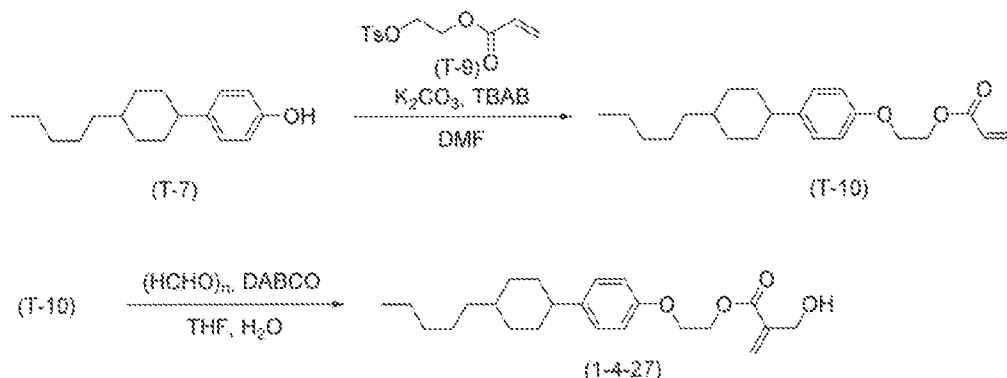
[0176] 化合物 (1-4-22) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : C 67.6 S_C 84.4 S_A 87.7 N 89.8
I。

[0177] [合成例3]

化合物 (1-4-27) の合成

[化95]



[0178] 第1工程

化合物 (T-7) (4.00 g)、炭酸カリウム (4.49 g)、テトラブチルアンモニウムブロミド (TBAB) (1.05 g)、および DMF (60 ml) を反応器に入れ、80℃で1時間撹拌した。そこへ、特開2011-21118号公報に記載された手法に従い合成した化合物 (T-9) (5.27 g) の DMF (20 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、80℃でさらに2時間撹拌した。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。一緒に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、ヘプタン：トルエン=2：1) で精製して、化合物 (T-10) (4.00 g；72%) を得た。

[0179] 第2工程

化合物 (T-10) (4.00 g) を原料として用い、合成例1の第2工程と同様の手法により、化合物 (1-4-27) (1.81 g；42%) を得た。

[0180] 得られた化合物 (1-4-27) の NMR 分析値は以下の通りである。

1H -NMR：化学シフト δ (ppm； $CDCl_3$)：7.13 (d, $J=8.6$ Hz, 2H)、6.84 (d, $J=8.7$ Hz, 2H)、6.29 (s, 1H)、5.85 (d, $J=1.2$ Hz, 1H)、4.52 (t, $J=4.8$ Hz, 2H)、4.33 (d, $J=6.7$ Hz, 2H)、4.21 (t

, J = 4.8 Hz, 2H)、2.41 (tt, J = 12.3 Hz, J = 3.0 Hz, 1H)、2.26 (t, J = 6.6 Hz, 1H)、1.90–1.81 (m, 4H)、1.46–1.17 (m, 11H)、1.09–0.98 (m, 2H)、0.89 (t, J = 7.3 Hz, 3H)。

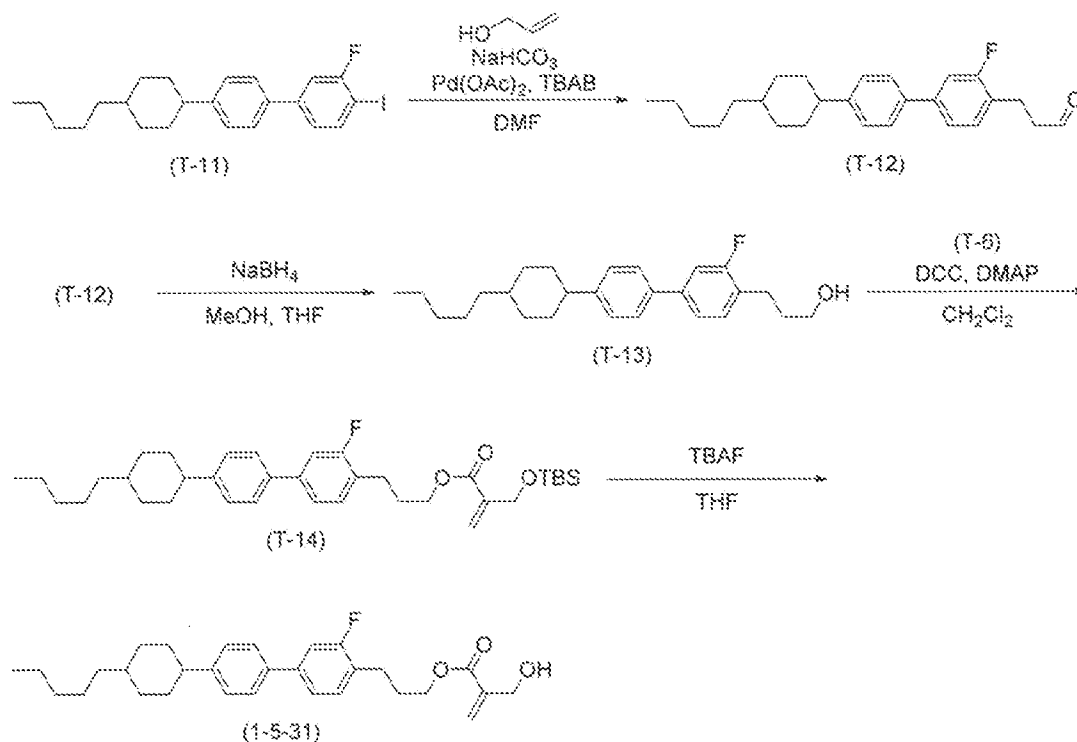
[0181] 化合物(1-4-27)の物性は、次のとおりであった。

転移温度: C 40.4 S_A 69.9 I。

[0182] [合成例4]

化合物(1-5-31)の合成

[化96]



[0183] 第1工程

国際公開第2008/105286号パンフレットに記載された手法に従い合成した化合物(T-11)(10.7g)、アリルアルコール(3.3ml)、酢酸パラジウム(0.107g)、炭酸水素ナトリウム(5.99g)、TBAB(8.42g)、およびDMF(110ml)を反応器に入れて、40℃で8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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、1 : 1）からの再結晶により精製して、化合物（T-12）（6.93 g ; 77 %）を得た。

[0184] 第2工程

水素化ホウ素ナトリウム（0.723 g）およびメタノール（110 ml）を反応器に入れて、0℃に冷却した。そこへ化合物（T-12）（6.93 g）のTHF（30 ml）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル=5 : 1）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、1 : 1）からの再結晶により精製して、化合物（T-13）（5.73 g ; 82 %）を得た。

[0185] 第3工程

化合物（T-13）（4.73 g）を原料として用い、合成例2の第4工程と同様の手法により、化合物（T-14）（3.36 g ; 47 %）を得た。

[0186] 第4工程

化合物（T-14）（2.36 g）およびTHF（50 ml）を反応器に入れて、0℃に冷却した。そこへTBAF（1.00 M ; THF溶液 ; 4.5 ml）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ1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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル=5 : 1）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、1 : 1）からの再結晶により精製して、化合物（1-5-31）（1.47 g ; 77 %）を得た。

[0187] 得られた化合物（１－５－３１）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) : 7.48 (d, $J=8.2\text{ Hz}$, 2H)、7.31–7.14 (m, 5H)、6.25 (s, 1H)、5.84 (d, $J=1.2\text{ Hz}$, 1H)、4.34 (d, $J=6.4\text{ Hz}$, 2H)、4.24 (t, $J=6.4\text{ Hz}$, 2H)、2.78 (t, $J=7.5\text{ Hz}$, 2H)、2.51 (tt, $J=12.1\text{ Hz}$, $J=3.2\text{ Hz}$, 1H)、2.20 (t, $J=6.5\text{ Hz}$, 1H)、2.10–2.20 (m, 2H)、1.96–1.84 (m, 4H)、1.54–1.42 (m, 2H)、1.38–1.20 (m, 9H)、1.13–1.01 (m, 2H)、0.90 (t, $J=7.2\text{ Hz}$, 3H)。

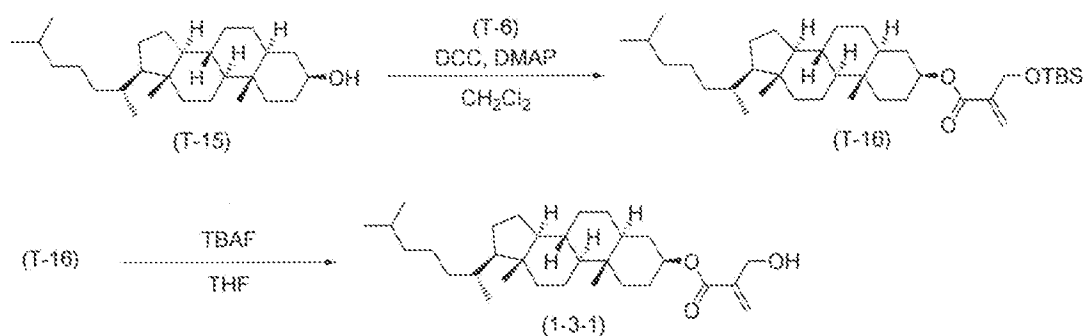
[0188] 化合物（１－５－３１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : S_A 115 ℃。

[0189] [合成例 5]

化合物（１－３－１）の合成

[化97]



[0190] 第 1 工程

化合物（Ｔ－１５）（１０．０ｇ）を原料として用い、合成例 2 の第 4 工程と同様の手法により、化合物（Ｔ－１６）（３．５６ｇ；２４％）を得た。

[0191] 第 2 工程

化合物（Ｔ－１６）（３．５６ｇ）を原料として用い、合成例 4 の第 4 工程と同様の手法により、化合物（１－３－１）（２．３４ｇ；８２％）を得

た。

[0192] 得られた化合物 (1-3-1) 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) : 6.23 (s, 1H)、5.79 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.87–4.76 (m, 1H)、4.32 (d, $J=6.6\text{ Hz}$, 2H)、2.26 (t, $J=6.5\text{ Hz}$, 1H)、1.97 (dt, $J=12.6\text{ Hz}$, $J=3.2\text{ Hz}$, 1H)、1.90–1.72 (m, 3H)、1.69–0.81 (m, 38H)、0.70–0.61 (m, 4H)。

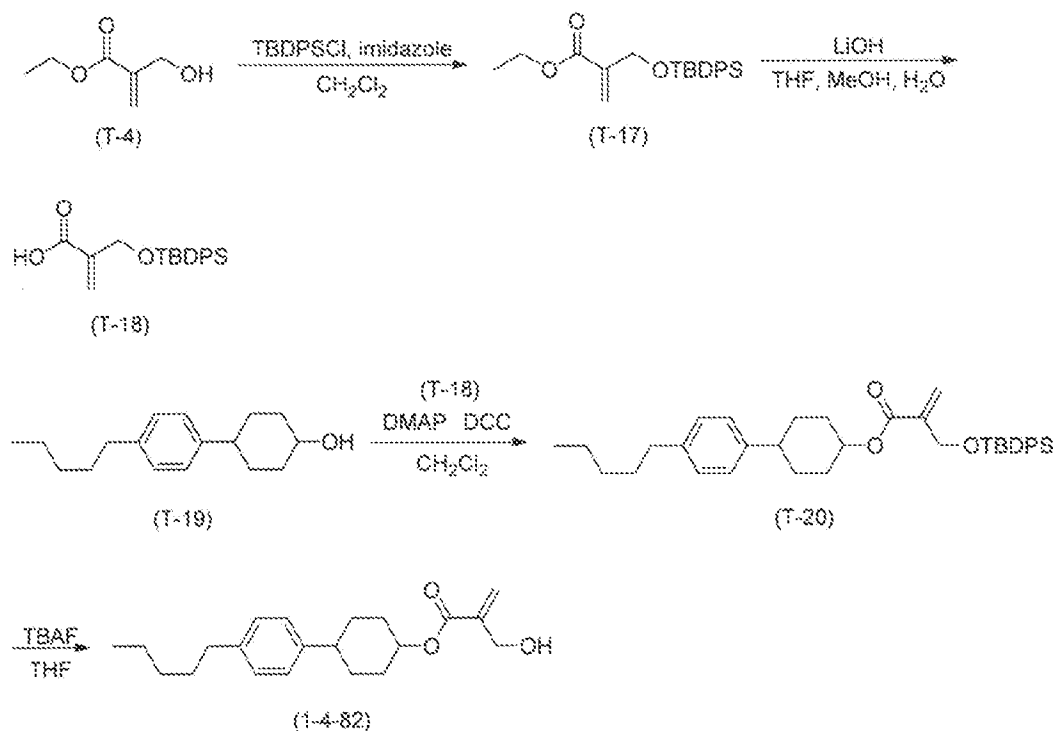
[0193] 化合物 (1-3-1) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $\text{C } 122^\circ\text{C}$ 。

[0194] [合成例 6]

化合物 (1-4-82) の合成

[化98]



[0195] 第 1 工程

化合物 (T-4) (50.0 g) を原料として用い、イミダゾール (28.7 g)、およびジクロロメタン (800 ml) を反応器に入れ、 0°C に冷

却した。そこへ *t*-ブチルジフェニルクロロシラン (116.1 g) のジクロロメタン (110 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。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。一緒に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 (体積比、ヘプタン：酢酸エチル=10：1) で精製して、化合物 (T-17) (127.4 g ; 90%) を得た。

[0196] 第2工程

化合物 (T-17) (127.4 g) を原料として用い、合成例2の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-18) (63.6 g ; 54%) を得た

[0197] 第3工程

化合物 (T-19) (5.00 g)、化合物 (T-18) (8.29 g)、DMAP (1.0 g)、およびジクロロメタン (80 ml) を反応器に入れ、0℃に冷却した。そこへDCC (5.00 g) のジクロロメタン (40 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物をろ別した後、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。一緒に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 (体積比、ヘプタン：トルエン=1：1) で精製して、化合物 (T-20) (8.66 g ; 75%) を得た。

[0198] 第4工程

化合物 (T-20) (8.66 g) およびTHF (50 ml) を反応器に入れて、0℃に冷却した。そこへTBAF (1.00 M ; THF 溶液 ; 18 ml) をゆっくりと加え、室温に戻しつつ1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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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 (体積比、トルエン：酢酸エチル=9：1

）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（１－４－８２）（４．４３ｇ；８８％）を得た。

[0199] 得られた化合物（１－４－８２）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) : 7.11 (s, 4H)、6.26 (s, 1H)、5.82 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.92–4.87 (m, 1H)、4.34 (d, $J=6.4\text{ Hz}$, 2H)、2.58–2.48 (m, 3H)、2.34–2.33 (m, 1H)、2.15–2.13 (m, 2H)、1.98–1.93 (m, 2H)、1.65–1.52 (m, 6H)、1.37–1.25 (m, 4H)、0.89 (t, $J=6.8\text{ Hz}$, 3H)。

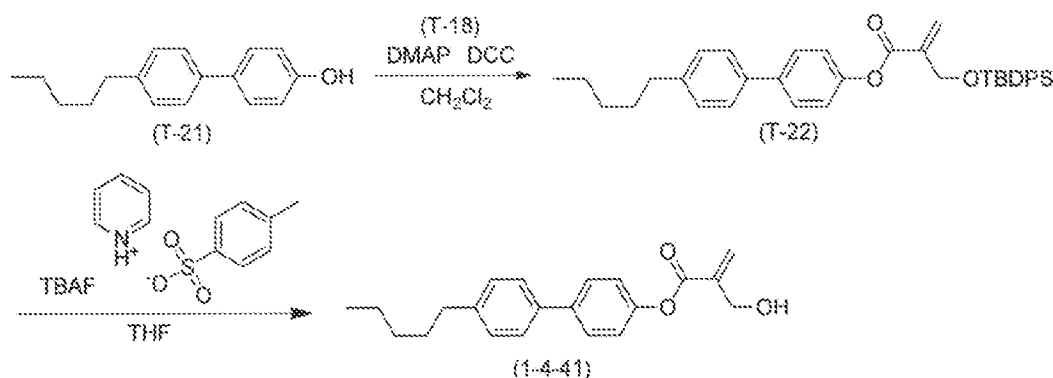
[0200] 化合物（１－４－８２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C_{44.0}$ ($S_A 40.0$)

[0201] [合成例 7]

化合物（１－４－４１）の合成

[化99]



[0202] 第 1 工程

化合物（Ｔ－２１）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例 6 の第 3 工程と同様の手法により、化合物（Ｔ－２２）（９．１３ｇ；７８％）を得た。

[0203] 第 2 工程

化合物（Ｔ－２２）（９．１３ｇ）および THF（５０ｍｌ）を反応器に

入れて、0℃に冷却した。そこへピリジニウム *p*-トルエンスルホナート (4.89 g)、TBAF (1.00 M; THF 溶液; 19 ml) をゆっくりと加え、室温に戻しつつ1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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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 (体積比、トルエン:酢酸エチル=9:1) で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒 (体積比、1:1) からの再結晶により精製して、化合物 (1-4-41) (4.53 g; 86%) を得た。

[0204] 得られた化合物 (1-4-41) 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): 7.60 (d, $J=8.7\text{ Hz}$, 2H)、7.48 (d, $J=8.1\text{ Hz}$, 2H)、7.25 (d, $J=8.1\text{ Hz}$, 2H)、7.18 (d, $J=8.7\text{ Hz}$, 2H)、6.54 (s, 1H)、6.06 (d, $J=0.8\text{ Hz}$, 1H)、4.46 (d, $J=6.5\text{ Hz}$, 2H)、2.64 (t, $J=7.6\text{ Hz}$, 2H)、2.28–2.26 (m, 1H)、1.66–1.63 (m, 2H)、1.36–1.33 (m, 4H)、0.90 (t, $J=6.8\text{ Hz}$, 3H)。

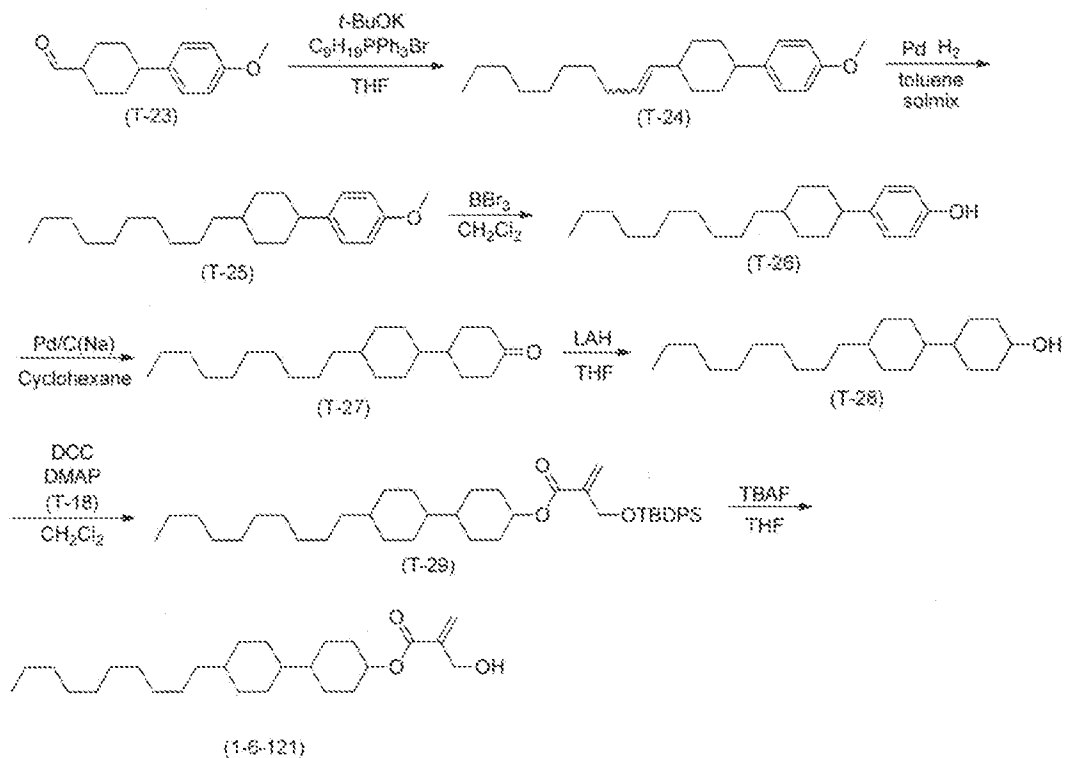
[0205] 化合物 (1-4-41) の物性は、次のとおりであった。

転移温度: C 66.7 S_A 135.1 I。

[0206] [合成例8]

化合物 (1-6-121) の合成

[化100]



[0207] 第1工程

デシルトリフェニルホスホニウムブロミド (50.0 g) および THF (200 ml) を反応器に入れて、 -30°C に冷却した。カリウム t -ブトキシド (11.9 g) をゆっくりと加え、 -30°C で1時間攪拌した。国際公開第2012/058187号パンフレットに記載された手法に従い合成した化合物 (T-23) (19.3 g) の THF (50 ml) 溶液を加えた。室温に戻しつつ5時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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 (体積比、ヘプタン：トルエン=4：1) で精製して、化合物 (T-24) (23.9 g ; 82%) を得た。

[0208] 第2工程

化合物 (T-24) (23.9 g) およびトルエン (400 ml)、IPA (400 ml) を反応器に入れて、 Pd/C (0.38 g) を加える、水素雰囲気下で室温で12時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をト

ルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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（体積比、ヘプタン：トルエン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔ－２５）（２２．８ｇ；９５％）を得た。

[0209] 第３工程

化合物（Ｔ－２５）（２２．８ｇ）、およびジクロロメタン（３００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。そこへ三臭化ホウ素（１．００Ｍ；ジクロロメタン溶液；７６ｍｌ）を加え、室温に戻しつつ５時間攪拌した。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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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でトルエンにて精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔ－２６）（１８．８ｇ；８６％）を得た。

[0210] 第４工程

化合物（Ｔ－２６）（１８．８ｇ）およびシクロヘキサン（４００ｍｌ）をオートクレーブに入れて、７０℃で６時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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にてトルエンで精製し、化合物（Ｔ－２７）（１７．１ｇ；９０％）を得た。

[0211] 第５工程

水素化アルミニウムリチウム（１．２１ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔ－２７）（１７．１ｇ）のＴＨＦ（２００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化

化合物 (T-28) (14.2 g ; 83%) を得た。

[0212] 第6工程

化合物 (T-28) (6.0 g) を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-29) (10.1 g ; 84%) を得た。

[0213] 第7工程

化合物 (T-29) (10.1 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-6-121) (5.48 g ; 86%) を得た。

[0214] 得られた化合物 (1-6-121) 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) : 6.23 (s, 1H)、5.79 (d, $J=0.8\text{ Hz}$, 1H)、4.77–4.71 (m, 1H)、4.32 (d, $J=6.5\text{ Hz}$, 2H)、2.31 (t, $J=6.6\text{ Hz}$, 1H)、2.04–2.02 (m, 2H)、1.80–1.68 (m, 6H)、1.39–1.25 (m, 18H)、1.13–0.80 (m, 14H) .

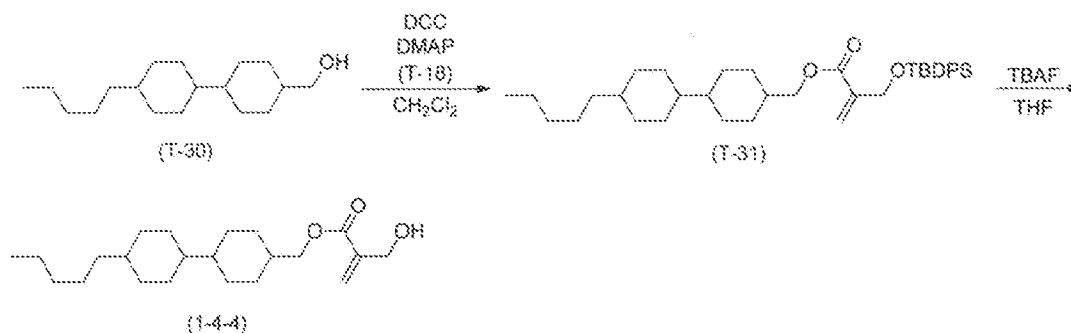
[0215] 化合物 (1-6-121) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : C 79.8 S_A 122.0 I .

[0216] [合成例9]

化合物 (1-4-4) の合成

[化101]



[0217] 第1工程

化合物 (T-30) (5.00 g) を原料として用い、合成例6の第3工

程と同様の手法により、化合物（T-31）（8.84 g；80％）を得た。

[0218] 第2工程

化合物（T-31）（8.84 g）を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物（1-4-4）（4.26 g；81％）を得た。

[0219] 得られた化合物（1-4-4）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)：6.25 (s, 1H)、5.82 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.33 (d, $J=6.6\text{ Hz}$, 2H)、3.99 (d, $J=6.5\text{ Hz}$, 2H)、2.33 (t, $J=6.7\text{ Hz}$, 1H)、1.80–1.62 (m, 9H)、1.32–0.80 (m, 22H)。

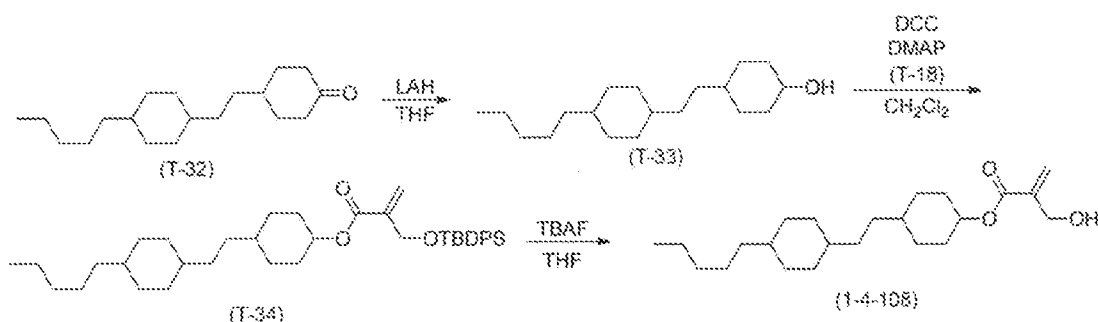
[0220] 化合物（1-4-4）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：C 51.9 S_A 72.5 I。

[0221] [合成例10]

化合物（1-4-108）の合成

[化102]



[0222] 第1工程

化合物（T-32）（5.00 g）を原料として用い、合成例8の第5工程と同様の手法により、化合物（T-33）（4.13 g；82％）を得た。

[0223] 第2工程

化合物 (T-33) (4.13 g) を原料として用い、合成例 6 の第 3 工程と同様の手法により、化合物 (T-34) (7.10 g ; 80%) を得た。

[0224] 第 3 工程

化合物 (T-34) (7.10 g) を原料として用い、合成例 6 の第 4 工程と同様の手法により、化合物 (1-4-108) (3.65 g ; 85%) を得た。

[0225] 得られた化合物 (1-4-108) 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) : 6.22 (s, 1H)、5.79 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.79–4.73 (m, 1H)、4.31 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、2.32 (t, $J=6.5\text{ Hz}$, 1H)、2.02–1.99 (m, 2H)、1.82–1.79 (m, 2H)、1.72–1.70 (m, 4H)、1.42–0.98 (m, 19H)、0.89–0.80 (m, 7H)。

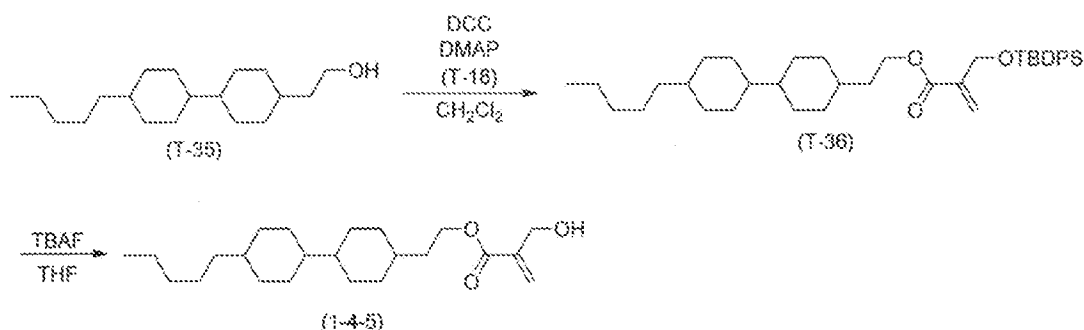
[0226] 化合物 (1-4-108) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C_{46.1}$ S_A 122 $^{\circ}\text{C}$ 。

[0227] [合成例 11]

化合物 (1-4-5) の合成

[化103]



[0228] 第 1 工程

化合物 (T-35) (5.00 g) を原料として用い、合成例 6 の第 3 工程と同様の手法により、化合物 (T-36) (8.60 g ; 80%) を得た。

。

[0229] 第2工程

化合物 (T-36) (8.60 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-4-5) (4.21 g ; 81%) を得た。

[0230] 得られた化合物 (1-4-5) 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) : 6.24 (s, 1H)、5.82 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.33 (d, $J=6.6\text{ Hz}$, 2H)、4.21 (t, $J=6.8\text{ Hz}$, 2H)、2.29–2.26 (m, 1H)、1.78–1.67 (m, 8H)、1.60–1.55 (m, 2H)、1.31–1.07 (m, 10H)、1.00–0.79 (m, 13H)。

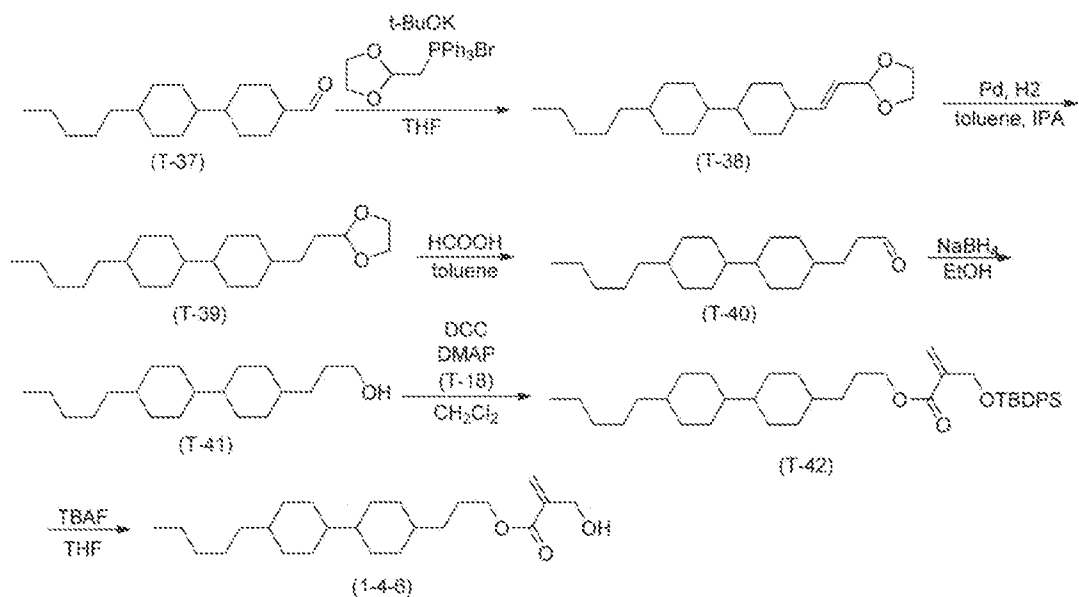
[0231] 化合物 (1-4-5) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C\ 69.4\ S_A\ 124.6\ I.$

[0232] [合成例12]

化合物 (1-4-6) の合成

[化104]



[0233] 第1工程

(1, 3-ジオキソラン-2-イル) メチルトリフェニルホスホニウムブロミド (19.5 g) および THF (200 ml) を反応器に入れて -30℃まで冷却する。カリウム t-ブトキシド (5.09 g) を加え、-30℃で1時間攪拌した。化合物 (T-37) (10.0 g) を加え、室温に戻しつつ5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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物 (T-38) (11.4 g ; 90%) を得た。

[0234] 第2工程

化合物 (T-38) (11.4 g)、Pd/C (0.18 g)、IPA (200 ml)、およびトルエン (200 ml) を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物 (T-39) (10.6 g ; 92%) を得た。

[0235] 第3工程

化合物 (T-39) (10.6 g)、ギ酸 (14.5 g)、およびトルエン (200 ml) を反応器に入れて、100℃にて4時間攪拌した。不溶物をろ別した後、炭酸水素ナトリウム水溶液で中和し、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物 (T-40) (8.11 g ; 88%) を得た。

[0236] 第4工程

水素化ホウ素ナトリウム (0.62 g)、およびエタノール (100 ml) を反応容器に入れて、0℃まで冷却した。そこへ化合物 (T-40) (8.11 g) のエタノール (100 ml) 溶液を滴下した。室温に戻しつつ4

時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒に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（体積比、トルエン：酢酸エチル＝9：1）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（T-41）（6.37 g；78%）を得た。

[0237] 第5工程

化合物（T-41）（6.37 g）を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物（T-42）（8.67 g；65%）を得た。

[0238] 第6工程

化合物（T-42）（8.67 g）を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物（1-4-6）（4.52 g；85%）を得た。

[0239] 得られた化合物（1-4-6）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) : 6.25 (s, 1H)、5.82 (d, $J=0.9\text{ Hz}$, 1H)、4.33 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、4.15 (t, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、2.27 (t, $J=6.5\text{ Hz}$, 1H)、1.76–1.62 (m, 10H)、1.32–1.06 (m, 12H)、1.02–0.79 (m, 13H)。

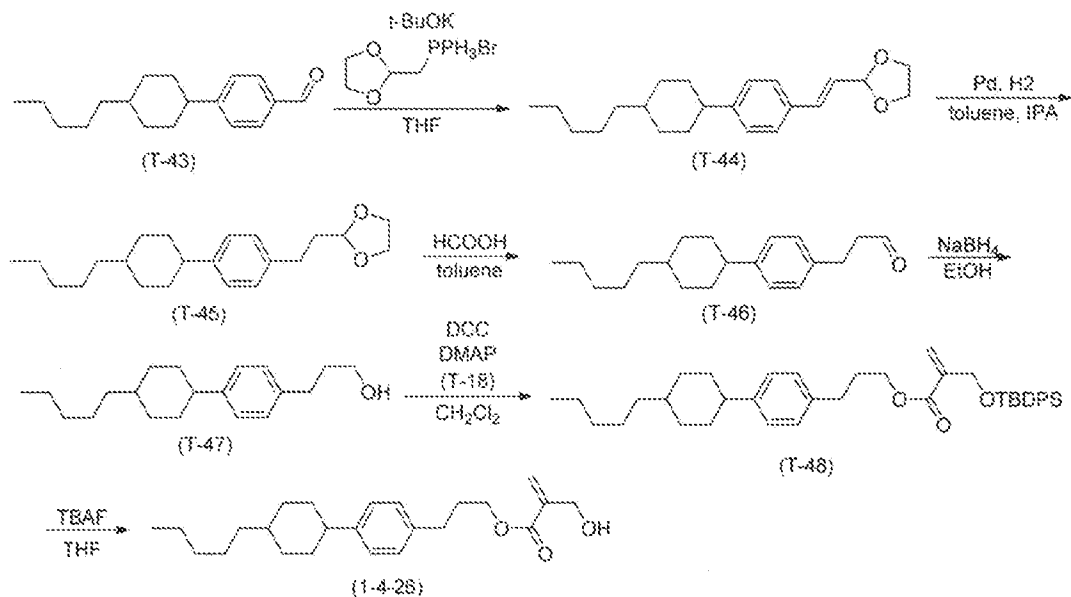
[0240] 化合物（1-4-6）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：C 53.6 S_A 113 I。

[0241] [合成例13]

化合物（1-4-26）の合成

[化105]



[0242] 第1工程

化合物 (T-43) (10.0 g) を原料として用い、合成例12の第1工程と同様の手法により、化合物 (T-44) (11.2 g ; 88%) を得た。

[0243] 第2工程

化合物 (T-44) (11.2 g) を原料として用い、合成例12の第2工程と同様の手法により、化合物 (T-45) (10.1 g ; 90%) を得た。

[0244] 第3工程

化合物 (T-45) (10.1 g) を原料として用い、合成例12の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-46) (7.44 g ; 85%) を得た。

[0245] 第4工程

化合物 (T-46) (7.44 g) を原料として用い、合成例12の第4工程と同様の手法により、化合物 (T-47) (6.07 g ; 81%) を得た。

[0246] 第5工程

化合物 (T-47) (6.07 g) を原料として用い、合成例 6 の第 3 工程と同様の手法により、化合物 (T-48) (9.38 g ; 73%) を得た。

[0247] 第 6 工程

化合物 (T-48) (9.38 g) を原料として用い、合成例 6 の第 4 工程と同様の手法により、化合物 (1-4-26) (3.32 g ; 58%) を得た。

[0248] 得られた化合物 (1-4-26) 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) : 7.13 (d, $J=8.2\text{ Hz}$, 2H)、7.10 (d, $J=8.2\text{ Hz}$, 2H)、6.23 (s, 1H)、5.82 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.32 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、4.20 (t, $J=6.4\text{ Hz}$, 2H)、2.68 (t, $J=7.3\text{ Hz}$, 2H)、2.43 (tt, $J=12.2\text{ Hz}$, $J=3.2\text{ Hz}$, 1H)、2.21 (t, $J=6.8\text{ Hz}$, 1H)、2.04–1.98 (m, 2H)、1.88–1.84 (m, 4H)、1.46–1.38 (m, 2H)、1.35–1.19 (m, 9H)、1.07–0.99 (m, 2H)、0.89 (t, $J=7.2\text{ Hz}$, 3H)。

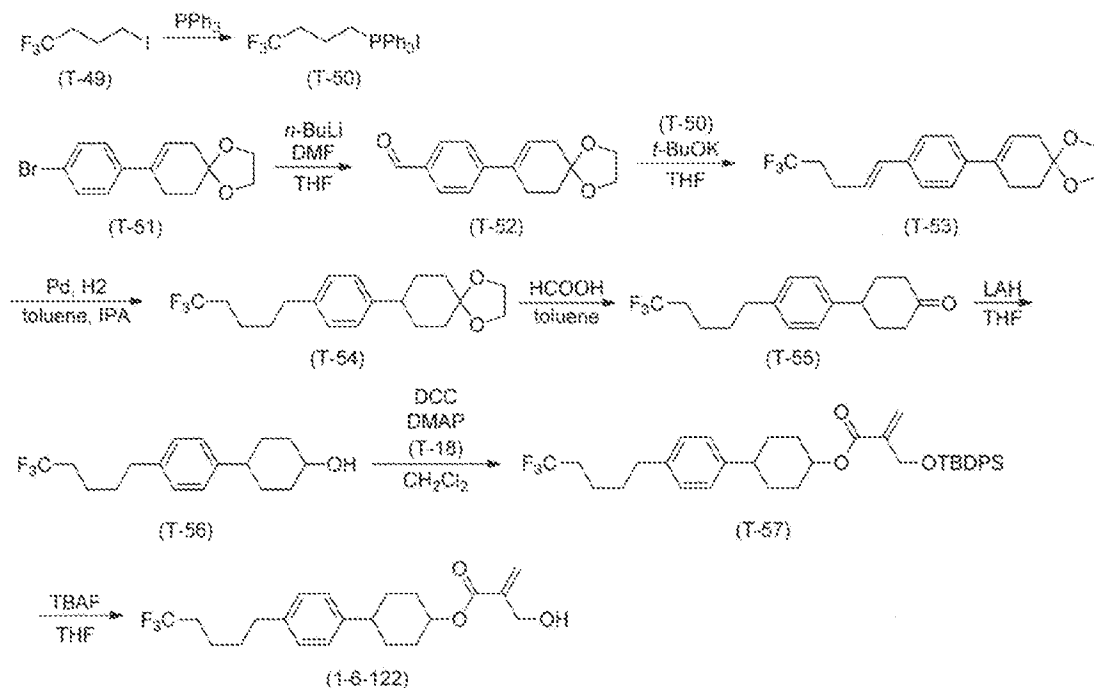
[0249] 化合物 (1-4-26) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C_{41.4}^{\circ}\text{I}$ 。

[0250] [合成例 14]

化合物 (1-6-122) の合成

[化106]



[0251] 第1工程

化合物 (T-49) (15.0 g) トリフェニルホスフィン (24.8 g) を反応器に入れて、100℃にて6時間攪拌した。氷冷したヘプタンで濾過洗浄し、化合物 (T-50) (16.4 g ; 52%) を得た。

[0252] 第2工程

化合物 (T-51) (10.0 g)、および THF (200 ml) を反応器に入れ、-70℃まで冷却した。n-ブチルリチウム (1.63 M ; ヘキサン溶液 ; 25 ml) をゆっくりと加え、1時間攪拌した。DMF (4.0 ml) をゆっくり加え、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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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 (体積比、トルエン : 酢酸エチル = 9 : 1) で精製して、化合物 (T-52) (6.37 g ; 77%) を得た。

[0253] 第3工程

化合物 (T-50) (14.3 g)、および THF (200 ml) を反応

器に入れ、 -30 まで冷却した。そこへカリウム *t*-ブトキシド (3.21 g) をゆっくりと加え、 -30°C で1時間攪拌した。化合物 (T-52) (6.37 g) の THF (100 ml) 溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ4時間攪拌した。不溶物をろ別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒に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でトルエンにて精製して、化合物 (T-53) (7.50 g ; 85 %) を得た。

[0254] 第4工程

化合物 (T-53) (7.50 g)、Pd/C (0.11 g)、IPA (200 ml)、およびトルエン (200 ml) を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物 (T-54) (7.21 g ; 95 %) を得た。

[0255] 第5工程

化合物 (T-54) (7.21 g)、ギ酸 (9.70 g)、およびトルエン (200 ml) を反応器に入れて、 100°C にて4時間攪拌した。不溶物をろ別した後、炭酸水素ナトリウム水溶液で中和し、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物 (T-55) (5.65 g ; 90 %) を得た。

[0256] 第6工程

水素化アルミニウムリチウム (0.43 g) および THF (100 ml) を反応器に入れて氷冷した。化合物 (T-55) (5.65 g) の THF (100 ml) 溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ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。一緒にした有機層を

食塩水で洗浄し、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（体積比、トルエン：酢酸エチル＝9：1）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（T-56）（4.83 g；85%）を得た。

[0257] 第7工程

化合物（T-56）（4.83 g）を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物（T-57）（8.41 g；84%）を得た。

[0258] 第8工程

化合物（T-57）（8.41 g）を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物（1-6-122）（3.22 g；62%）を得た。

[0259] 得られた化合物（1-6-122）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) : 7.13 (d, $J=8.2\text{ Hz}$, 2H)、7.10 (d, $J=8.2\text{ Hz}$, 2H)、6.26 (s, 1H)、5.82 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.92–4.87 (m, 1H)、4.34 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、2.60 (t, $J=7.3\text{ Hz}$, 2H)、2.54–2.49 (m, 1H)、2.31 (t, $J=6.5\text{ Hz}$, 1H)、2.15–2.04 (m, 4H)、1.98–1.96 (m, 2H)、1.66–1.52 (m, 8H)。

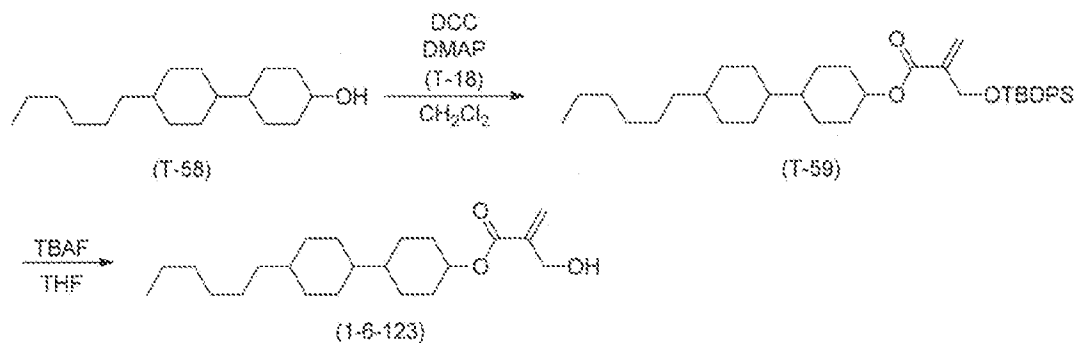
[0260] 化合物（1-6-122）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：C 62.0 °C。

[0261] [合成例15]

化合物（1-6-123）の合成

[化107]



[0262] 第1工程

化合物 (T-58) (5.00 g) を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-59) (7.74 g ; 70%) を得た。

[0263] 第2工程

化合物 (T-59) (7.74 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-6-123) (3.82 g ; 83%) を得た。

[0264] 得られた化合物 (1-6-123) 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) : 6.22 (s, 1H)、5.79 (s, 1H)、4.77–4.71 (m, 1H)、4.31 (d, $J=6.5\text{ Hz}$, 2H)、2.29–2.26 (m, 1H)、2.04–2.01 (m, 2H)、1.80–1.68 (m, 6H)、1.39–1.24 (m, 10H)、1.13–0.80 (m, 14H)。

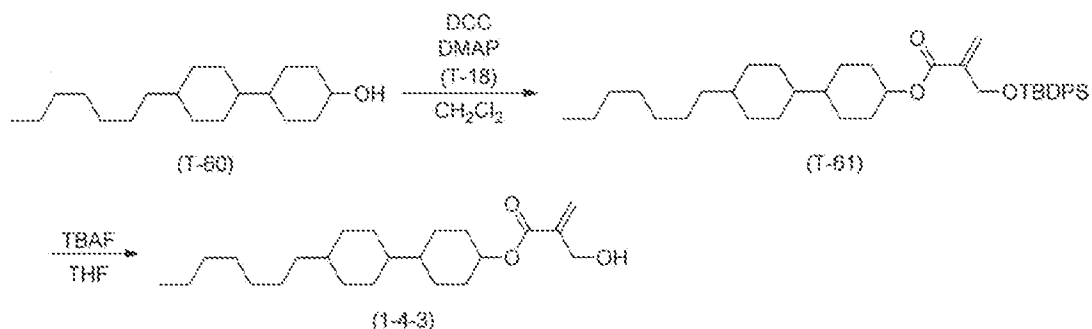
[0265] 化合物 (1-6-123) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $\text{C } 59.1 \quad \text{S}_A \quad 114 \quad \text{I}.$

[0266] [合成例16]

化合物 (1-4-3) の合成

[化108]



[0267] 第1工程

化合物 (T-60) (5.00 g) を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-61) (8.49 g ; 79%) を得た。

[0268] 第2工程

化合物 (T-61) (8.49 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-4-3) (3.54 g ; 69%) を得た。

[0269] 得られた化合物 (1-4-3) 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) : 6.22 (s, 1H)、5.79 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.76–4.72 (m, 1H)、4.31 (d, $J=6.8\text{ Hz}$, 2H)、2.29–2.26 (m, 1H)、2.04–2.01 (m, 2H)、1.80–1.68 (m, 6H)、1.40–1.25 (m, 12H)、1.16–0.80 (m, 14H)。

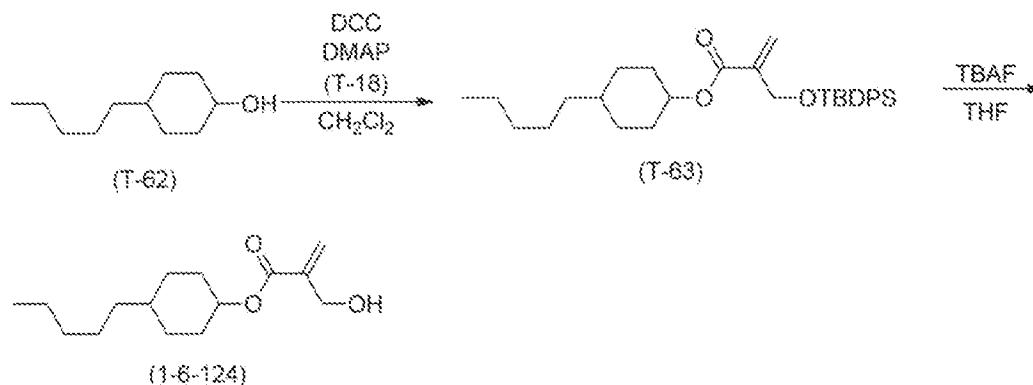
[0270] 化合物 (1-4-3) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $\text{C } 60.9 \quad \text{S}_A \quad 109 \quad \text{I}.$

[0271] [合成例17]

化合物 (1-6-124) の合成

[化109]



[0272] 第1工程

化合物 (T-62) (5.00 g) を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-63) (8.39 g ; 58%) を得た。

[0273] 第2工程

化合物 (T-63) (8.39 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-6-124) (3.85 g ; 89%) を得た。

[0274] 得られた化合物 (1-6-124) 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) : 6.22 (s, 1H)、5.80 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.78–4.72 (m, 1H)、4.31 (s, 2H)、2.74 (s, 1H)、2.02–1.98 (m, 2H)、1.82–1.79 (m, 2H)、1.42–1.16 (m, 11H)、1.07–0.97 (m, 2H)、0.88 (t, $J=6.8\text{ Hz}$, 3H)。

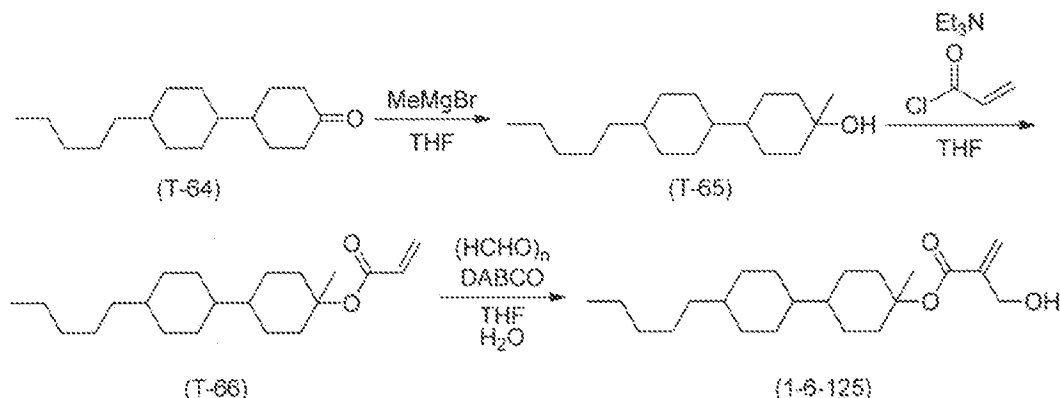
[0275] 化合物 (1-6-124) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $<-50.0\text{ }^\circ\text{C}$ 。

[0276] [合成例18]

化合物 (1-6-125) の合成

[化110]



[0277] 第1工程

化合物 (T-64) (10.0 g)、および THF (200 ml) を反応器に入れ、0℃まで冷却した。メチルマグネシウムブロミド (1.00 M; THF 溶液; 48 ml) をゆっくりと加え、室温に戻しつつ6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、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒に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 (体積比、トルエン:酢酸エチル=9:1) で精製して、化合物 (T-65) (4.58 g; 43%) を得た。

[0278] 第2工程

化合物 (T-65) (4.58 g)、トリエチルアミン (2.87 ml)、および THF (200 ml) を反応器に入れ、0℃まで冷却した。アクリロイルクロリド (1.68 ml) をゆっくりと加え、室温に戻しつつ5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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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 (体積比、トルエン:ヘプタン=3:2) で精製して、化合物 (T-66) (3.20 g; 58%) を得た。

[0279] 第3工程

化合物 (T-66) (3.20 g) を原料として用い、合成例1の第2工

[0283] 第1工程

化合物 (T-67) (25.0 g) トリフェニルホスフィン (43.9 g) を反応器に入れて、90℃にて6時間攪拌した。ヘプタンで濾過洗浄し、化合物 (T-68) (22.8 g ; 42%) を得た。

[0284] 第2工程

化合物 (T-69) (20.0 g)、ホスホノ酢酸トリエチル (22.5 g)、およびトルエン (300 ml) を反応器に入れ、0℃まで冷却した。そこへナトリウムエトキシド (20%エタノール溶液) (34.2 g) ををゆっくりと加え、室温に戻しつつ6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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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でトルエンにて精製して、化合物 (T-70) (23.3 g ; 90%) を得た。

[0285] 第3工程

化合物 (T-70) (23.3 g) およびトルエン (400 ml)、IPA (400 ml) を反応器に入れて、Pd/C (0.40 g) を加える、水素雰囲気です室温で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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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でトルエンにて精製して、化合物 (T-71) (21.5 g ; 92%) を得た。

[0286] 第4工程

水素化アルミニウムリチウム (1.57 g) およびTHF (200 ml) を反応器に入れて氷冷した。化合物 (T-71) (21.5 g) のTHF (200 ml) 溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ5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、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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 (体積比

、トルエン：酢酸エチル＝４：１）で精製して、化合物（Ｔ－７２）（１４．３ｇ；７７％）を得た。

[0287] 第５工程

化合物（Ｔ－７２）（１４．３ｇ）、およびジクロロメタン（３００ｍｌ）を反応器に入れて、氷冷した。デスーマーチンペルヨージナン（２７．１ｇ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ５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。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、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（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（Ｔ－７３）（９．９３ｇ；７０％）を得た。

[0288] 第６工程

化合物（Ｔ－６８）（２１．７ｇ）、およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、－３０℃まで冷却した。そこへカリウムｔ－ブトキシド（５．０１ｇ）をゆっくりと加え、－３０℃で１時間攪拌した。化合物（Ｔ－７３）（９．９３ｇ）のＴＨＦ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ５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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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でトルエンにて精製して、化合物（Ｔ－７４）（６．９７ｇ；５４％）を得た。

[0289] 第７工程

化合物（Ｔ－７４）（６．９７ｇ）、Ｐｄ／Ｃ（０．１０ｇ）、ＩＰＡ（１００ｍｌ）、およびトルエン（１００ｍｌ）を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物（Ｔ－５４）（６

、 31 g ; 90 %) を得た。

[0290] 第8工程

化合物 (T-75) (6.31 g) を原料として用い、合成例14の第5工程と同様の手法により、化合物 (T-76) (4.96 g ; 90 %) を得た。

[0291] 第9工程

化合物 (T-76) (4.96 g) 原料として用い、合成例14の第6工程と同様の手法により、化合物 (T-77) (4.24 g ; 85 %) を得た。

[0292] 第10工程

化合物 (T-77) (4.24 g) を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-78) (5.40 g ; 62 %) を得た。

[0293] 第11工程

化合物 (T-78) (4.24 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-6-126) (2.37 g ; 90 %) を得た。

[0294] 得られた化合物 (1-6-126) 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) : 6.25 (s, 1H)、5.81 (d, $J=0.8\text{ Hz}$, 1H)、4.79-4.73 (m, 1H)、4.34 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、2.32-2.29 (m, 1H)、2.12-2.03 (m, 4H)、1.82-1.72 (m, 6H)、1.57-1.49 (m, 2H)、1.44-1.35 (m, 4H)、1.22-0.84 (m, 11H)。

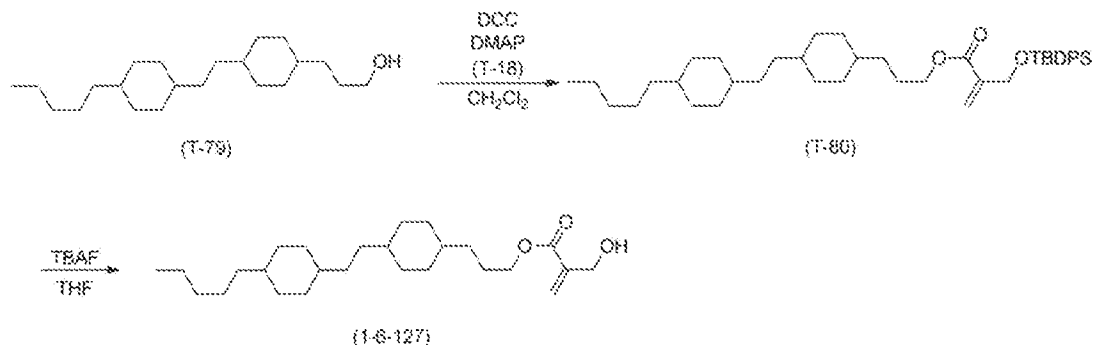
[0295] 化合物 (1-6-126) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C_{72.0}$ S_A 81.1 l 。

[0296] [合成例20]

化合物 (1-6-127) の合成

[化112]



[0297] 第1工程

化合物 (T-79) (5.00 g) を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-80) (6.40 g ; 64%) を得た。

[0298] 第2工程

化合物 (T-80) (6.40 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-6-127) (2.02 g ; 50%) を得た。

[0299] 得られた化合物 (1-6-127) 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) : 6.24 (s, 1H)、5.82 (d, $J=1.3\text{ Hz}$, 1H)、4.33 (d, $J=5.5\text{ Hz}$, 2H)、4.15 (t, $J=6.8\text{ Hz}$, 2H)、2.39–2.37 (m, 1H)、1.73–1.66 (m, 10H)、1.32–1.09 (m, 18H)、0.91–0.80 (m, 11H)。

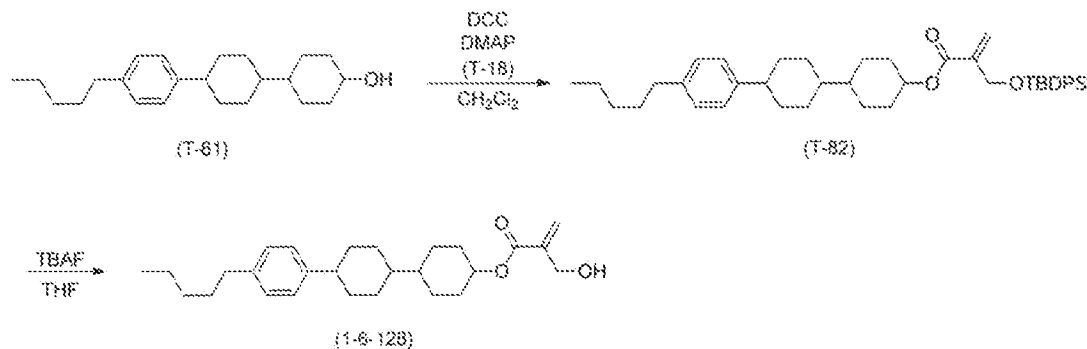
[0300] 化合物 (1-6-127) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : C 110 ℃。

[0301] [合成例21]

化合物 (1-6-128) の合成

[化113]



[0302] 第1工程

化合物 (T-81) (5.00 g) を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物 (T-82) (5.94 g ; 60%) を得た。

[0303] 第2工程

化合物 (T-82) (5.94 g) を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物 (1-6-128) (2.64 g ; 70%) を得た。

[0304] 得られた化合物 (1-6-128) 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) : 7.12–7.08 (m, 4H)、6.23 (s, 1H)、5.80 (d, $J=1.0\text{ Hz}$, 1H)、4.78–4.74 (m, 1H)、4.32 (d, $J=6.6\text{ Hz}$, 2H)、2.55 (t, $J=7.6\text{ Hz}$, 2H)、2.41 (tt, $J=12.1\text{ Hz}$, $J=3.3\text{ Hz}$, 1H)、2.28 (t, $J=6.5\text{ Hz}$, 1H)、2.07–2.04 (m, 2H)、1.93–1.90 (m, 2H)、1.85–1.82 (m, 4H)、1.61–1.57 (m, 2H)、1.44–1.30 (m, 8H)、1.20–1.13 (m, 6H)、0.88 (t, $J=6.8\text{ Hz}$, 3H)。

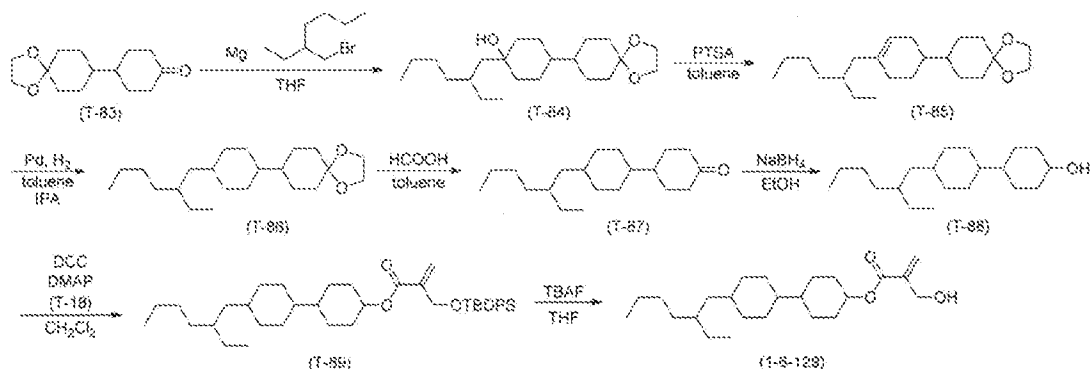
[0305] 化合物 (1-6-128) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C \quad 85.0 \quad I.$

[0306] [合成例22]

化合物(1-6-129)の合成

[化114]



[0307] 第1工程

マグネシウム(削状)(3.67g)、およびTHF(50ml)を反応器に入れた、1-ブromo-2-ヘキサエチレン(29.1g)のTHF(50ml)溶液をゆっくりと滴下し、30℃で1時間攪拌した。そこへ、化合物(T-83)(30.0g)のTHF(100ml)溶液をゆっくりと滴下し、室温で6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。一緒に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、トルエン：酢酸エチル=4：1)で精製して、化合物(T-84)(8.88g；20%)を得た。

[0308] 第2工程

化合物(T-84)(8.88g)、p-トルエンスルホン酸一水和物(0.47g)、エチレングリコール(1.87g)、およびトルエン(200ml)を反応器に入れ、90℃で5時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物(T-85)(8.00g；95%)を得た。

[0309] 第3工程

化合物 (T-85) (8.00 g)、Pd/C (0.12 g)、IPA (200 ml)、およびトルエン (200 ml) を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で 14 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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物 (T-86) (7.48 g; 93%) を得た。

[0310] 第 4 工程

化合物 (T-86) (7.48 g) を原料として用い、合成例 14 の第 5 工程と同様の手法により、化合物 (T-87) (5.72 g; 88%) を得た。

[0311] 第 5 工程

水素化ホウ素ナトリウム (0.45 g)、およびエタノール (50 ml) を反応器に入れ、0℃まで冷却した。そこへ、化合物 (T-87) (5.72 g) のエタノール (50 ml) 溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ 6 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、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒に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 (体積比、トルエン:酢酸エチル=9:1) で精製して、化合物 (T-88) (2.65 g; 46%) を得た。

[0312] 第 6 工程

化合物 (T-88) (2.65 g) を原料として用い、合成例 6 の第 3 工程と同様の手法により、化合物 (T-82) (3.72 g; 67%) を得た。

[0313] 第 2 工程

化合物 (T-82) (3.72 g) を原料として用い、合成例 6 の第 4 工程と同様の手法により、化合物 (1-6-129) (1.60 g; 70%) を得た。

[0314] 得られた化合物 (1-6-129) 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) : 6.22 (s, 1H)、5.79 (d, $J=1.0\text{ Hz}$, 1H)、4.77–4.71 (m, 1H)、4.31 (d, $J=6.5\text{ Hz}$, 2H)、2.31 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 1H)、2.04–2.01 (m, 2H)、1.80–1.68 (m, 6H)、1.39–0.92 (m, 20H)、0.90–0.80 (m, 8H)。

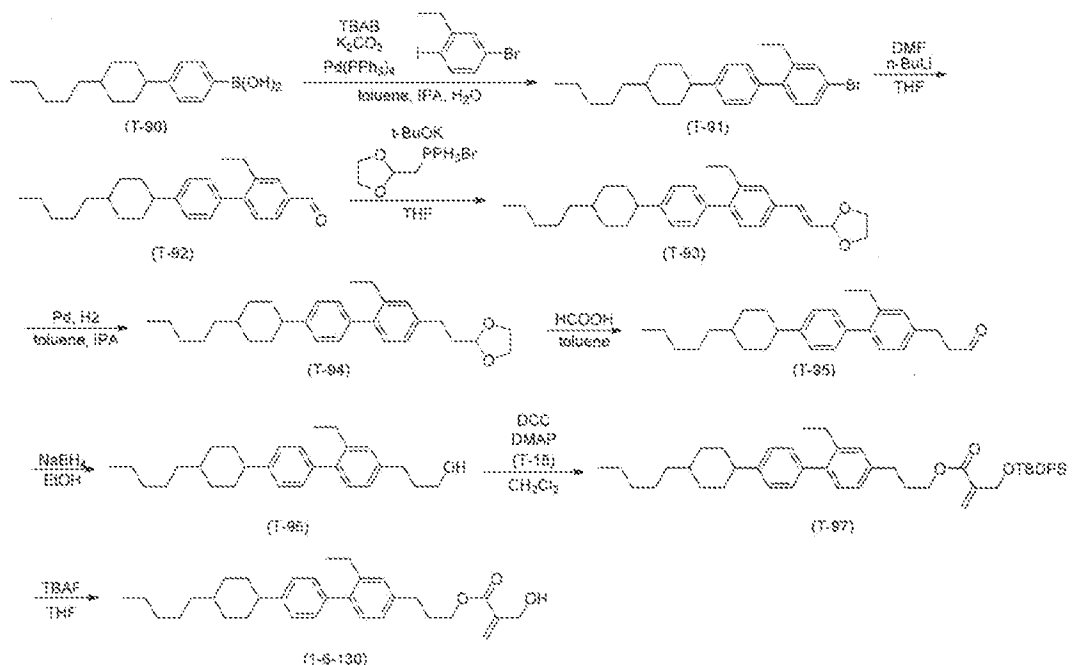
[0315] 化合物 (1-6-129) の物性は、次のとおりであった。

転移温度 : $C < -50.0^\circ\text{C}$ 。

[0316] [合成例 23]

化合物 (1-6-130) の合成

[化115]



[0317] 第 1 工程

化合物 (T-90) (21.1 g)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.74 g)、炭酸カリウム (17.7 g)、テトラブチルアンモニウムブロミド (8.3 g)、4-ブromo-2-エチル-1-ヨードベンゼン (20.0 g)、トルエン (200 ml)、IPA (150 ml)

）、およびH₂O（50 ml）を反応器に入れ、80℃で6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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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（体積比、ヘプタン：トルエン＝4：1）で精製して、化合物（T-91）（22.6 g；85%）を得た。

[0318] 第2工程

化合物（T-91）（22.6 g）、THF（200 ml）を反応器に入れ、-70℃まで冷却し、ブチルリチウム（1.60 M；ヘキサン溶液；41 ml）をゆっくりと滴下し、-70℃で1時間攪拌した。そこへDMF（6.35 ml）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ12時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物（T-92）（16.1 g；81%）を得た。

[0319] 第3工程

（1,3-ジオキソラン-2-イル）メチルトリフェニルホスホニウムブロミド（22.8 g）およびTHF（200 ml）を反応器に入れて-30℃まで冷却する。カリウムt-ブトキシド（5.90 g）を加え、-30℃で1時間攪拌した。化合物（T-92）（16.1 g）を加え、室温に戻しつつ6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、水層をトルエンで抽出した。一緒に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にてトルエンで精製して、化合物（T-93）（16.5 g；86%）を得た。

[0320] 第4工程

化合物（T-93）（16.5 g）を原料として用い、合成例12の第2工程と同様の手法により、化合物（T-94）（14.9 g；90%）を得

た。

[0321] 第5工程

化合物(T-94)(14.9g)を原料として用い、合成例12の第3工程と同様の手法により、化合物(T-95)(11.7g;88%)を得た。

[0322] 第6工程

化合物(T-95)(11.7g)を原料として用い、合成例12の第4工程と同様の手法により、化合物(T-96)(9.41g;80%)を得た。

[0323] 第7工程

化合物(T-96)(5.00g)を原料として用い、合成例6の第3工程と同様の手法により、化合物(T-97)(6.37g;70%)を得た。

[0324] 第7工程

化合物(T-97)(6.37g)を原料として用い、合成例6の第4工程と同様の手法により、化合物(1-6-130)(3.40g;80%)を得た。

[0325] 得られた化合物(1-6-130)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): 7.23–7.19 (m, 4H)、7.13–7.10 (m, 2H)、7.05–7.03 (m, 1H)、6.25 (s, 1H)、5.84 (d, $J=1.1\text{ Hz}$, 1H)、4.33 (d, $J=6.7\text{ Hz}$, 2H)、4.25 (t, $J=6.6\text{ Hz}$, 2H)、2.74 (t, $J=7.3\text{ Hz}$, 2H)、2.58 (q, $J=7.5\text{ Hz}$, 2H)、2.50 (tt, $J=12.1\text{ Hz}$, $J=3.3\text{ Hz}$, 1H)、2.22 (t, $J=6.7\text{ Hz}$, 1H)、2.10–2.04 (m, 2H)、1.96–1.87 (m, 4H)、1.52–1.44 (m, 2H)、1.33–1.21 (m, 9H)、1.11–1.02 (m, 5H)、0.90 (t, $J=6.9\text{ Hz}$, 3H)。

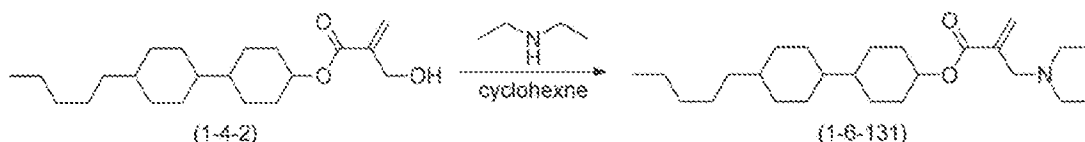
[0326] 化合物（１－６－１３０）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：C 40.0 I.

[0327] [合成例 24]

化合物（１－６－１３１）の合成

[化116]



化合物（１－４－２）（３．００ｇ）、ジエチルアミン（１．３０ｇ）、およびシクロヘキサン（１００ｍｌ）を反応器に入れ、７５℃で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、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒に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（体積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製して、化合物（１－６－１３１）（０．５２ｇ；１５％）を得た。

[0328] 得られた化合物（１－６－１３１）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) : 6.18 (s, 1H)、5.74 (s, 1H)、4.74–4.67 (m, 1H)、3.23 (s, 2H)、2.50 (q, $J=7.1\text{ Hz}$, 4H)、2.03–2.01 (m, 2H)、1.78–1.68 (m, 6H)、1.37–0.80 (m, 28H)。

[0329] 化合物（１－６－１３１）の物性は、次のとおりであった。

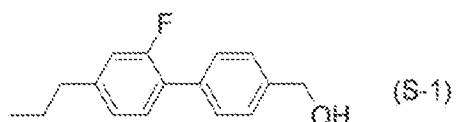
転移温度：C 14.1 S_A 58.9 I.

[0330] [比較例 1]

比較化合物として、化合物（S-1）を合成し、特性を測定した。この化合物は、国際公開第2014/090362号パンフレットに記載されており、本発明の化合物に類似しているからである。

[0331]

[化117]



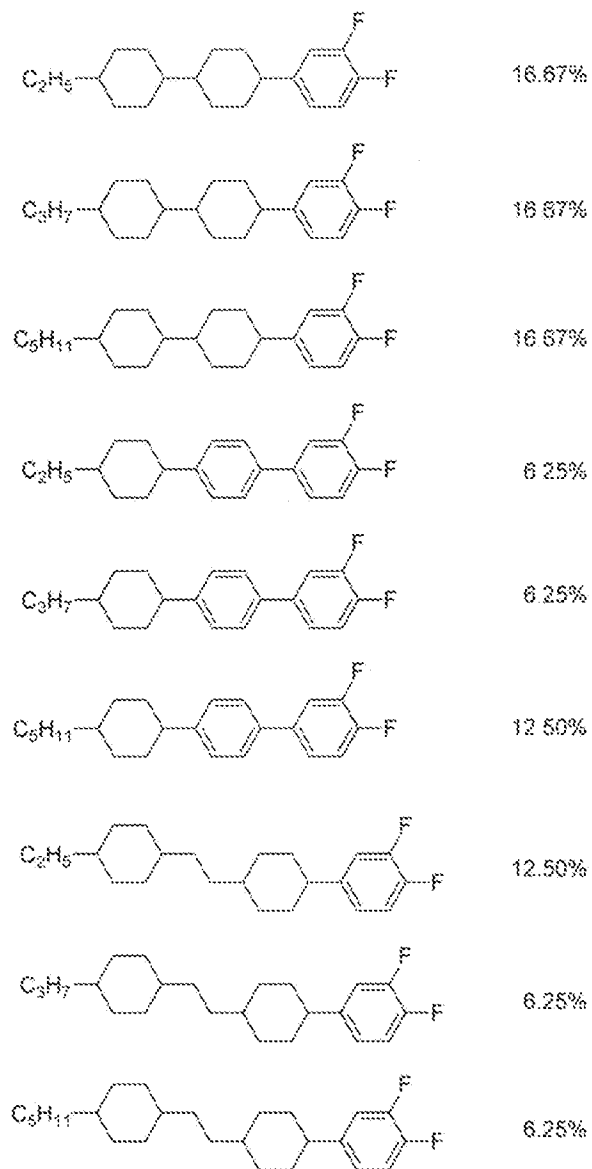
[0332] 得られた比較化合物 (S-1) のNMR分析値は以下の通りである。

$^1\text{H-NMR}$: 化学シフト δ (ppm; CDCl_3) : 7.57–7.52 (m, 2H)、7.45–7.42 (m, 2H)、7.36–7.30 (m, 1H)、7.04–6.95 (m, 2H)、4.75 (d, 6.0 Hz, 2H)、2.62 (t, $J=7.8$ Hz, 2H)、1.75–1.64 (m, 3H)、0.98 (t, $J=7.4$ Hz, 3H) .

[0333] 化合物 (1-4-22) と比較化合物 (S-1) の垂直配向性および電圧保持率 (VHR) を比較した。なお、評価には組成物 (i) および重合性化合物 (M-1-1) を用いた。

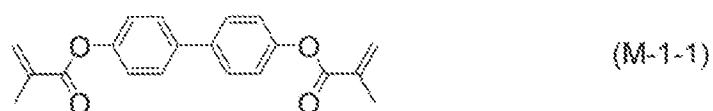
[0334] 組成物 (i) の成分の割合を重量%で示す。

[化118]



[0335] 重合性化合物 (M-1-1) を以下に示す。

[化119]



[0336] ・垂直配向性

組成物 (i) に重合性化合物 (M-1-1) を 0.4 重量% の割合で添加した。ここに化合物 (1-4-22) または比較化合物 (S-1) を 3.5

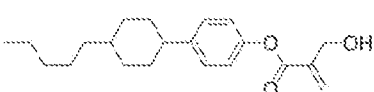
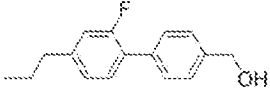
重量%の割合で添加した。この混合物を2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が3.5 μm である配向膜を有さない素子に注入した。この素子を偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。液晶分子が十分に配向し、光が素子を通過しない場合は、垂直配向性が「良好」と判断した。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

[0337] ・電圧保持率（VHR）

上記で作製した素子にアイグラフィックス株式会社製ブラックライト、F40T10/BL（ピーク波長369 nm）を用いて紫外線を照射（30 J）することによって、重合性化合物を重合させた。この素子に60℃でパルス電圧（1 Vで60マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で1.67秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Aを求めた。面積Bは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Bに対する面積Aの百分率で表した。

[0338] [表2]

表2. 化合物(1-4-22)と比較化合物(S-1)の物性

		
	化合物(1-4-22)	比較化合物(S-1)
垂直配向性	良好	良好
電圧保持率(VHR)	80.30%	23.79%

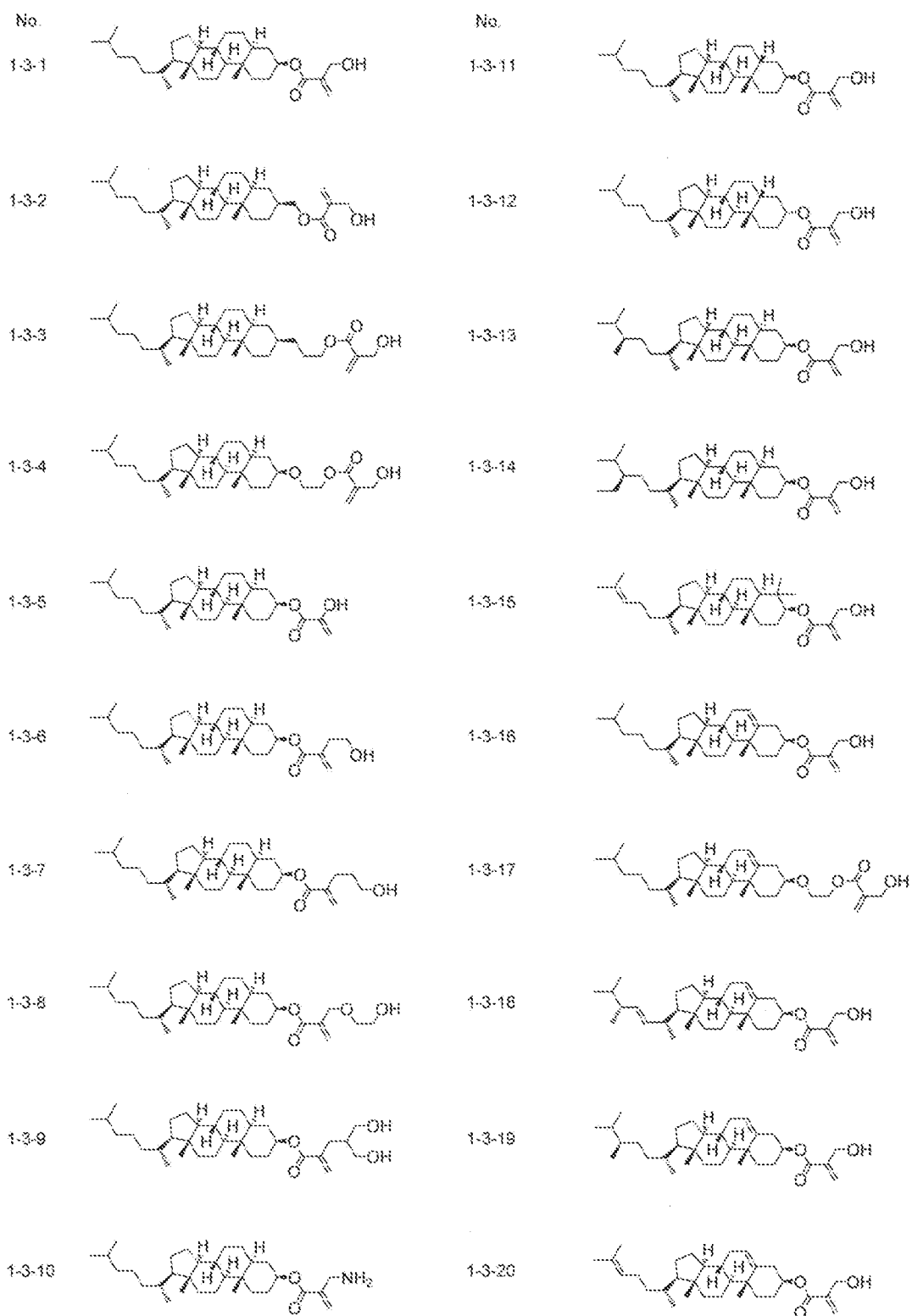
[0339] 合成例2の化合物(1-4-22)と比較化合物(S-1)の物性を表2にまとめた。両方の化合物は共に、配向膜を有さない素子において良好な垂直配向性を示した。一方、化合物(1-4-22)を用いた場合、比較化合物(S-1)を用いた場合よりも電圧保持率が高い。これは比較化合物(S-1)の様な-OH基を有する極性化合物は素子の電圧保持率を大きく低下させるが、化合物(1-4-22)の様に重合性を付与する事によって、重合性化合物によって生成する重合体に極性化合物が取り込まれる事により、電圧保持率の低下が抑制された為である。したがって化合物(1-4-22

)の方が、素子の電圧保持率を低下させる事無く良好な垂直配向性を示す、優れた化合物であると言える。

[0340] 実施例1に記載した合成法に準じて、以下の化合物(1-3-1)から(1-3-40)、化合物(1-4-1)から(1-4-120)、化合物(1-5-1)から(1-5-140)、化合物(1-6-1)から(1-6-120)、化合物(1-6-121)～(1-6-240)、および化合物(1-4-241)～(1-4-260)を合成することが可能である。

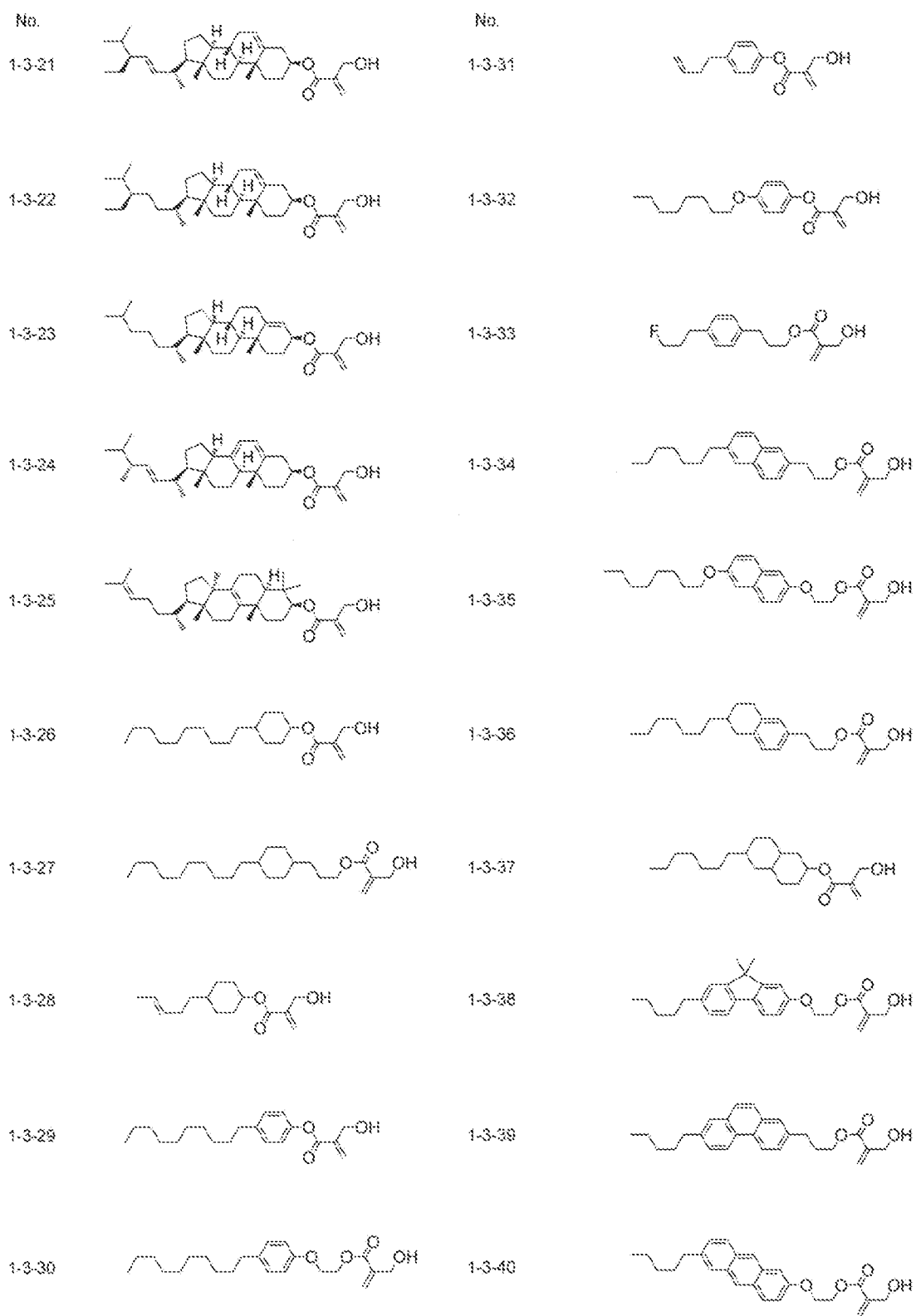
[0341]

[化120]



[0342]

[化121]



[0343]

[化122]

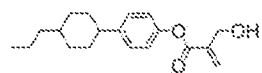
No.		No.	
1-4-1		1-4-11	
1-4-2		1-4-12	
1-4-3		1-4-13	
1-4-4		1-4-14	
1-4-5		1-4-15	
1-4-6		1-4-16	
1-4-7		1-4-17	
1-4-8		1-4-18	
1-4-9		1-4-19	
1-4-10		1-4-20	

[0344]

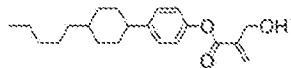
[化123]

No.

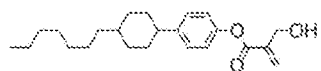
1-4-21



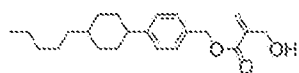
1-4-22



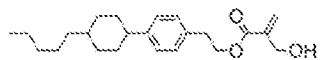
1-4-23



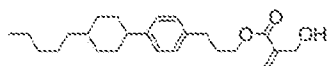
1-4-24



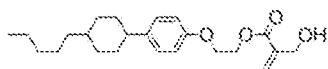
1-4-25



1-4-26



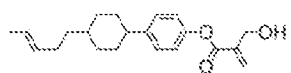
1-4-27



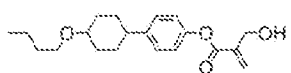
1-4-28



1-4-29

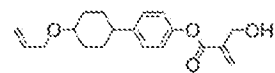


1-4-30

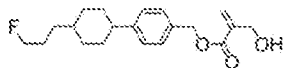


No.

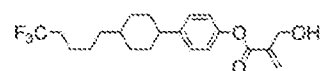
1-4-31



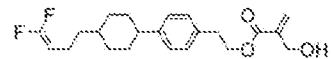
1-4-32



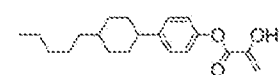
1-4-33



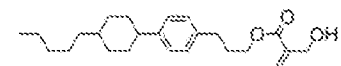
1-4-34



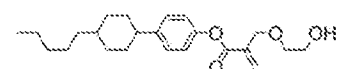
1-4-35



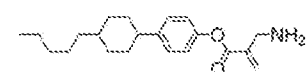
1-4-36



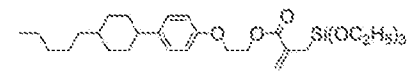
1-4-37



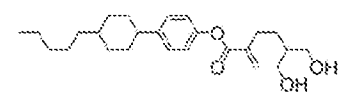
1-4-38



1-4-39

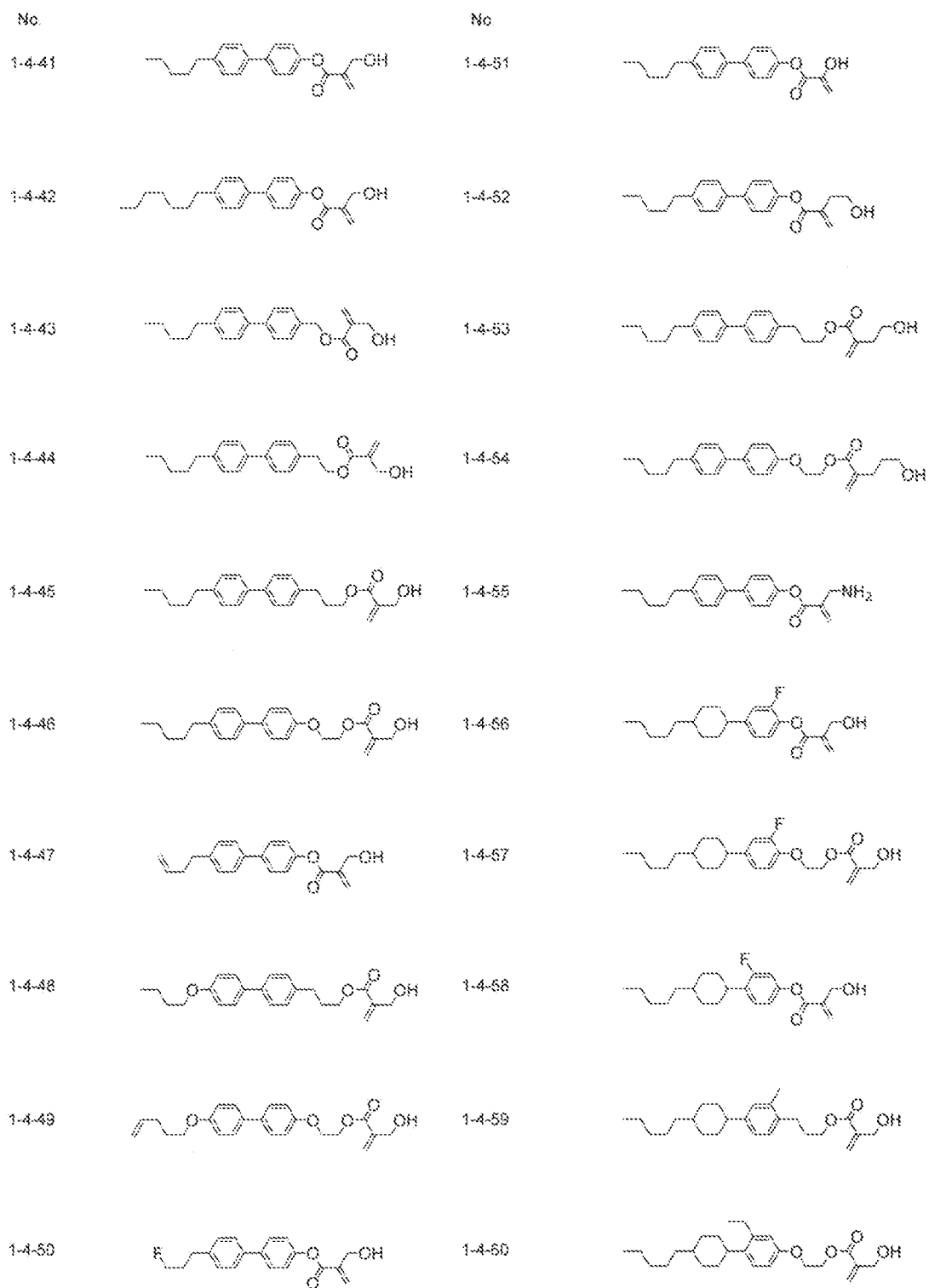


1-4-40



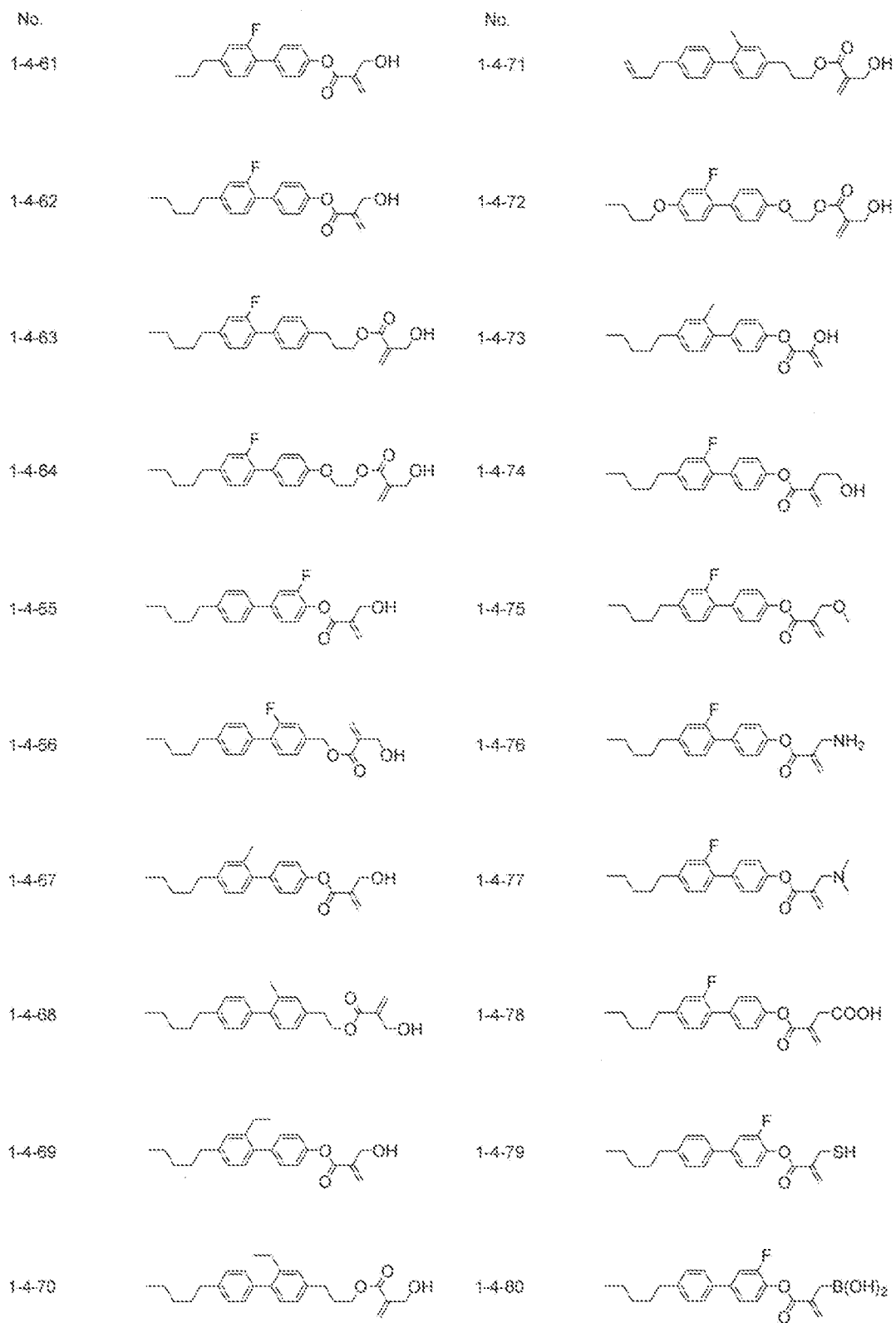
[0345]

[化124]

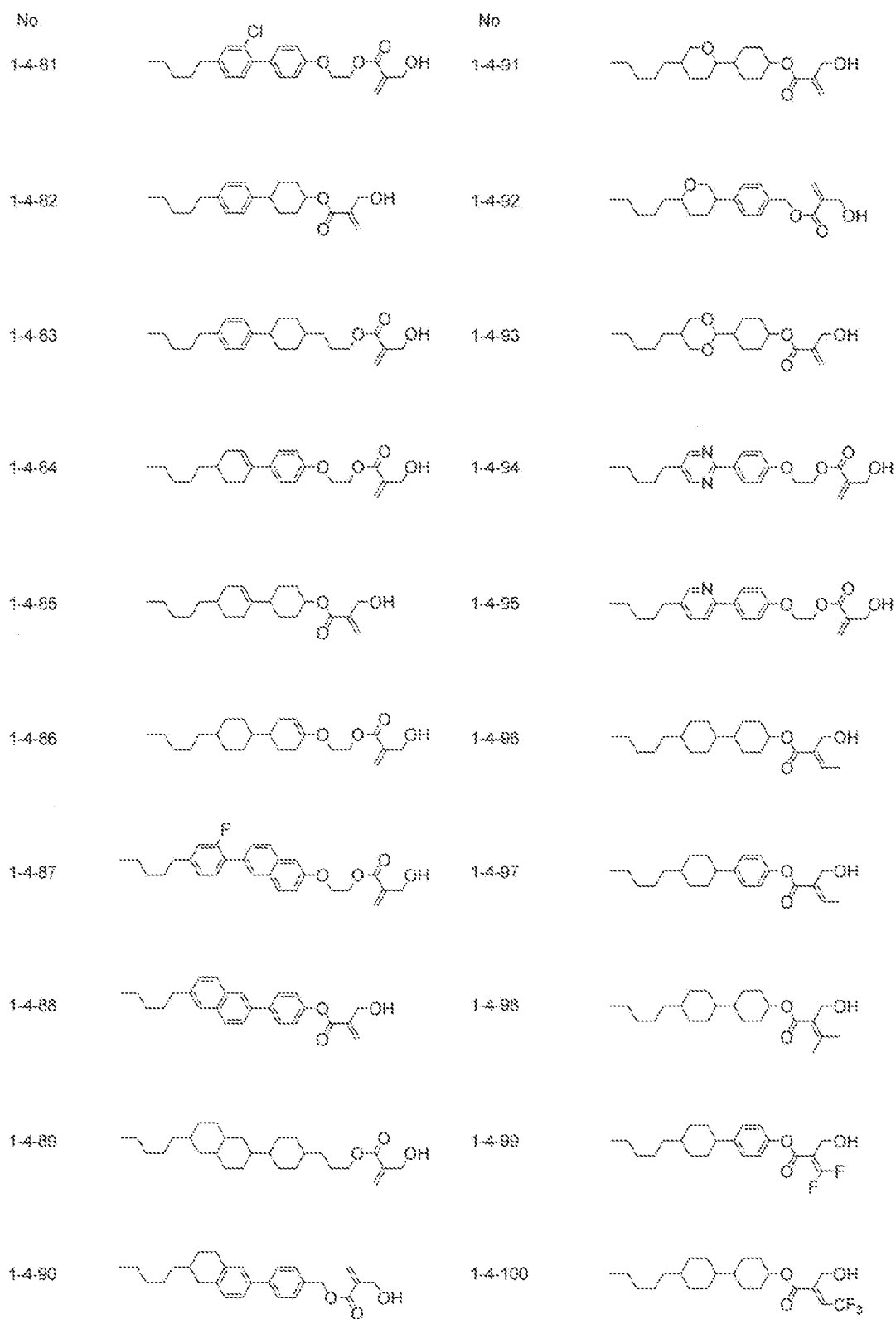


[0346]

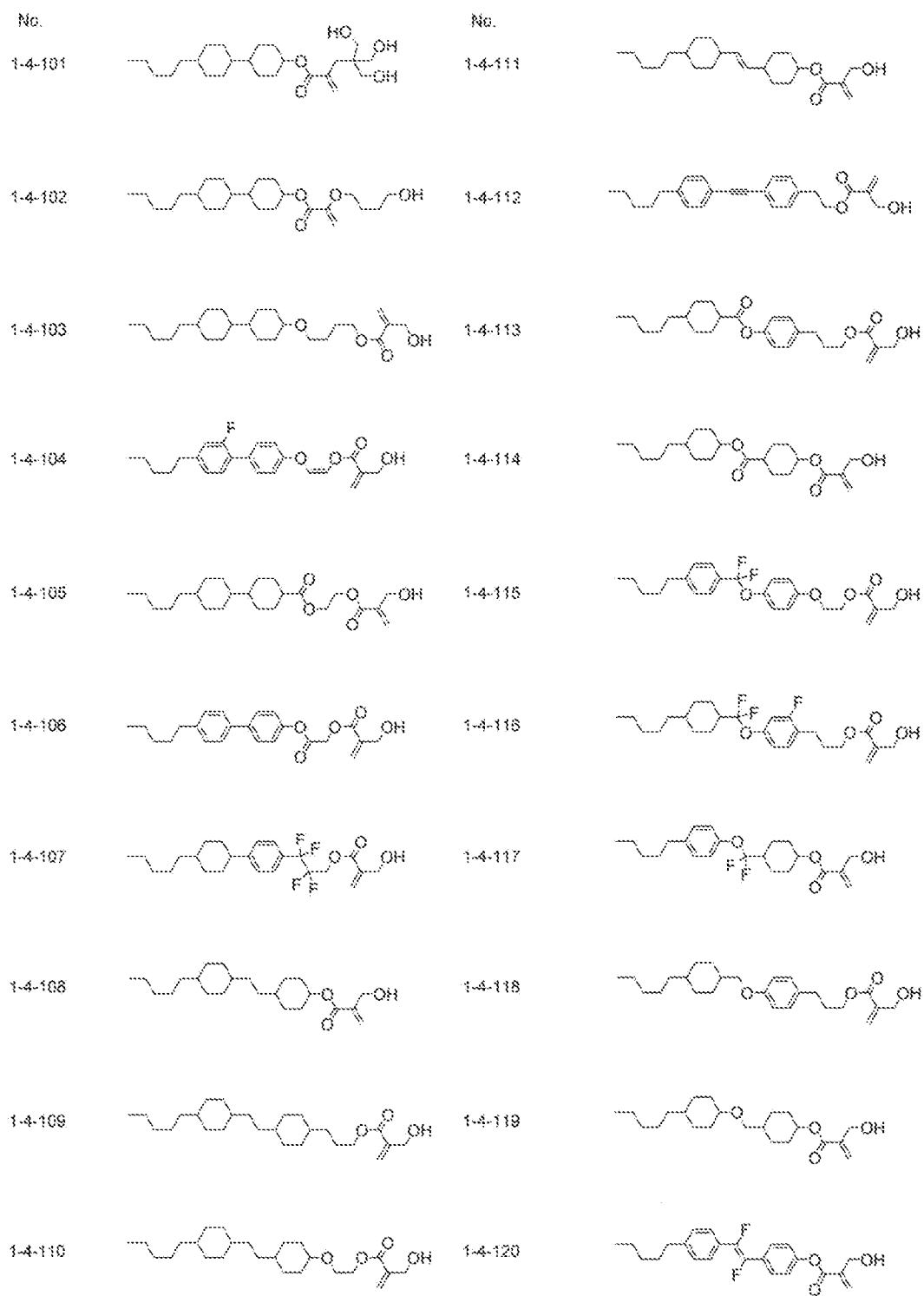
[化125]



[化126]

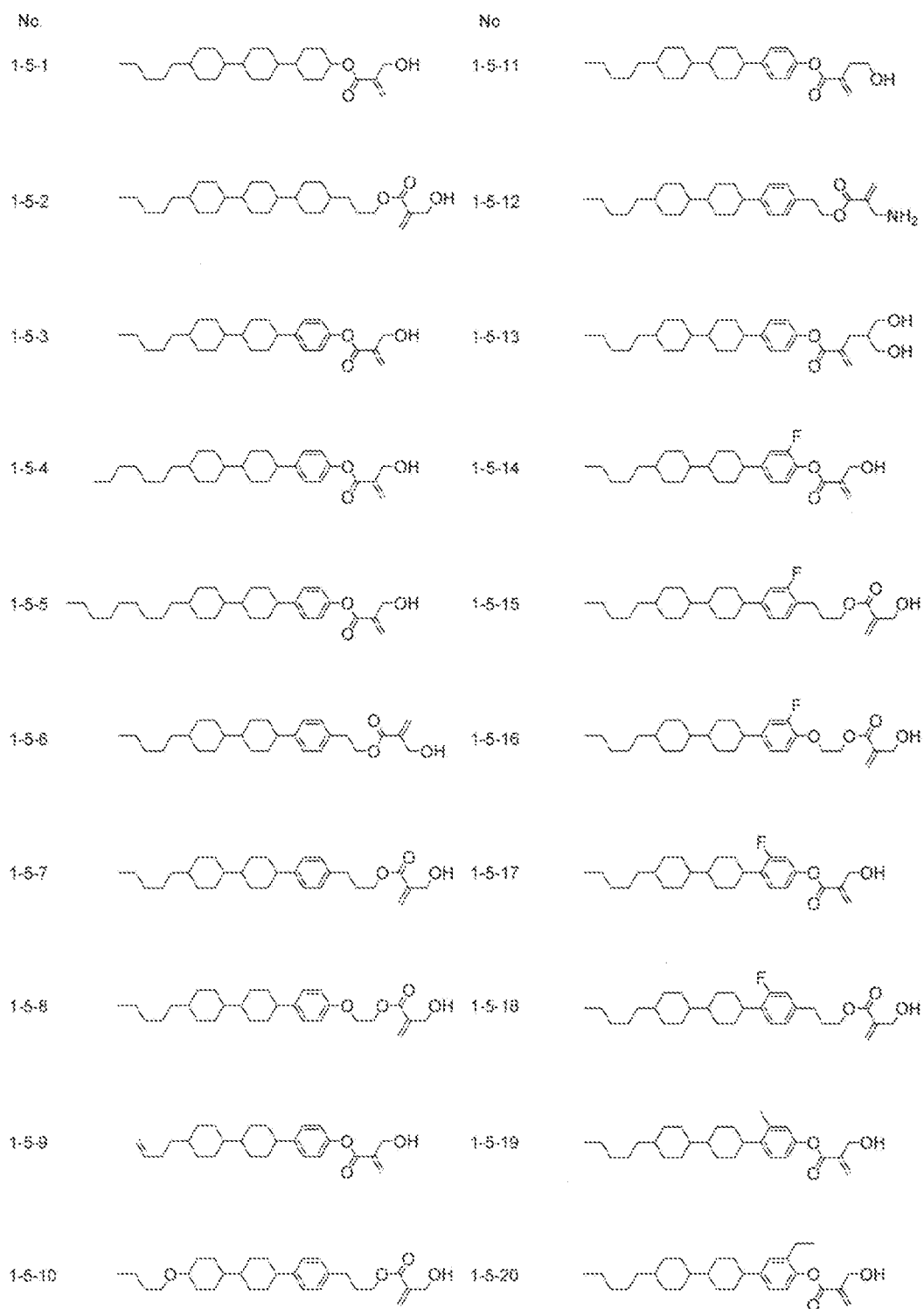


[化127]



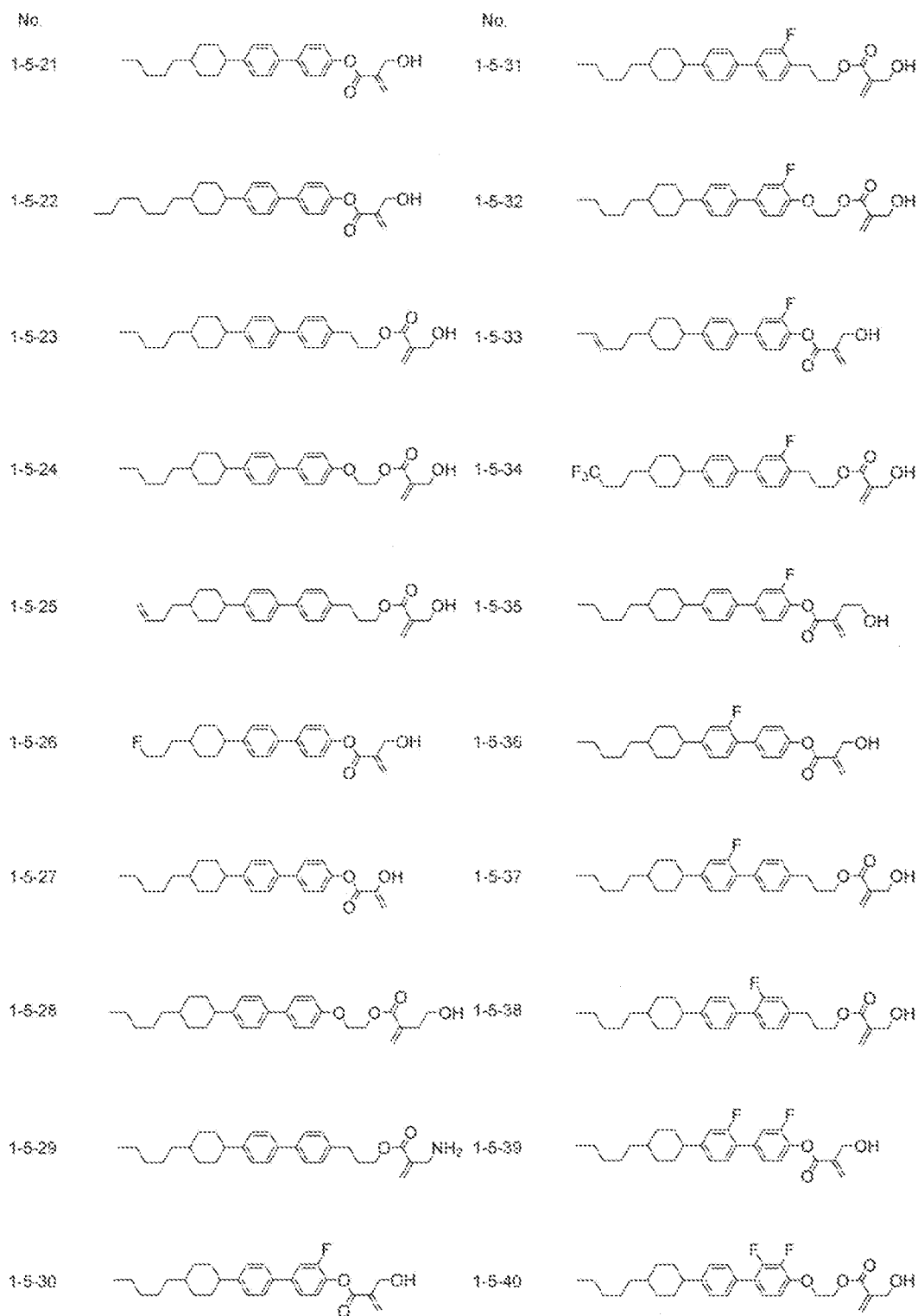
[0349]

[化128]



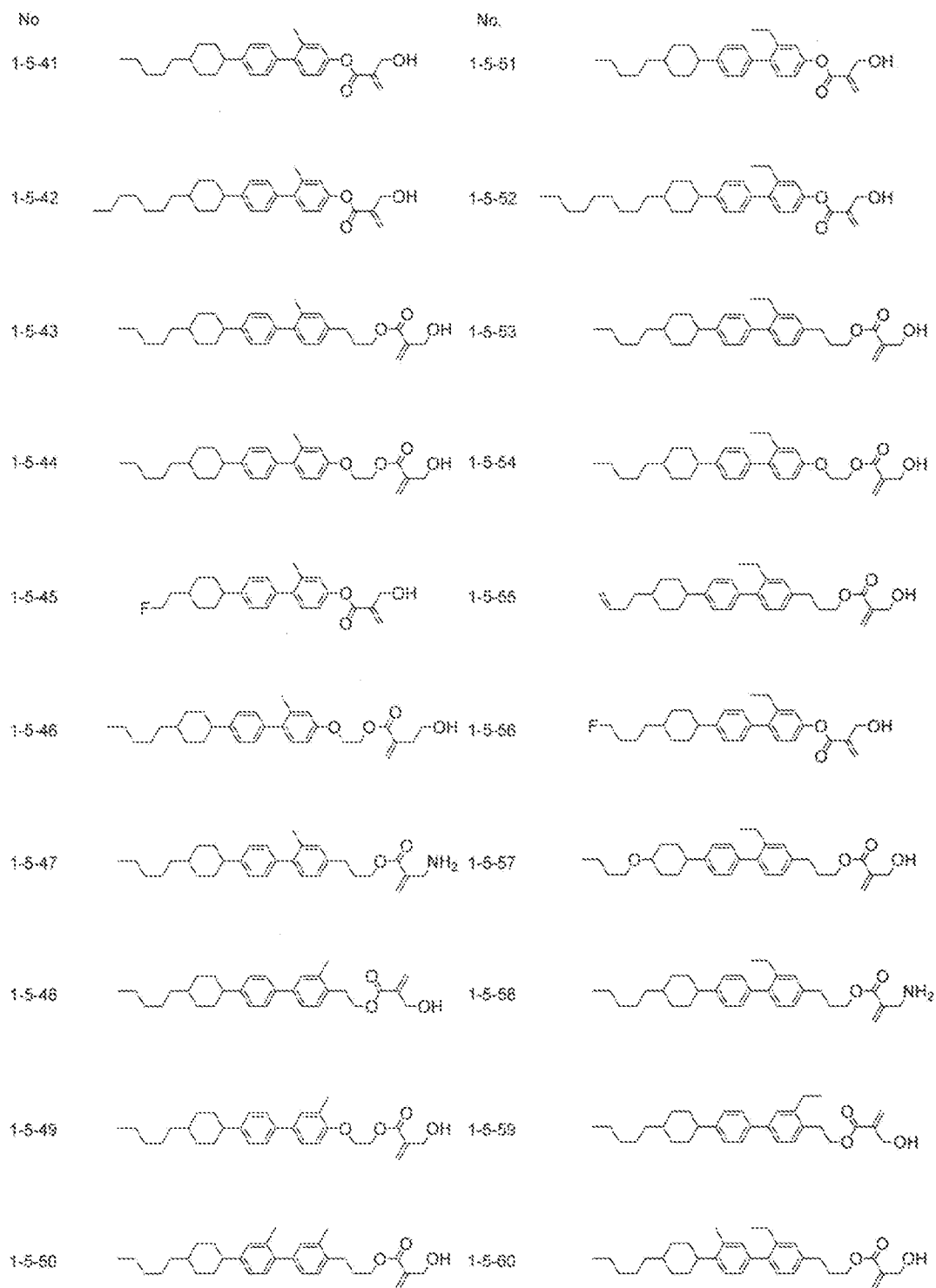
[0350]

[化129]



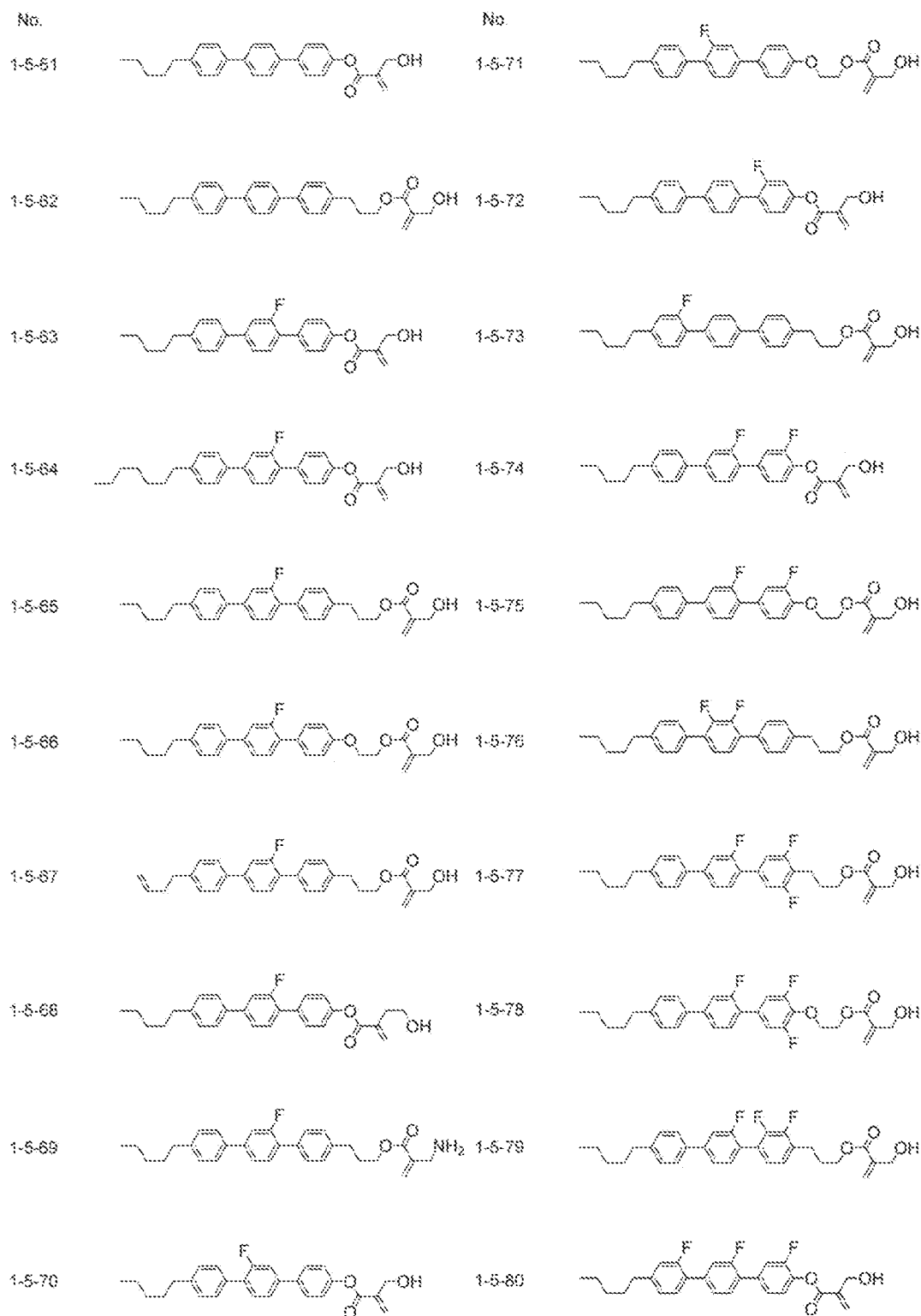
[0351]

[化130]



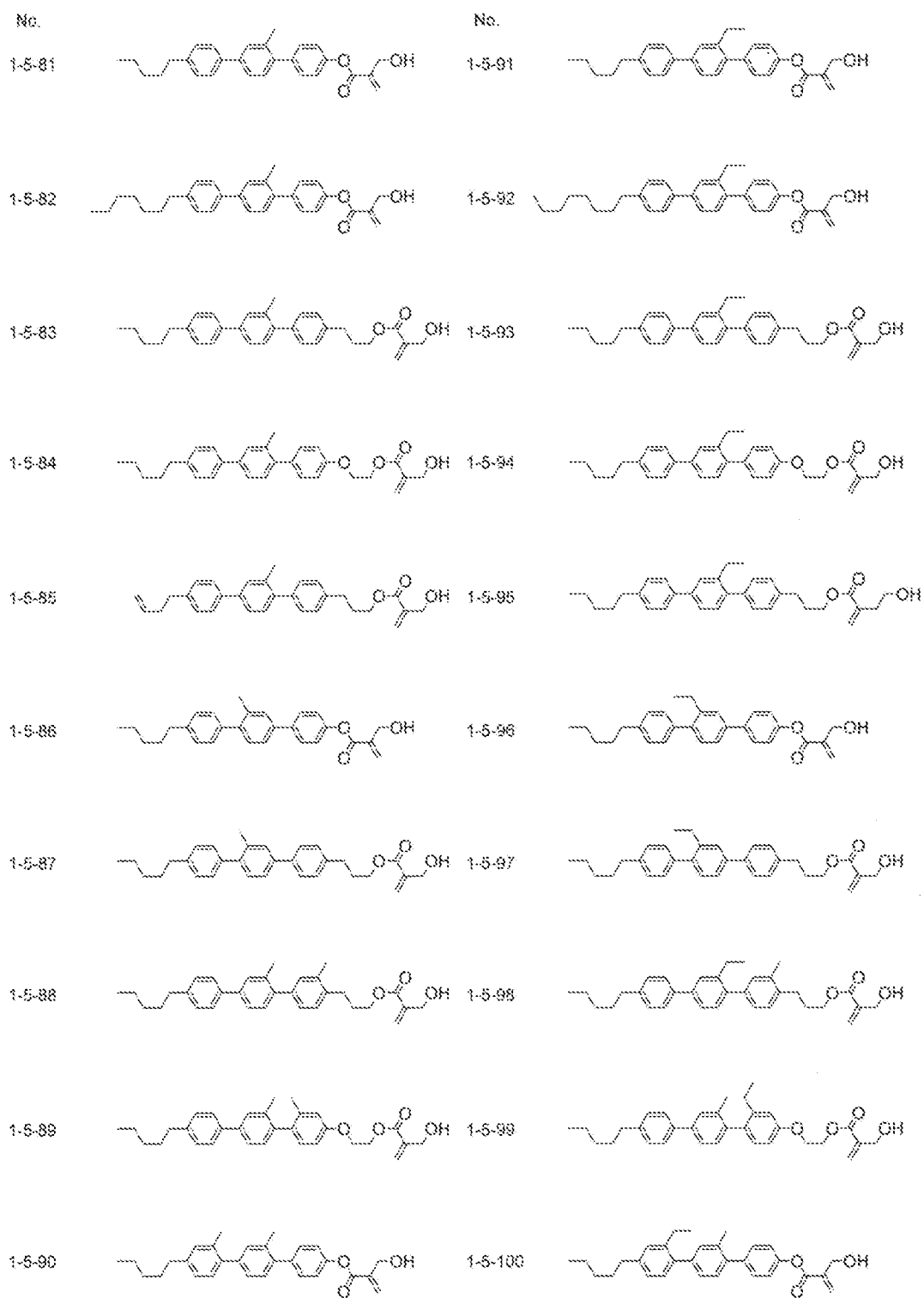
[0352]

[化131]



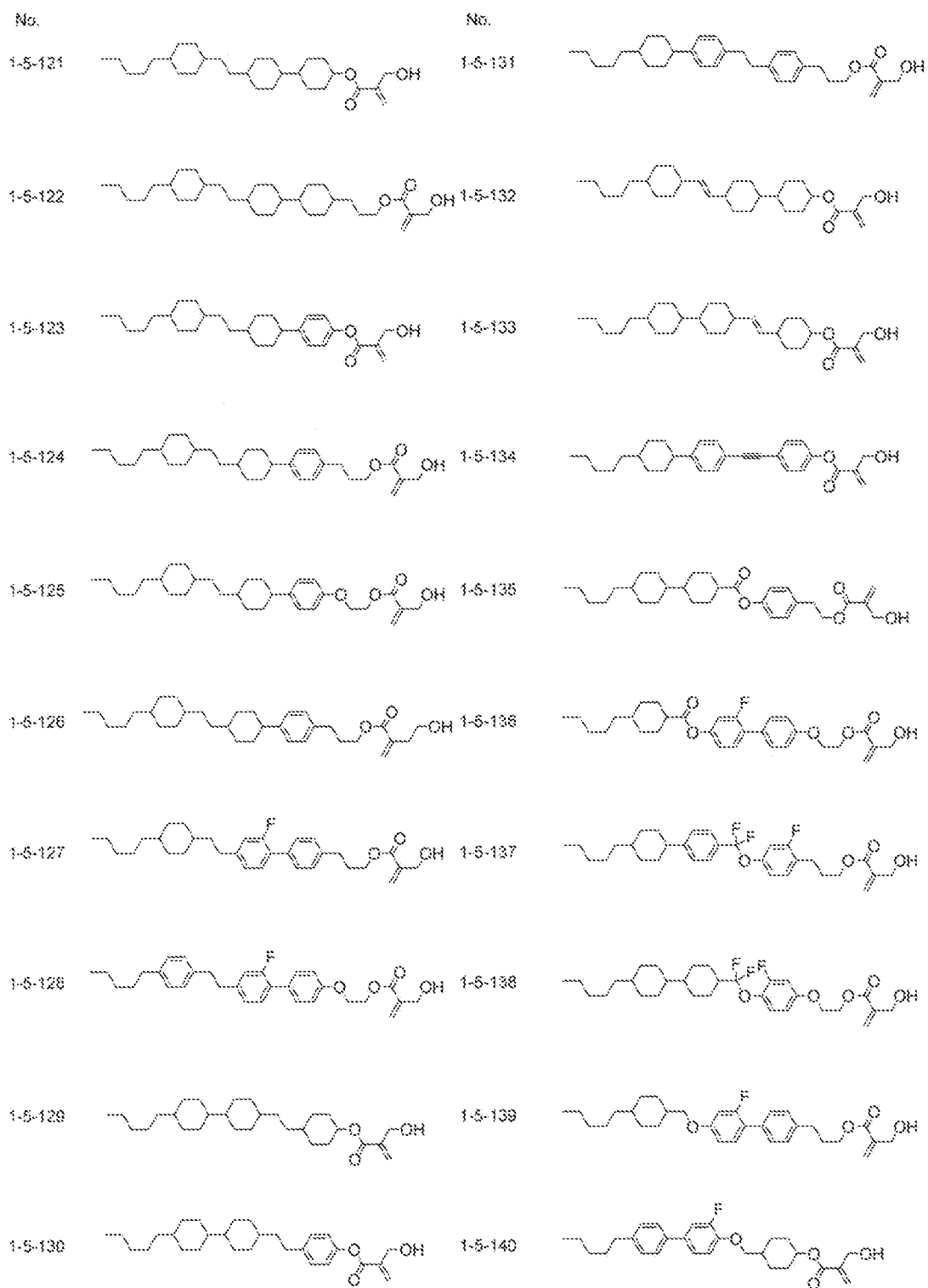
[0353]

[化132]



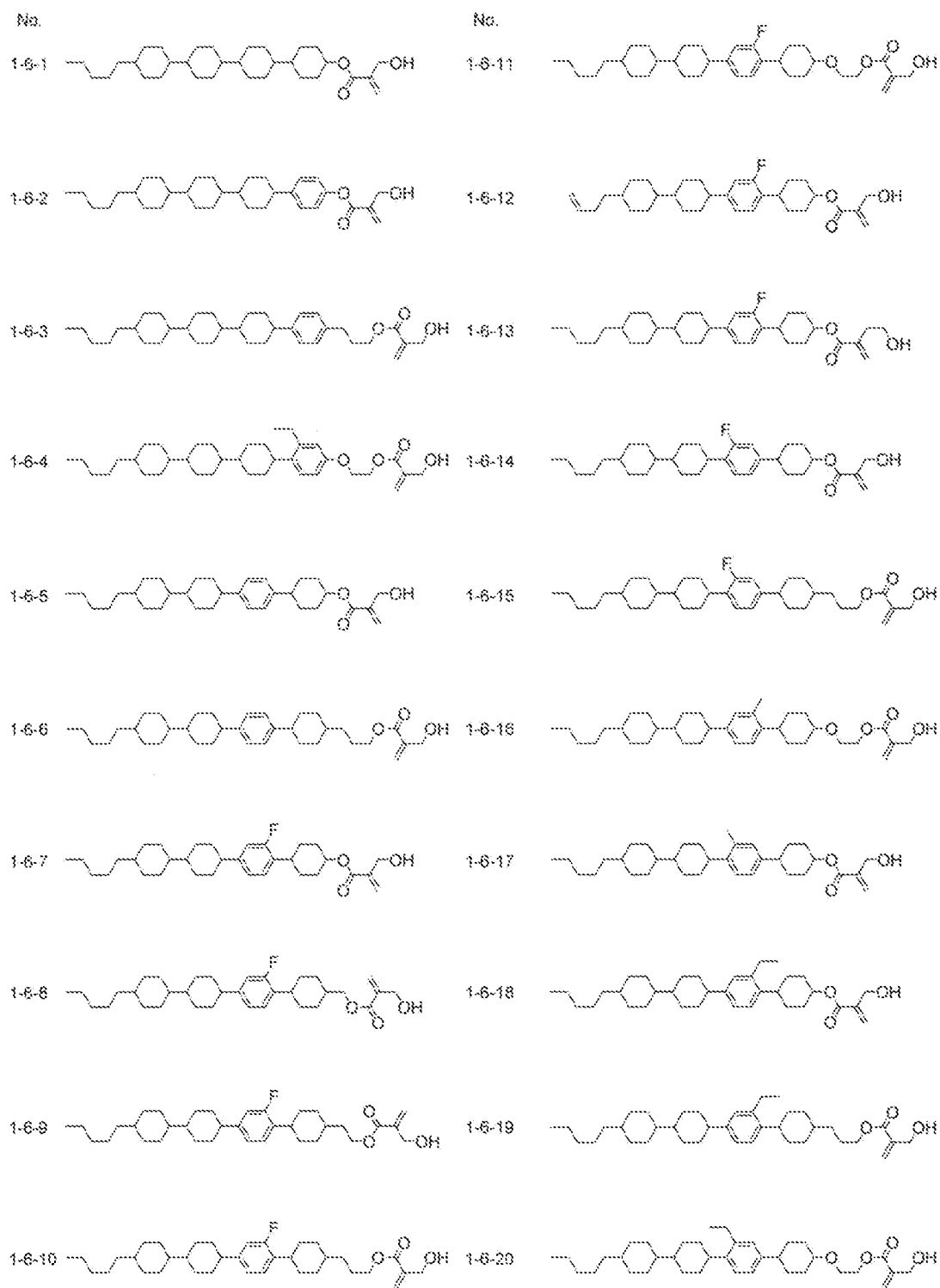
[0354]

[化134]



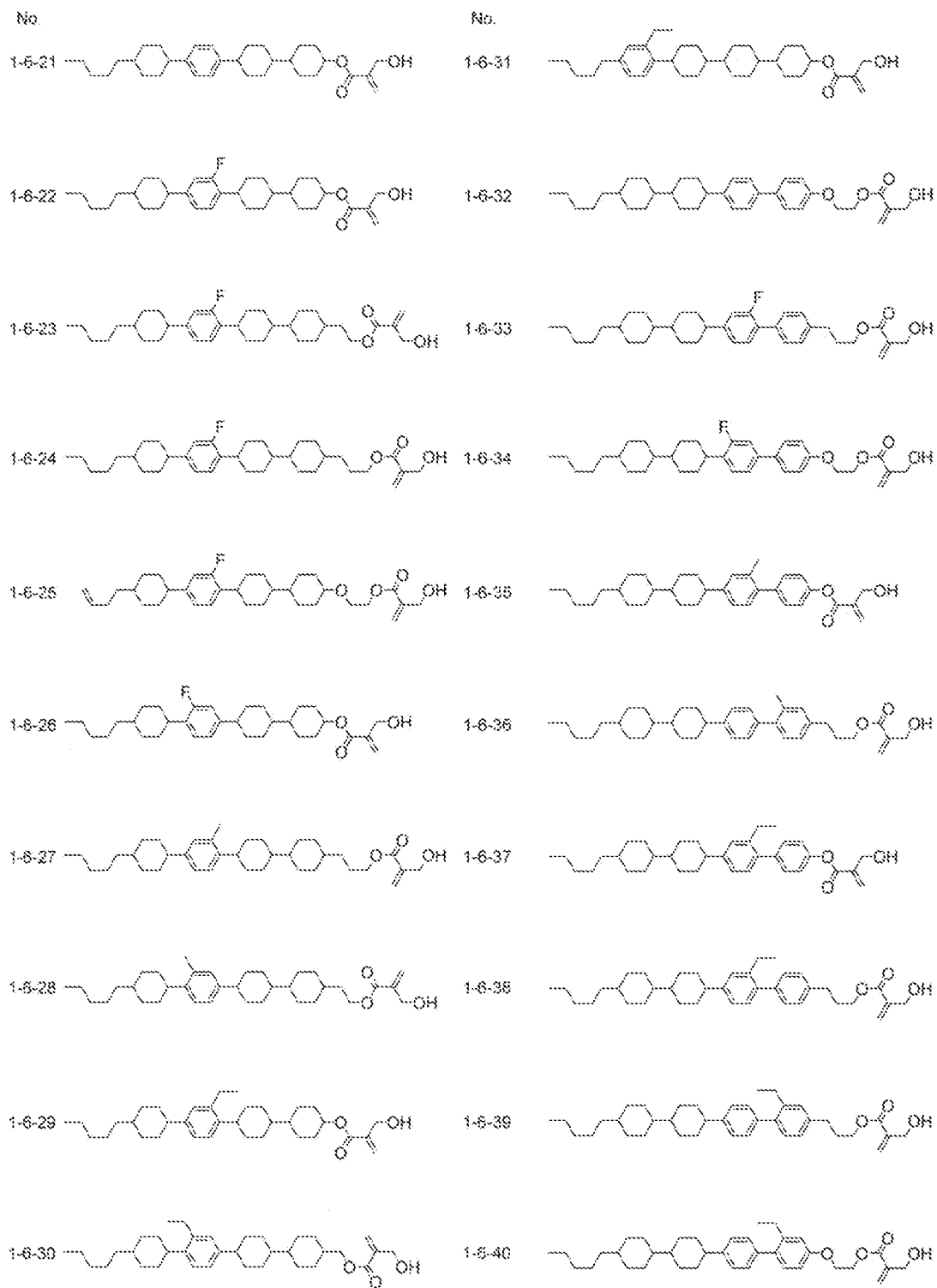
[0356]

[化135]



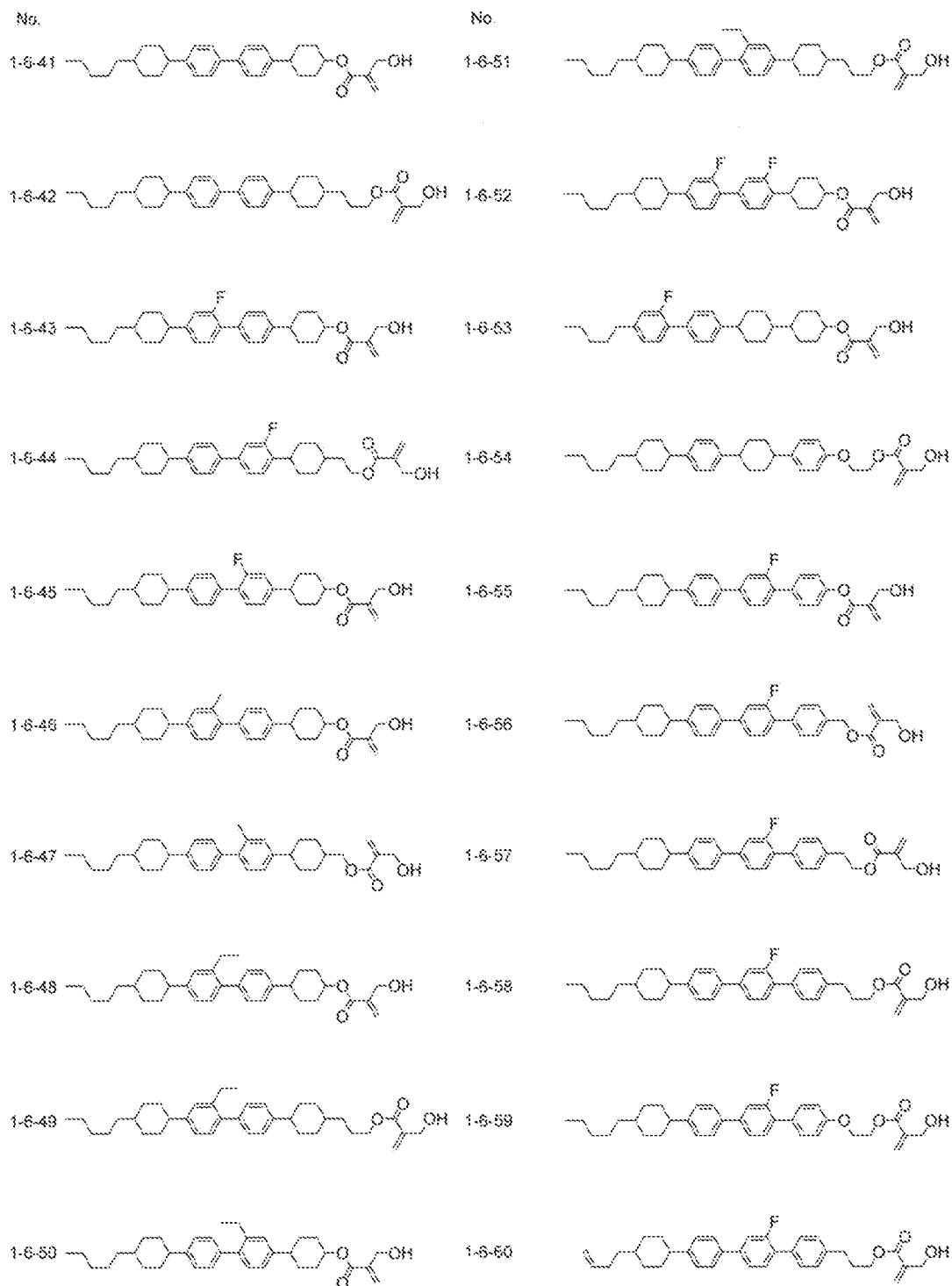
[0357]

[化136]



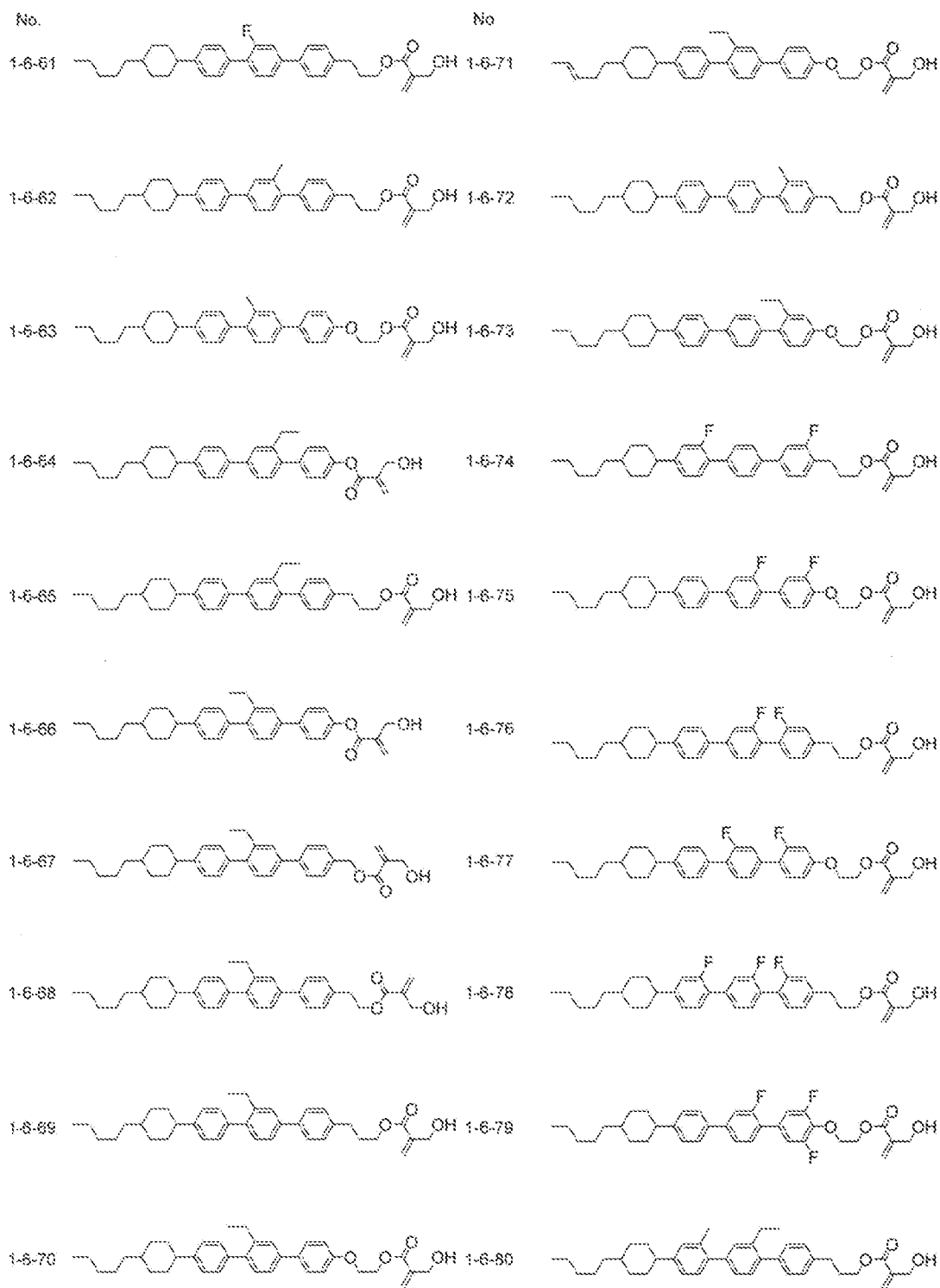
[0358]

[化137]



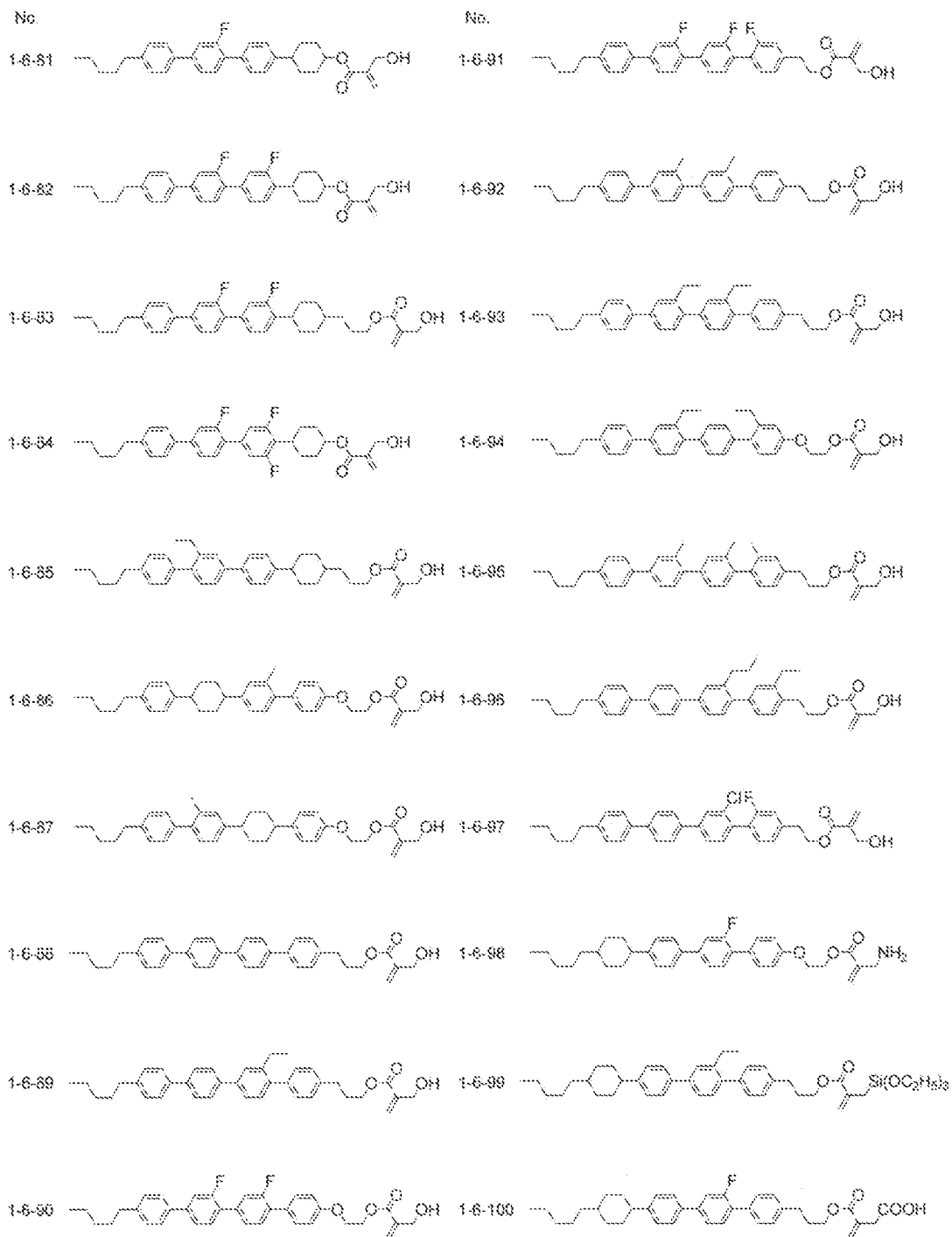
[0359]

[化138]



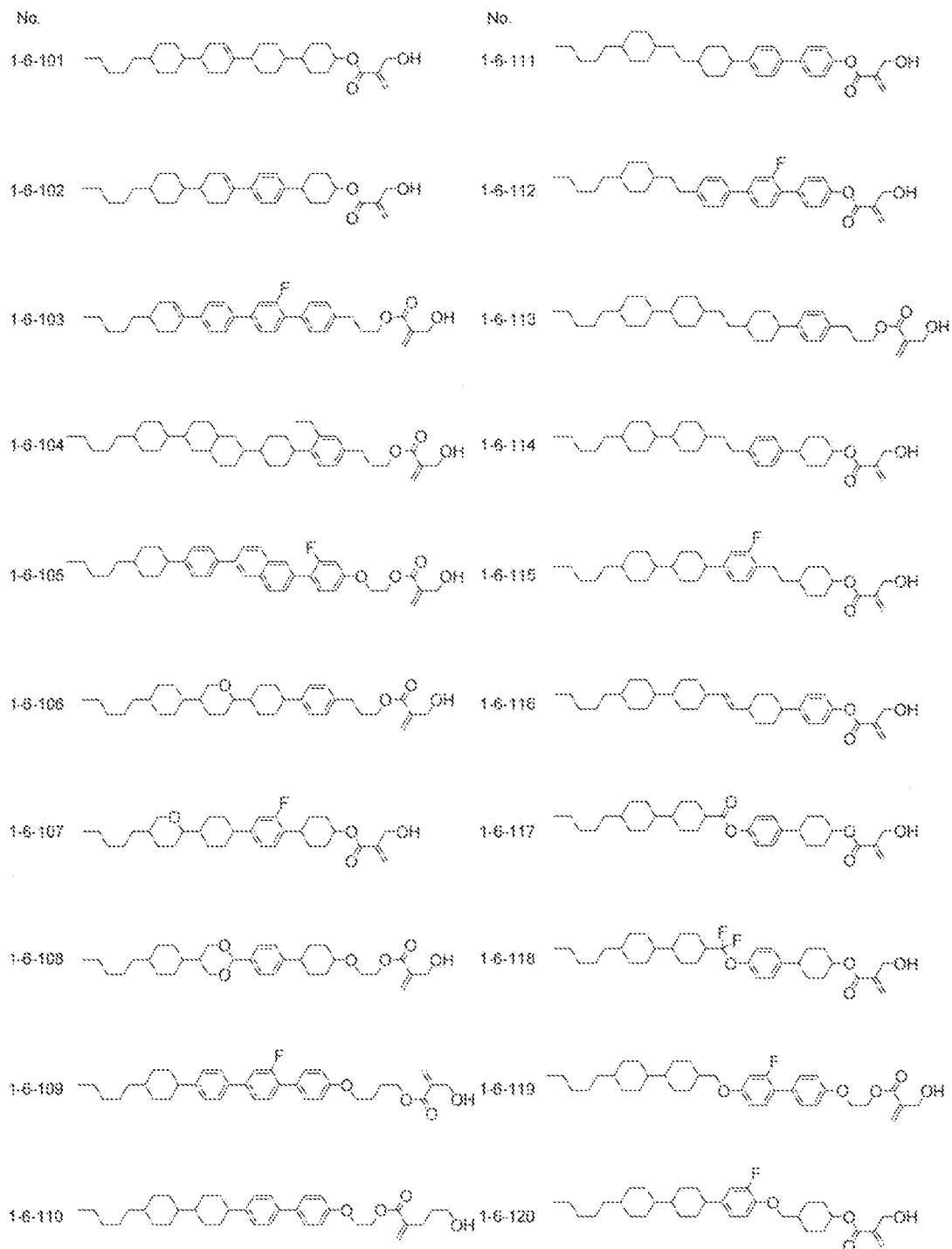
[0360]

[化139]



[0361]

[化140]

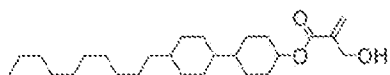


[0362]

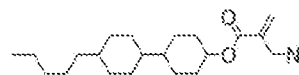
[化141]

No.

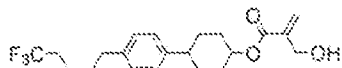
1-6-121



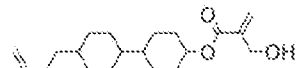
1-6-131



1-6-122



1-6-132



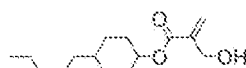
1-6-123



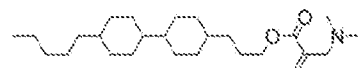
1-6-133



1-6-124



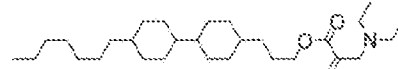
1-6-134



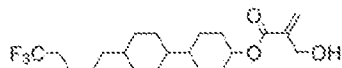
1-6-125



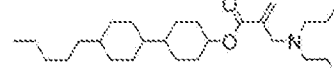
1-6-135



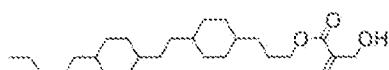
1-6-126



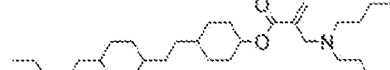
1-6-136



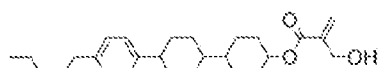
1-6-127



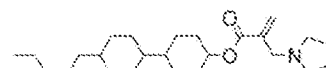
1-6-137



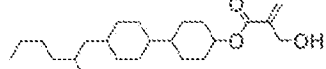
1-6-128



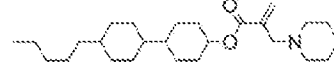
1-6-138



1-6-129



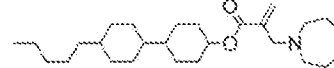
1-6-139



1-6-130



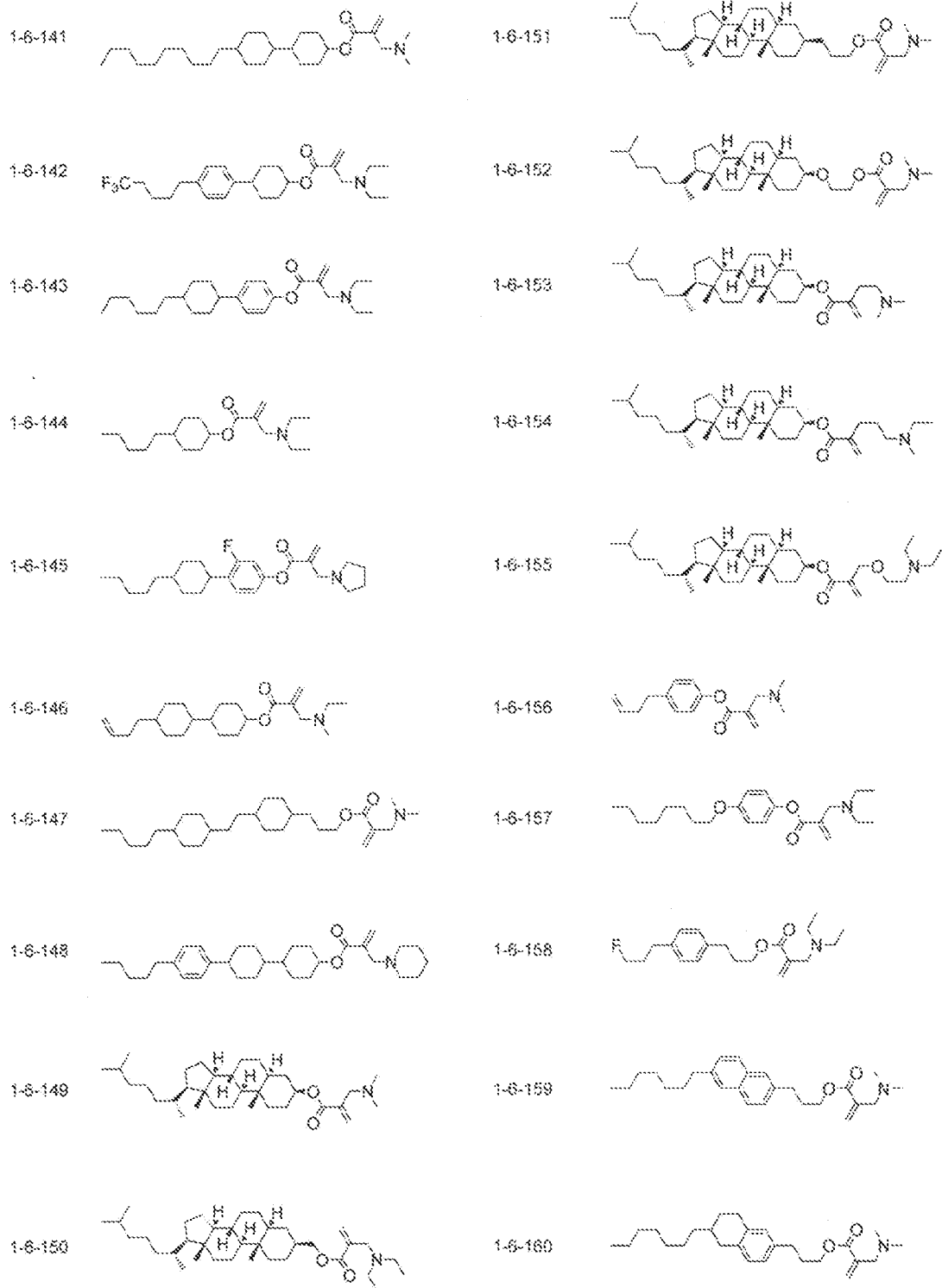
1-6-140



[0363]

[化142]

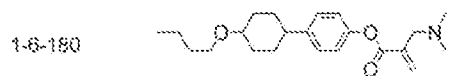
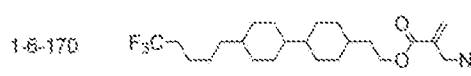
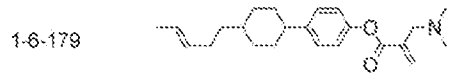
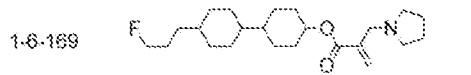
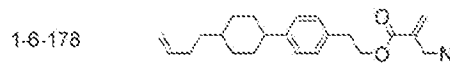
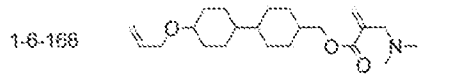
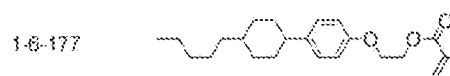
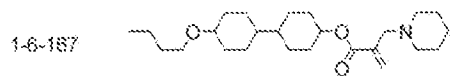
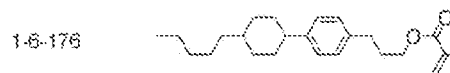
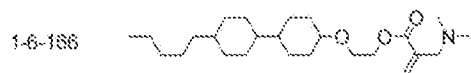
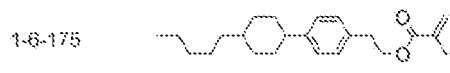
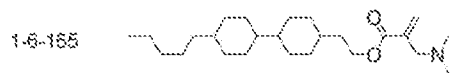
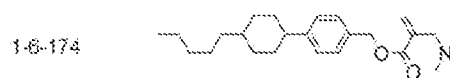
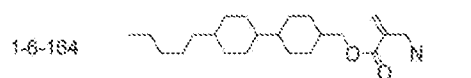
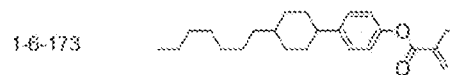
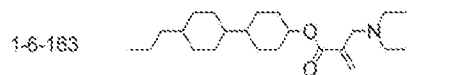
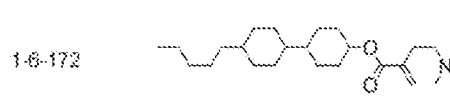
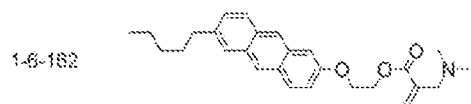
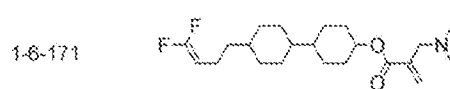
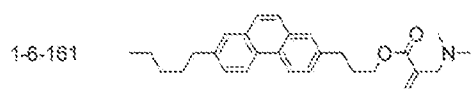
No.



[0364]

[化143]

No.

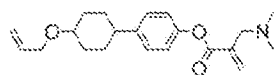


[0365]

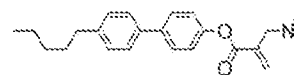
[化144]

No.

1-6-181



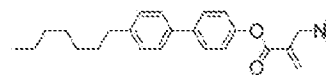
1-6-191



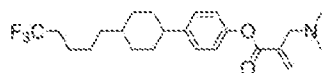
1-6-182



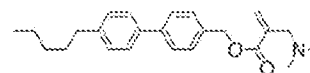
1-6-192



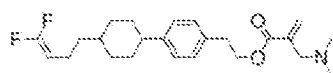
1-6-183



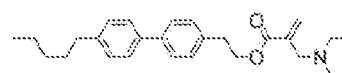
1-6-193



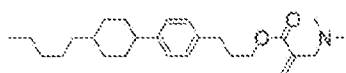
1-6-184



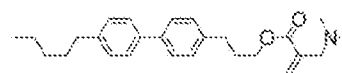
1-6-194



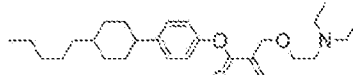
1-6-185



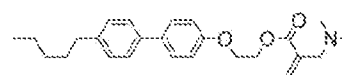
1-6-195



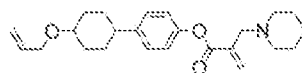
1-6-186



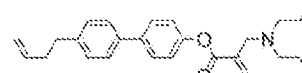
1-6-196



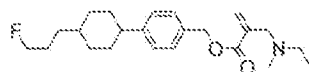
1-6-187



1-6-197



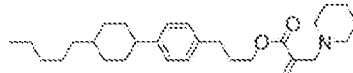
1-6-188



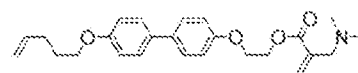
1-6-198



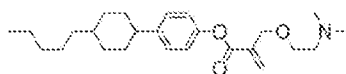
1-6-189



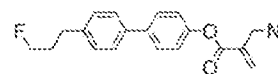
1-6-199



1-6-190



1-6-200

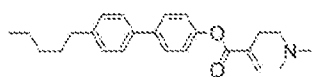


[0366]

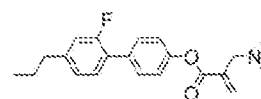
[化145]

No.

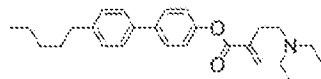
1-6-201



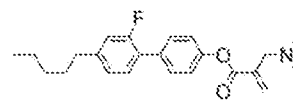
1-6-211



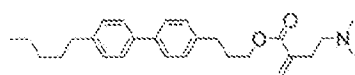
1-6-202



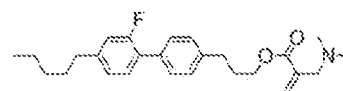
1-6-212



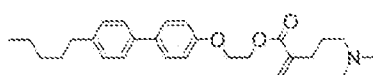
1-6-203



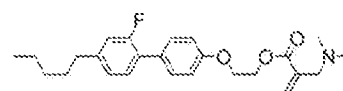
1-6-213



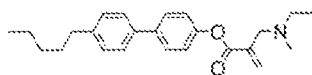
1-6-204



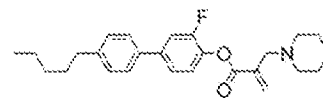
1-6-214



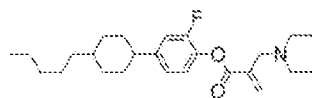
1-6-205



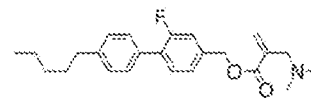
1-6-215



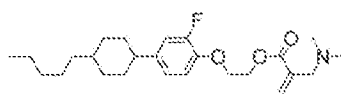
1-6-206



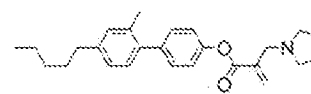
1-6-216



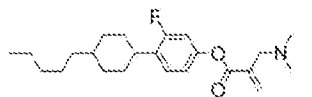
1-6-207



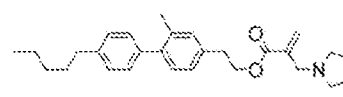
1-6-217



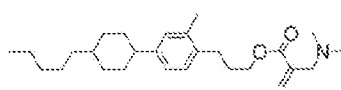
1-6-208



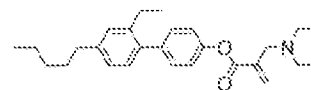
1-6-218



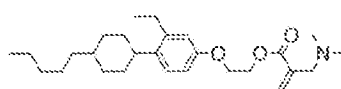
1-6-209



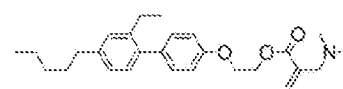
1-6-219



1-6-210



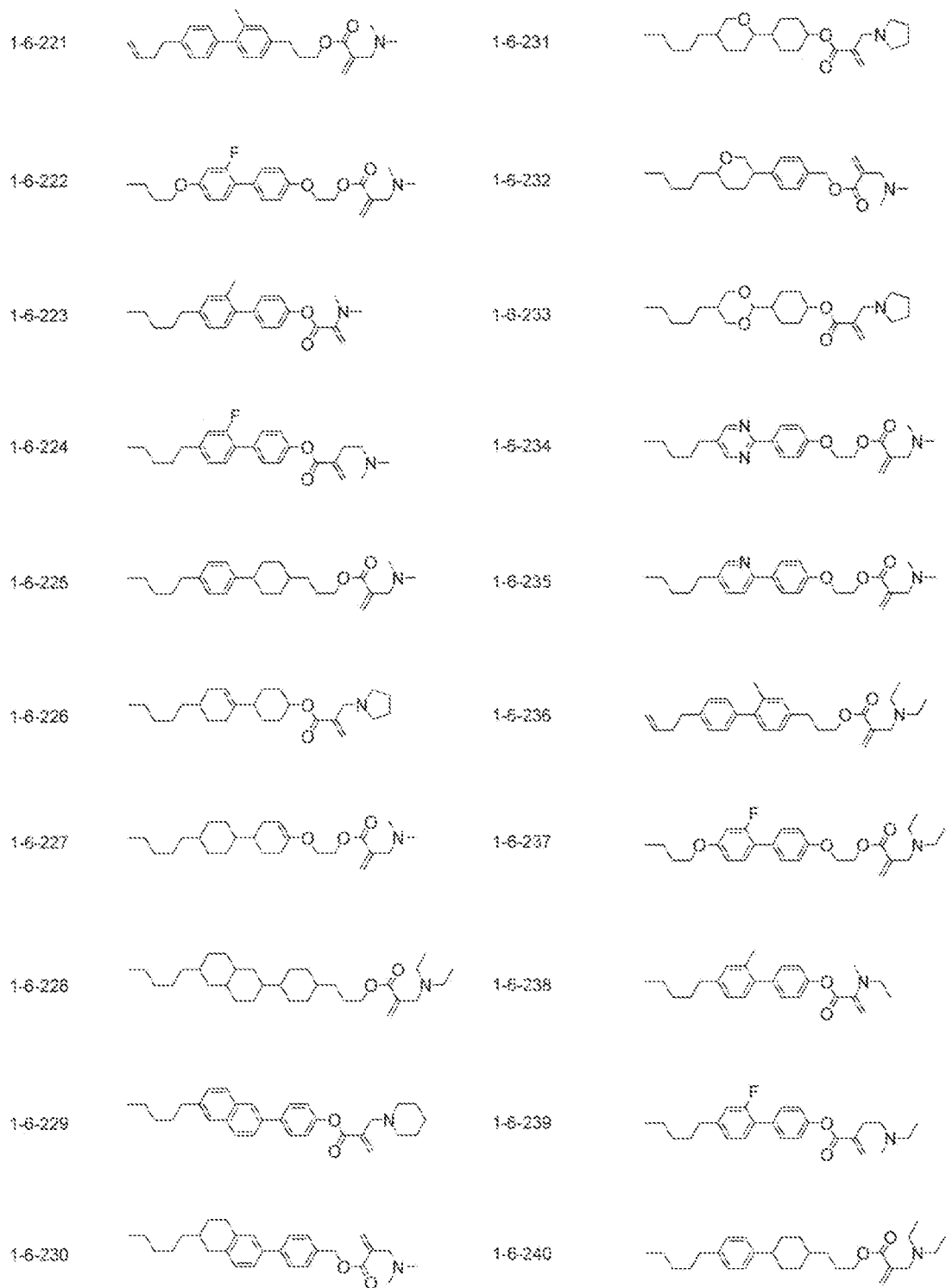
1-6-220



[0367]

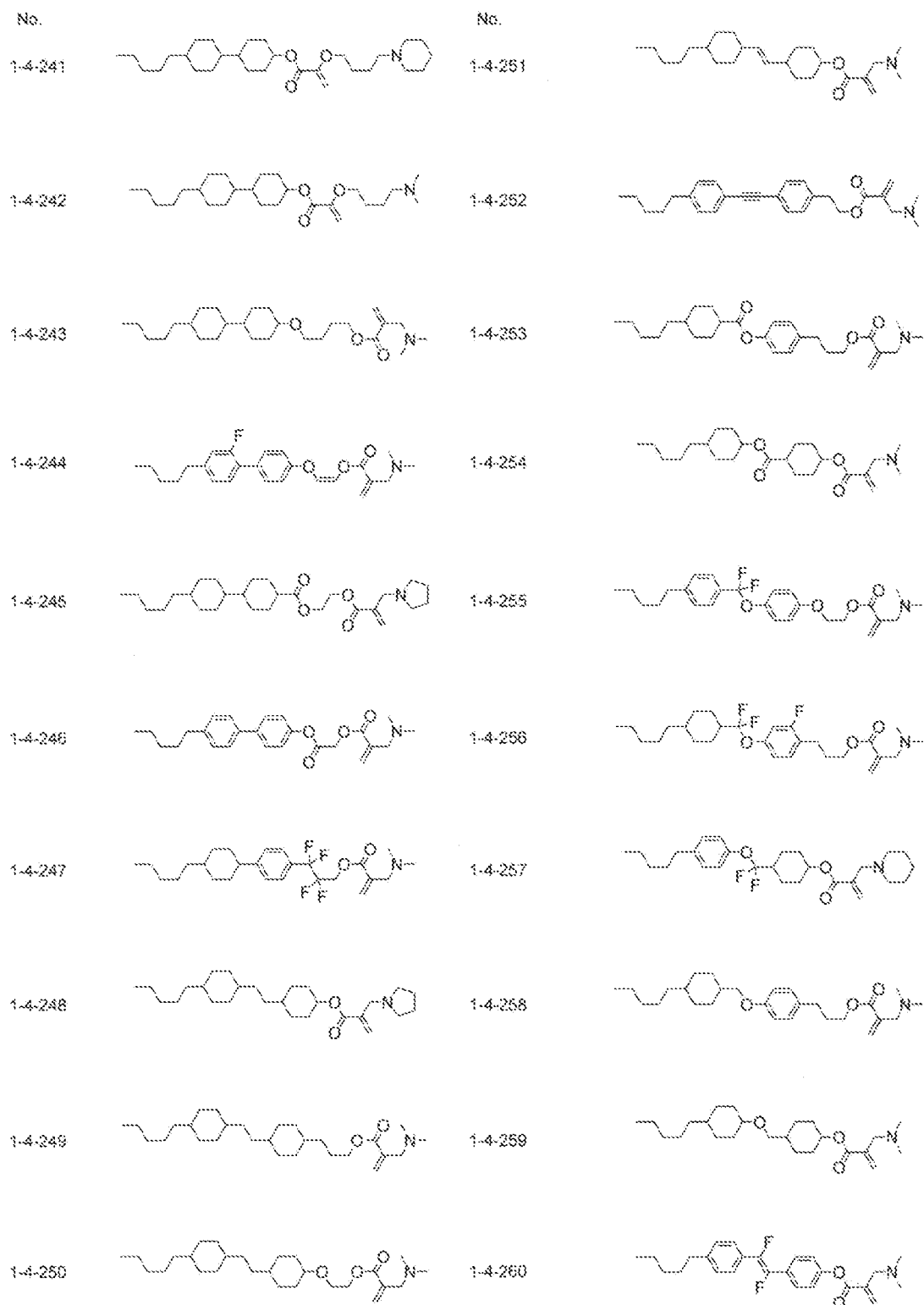
[化146]

No.



[0368]

[化147]



[0369] 2. 組成物の実施例

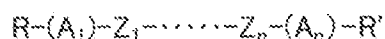
実施例における化合物は、下記の表3の定義に基づいて記号により表した

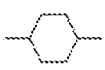
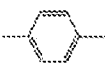
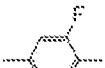
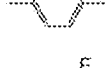
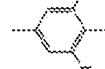
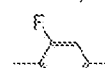
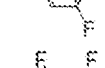
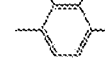
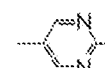
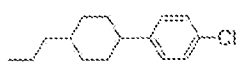
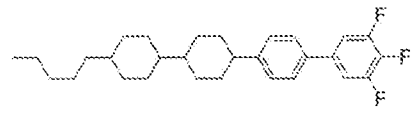
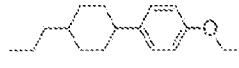
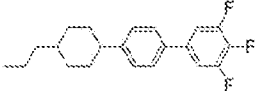
。表3において、1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。記号の後にあるかっこ内の番号は化合物の番号に対応する。(一)の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合(百分率)は、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率(重量%)である。最後に、液晶組成物の特性値をまとめた。特性は、先に記載した方法にしたがって測定し、測定値を(外挿することなく)そのまま記載した。

[0370]

[表3]

表3. 記号を用いた化合物の表記法



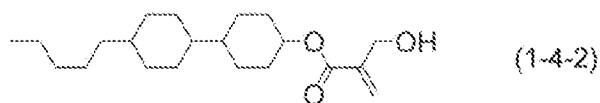
1) 左末端基 R-	記号	4) 環構造 -A _n -	記号
C _n H _{2n+1} -	n-		H
C _n H _{2n+1} O-	nO-		B
C _m H _{2m+1} OC _n H _{2n} -	mOn-		B(F)
CH ₂ =CH-	V-		B(2F)
C _n H _{2n+1} -CH=CH-	nV-		B(F,F)
CH ₂ =CH-C _n H _{2n} -	Vn-		B(2F,5F)
C _m H _{2m+1} -CH=CH-C _n H _{2n} -	mVn-		B(2F,3F)
CF ₂ =CH-	VFF-		Py
CF ₂ =CH-C _n H _{2n} -	VFFn-		G
2) 右末端基 -R'	記号		ch
-C _n H _{2n+1}	-n		
-OC _n H _{2n+1}	-On		
-COOCH ₃	-EMe		
-CH=CH ₂	-V		
-CH=CH-C _n H _{2n+1}	-Vn		
-C _n H _{2n} -CH=CH ₂	-nV		
-C _m H _{2m} -CH=CH-C _n H _{2n+1}	-mVn		
-CH=CF ₂	-VFF		
-F	-F		
-Cl	-CL		
-OCF ₃	-OCF3		
-OCF ₂ H	-OCF2H		
-CF ₃	-CF3		
-OCH=CH-CF ₃	-OVCF3		
-C≡N	-C		
3) 結合基 -Z _n -	記号		
-C _n H _{2n} -	n		
-COO-	E		
-CH=CH-	V		
-CH ₂ O-	IO		
-OCH ₂ -	OI		
-CF ₂ O-	X		
-C≡C-	T		
5) 表記例			
例1 3-HB-CL		例2 5-HHBB(F,F)-F	
			
例3 3-HB-O2		例4 3-HBB(F,F)-F	
			

[0371] [使用例 1]

2-HB-C	(8-1)	5%
3-HB-C	(8-1)	12%
3-HB-O2	(2-5)	15%
2-BTB-1	(2-10)	3%
3-HHB-F	(6-1)	4%
3-HHB-1	(3-1)	8%
3-HHB-O1	(3-1)	5%
3-HHB-3	(3-1)	14%
3-HHEB-F	(6-10)	5%
5-HHEB-F	(6-10)	3%
2-HHB(F)-F	(6-2)	7%
3-HHB(F)-F	(6-2)	7%
5-HHB(F)-F	(6-2)	7%
3-HHB(F, F)-F	(6-3)	5%

上記の組成物に下記の化合物(1-4-2)を5重量%の割合で添加した。

[化148]



$NI = 100$, 5°C ; $\eta = 17.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.100$; $\Delta \varepsilon = 4.7$.

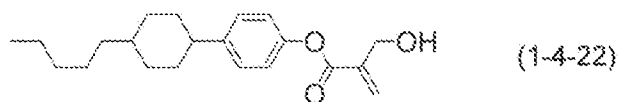
[0372] [使用例2]

3-HB-O2	(2-5)	10%
5-HB-CL	(5-2)	13%
3-HBB(F, F)-F	(6-24)	7%
3-PyB(F)-F	(5-15)	10%
5-PyB(F)-F	(5-15)	10%
3-PyBB-F	(6-80)	11%

4-PyBB-F	(6-80)	9%
5-PyBB-F	(6-80)	11%
5-HBB(F)B-2	(4-5)	9%
5-HBB(F)B-3	(4-5)	10%

上記の組成物に下記の化合物(1-4-22)を5重量%の割合で添加した。

[化149]



$n_D = 1.508$; 5°C ; $\eta = 39.5 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta n = 0.190$; $\Delta \varepsilon = 8.1$.

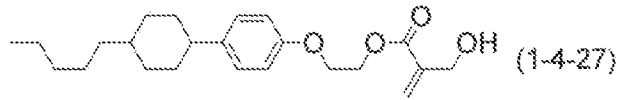
[0373] [使用例3]

5-HB-CL	(5-2)	16%
3-HH-4	(2-1)	11%
3-HH-5	(2-1)	4%
3-HHB-F	(6-1)	3%
3-HHB-CL	(6-1)	3%
4-HHB-CL	(6-1)	4%
3-HHB(F)-F	(6-2)	10%
4-HHB(F)-F	(6-2)	9%
5-HHB(F)-F	(6-2)	9%
7-HHB(F)-F	(6-2)	9%
5-HBB(F)-F	(6-23)	3%
101-HBBH-5	(4-1)	3%
3-HHBB(F, F)-F	(7-6)	3%
4-HHBB(F, F)-F	(7-6)	3%
5-HHBB(F, F)-F	(7-6)	3%
3-HH2BB(F, F)-F	(7-15)	4%

4-HH2BB (F, F) - F (7-15) 3%

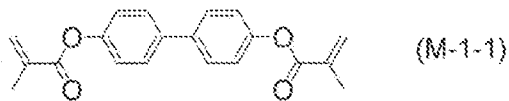
上記の組成物に下記の化合物 (1-4-27) を 5 重量%の割合で添加した。

[化150]



さらに加えて、下記の化合物 (M-1-1) を 0.3 重量%の割合で添加した。

[化151]



$n_D = 1.15$, 9°C ; $\eta = 20.2 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.092$; $\Delta \varepsilon = 4.0$.

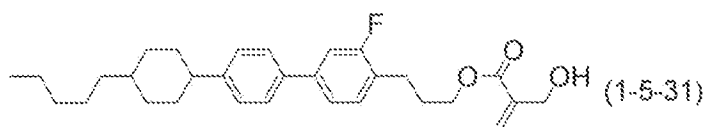
[0374] [使用例4]

5-HB-CL	(5-2)	16%
7-HB (F, F) - F	(5-4)	5%
3-HH-4	(2-1)	10%
3-HH-5	(2-1)	5%
3-HB-O2	(2-5)	14%
3-HHB-1	(3-1)	8%
3-HHB-O1	(3-1)	6%
2-HHB (F) - F	(6-2)	6%
3-HHB (F) - F	(6-2)	7%
5-HHB (F) - F	(6-2)	7%
3-HHB (F, F) - F	(6-3)	6%
3-H2HB (F, F) - F	(6-15)	5%
4-H2HB (F, F) - F	(6-15)	5%

上記の組成物に下記の化合物 (1-5-31) を 3 重量%の割合で添加し

た。

[化152]



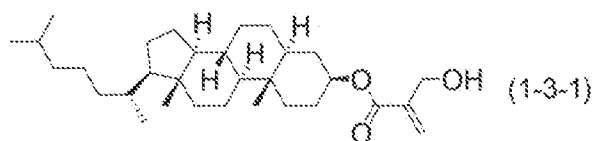
$N I = 70.5^{\circ}\text{C}$; $\eta = 13.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.073$; $\Delta \varepsilon = 2.8$.

[0375] [使用例5]

3-HHB (F, F) - F	(6-3)	10%
3-H ₂ HB (F, F) - F	(6-15)	9%
4-H ₂ HB (F, F) - F	(6-15)	8%
5-H ₂ HB (F, F) - F	(6-15)	7%
3-HBB (F, F) - F	(6-24)	20%
5-HBB (F, F) - F	(6-24)	18%
3-H ₂ BB (F, F) - F	(6-27)	12%
5-HHBB (F, F) - F	(7-6)	3%
5-HHEBB - F	(7-17)	2%
3-HH ₂ BB (F, F) - F	(7-15)	3%
1O1-HBBH-4	(4-1)	5%
1O1-HBBH-5	(4-1)	3%

上記の組成物に下記の化合物 (1-3-1) を1重量%の割合で添加した。

[化153]



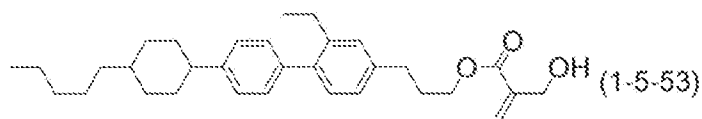
$N I = 97.5^{\circ}\text{C}$; $\eta = 34.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.115$; $\Delta \varepsilon = 9.0$.

[0376] [使用例 6]

5-HB-CL	(5-2)	9%
3-HH-4	(2-1)	9%
3-HHB-1	(3-1)	4%
3-HHB (F, F) - F	(6-3)	8%
3-HBB (F, F) - F	(6-2 4)	1 9%
5-HBB (F, F) - F	(6-2 4)	1 3%
3-HHEB (F, F) - F	(6-1 2)	9%
4-HHEB (F, F) - F	(6-1 2)	5%
5-HHEB (F, F) - F	(6-1 2)	4%
2-HBEB (F, F) - F	(6-3 9)	5%
3-HBEB (F, F) - F	(6-3 9)	5%
5-HBEB (F, F) - F	(6-3 9)	4%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	6%

上記の組成物に下記の化合物（１－５－５３）を２重量％の割合で添加した。

[化154]


$$N l = 81.4^{\circ}\text{C}; \eta = 23.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}; \Delta n = 0.102; \Delta \varepsilon = 9.2.$$

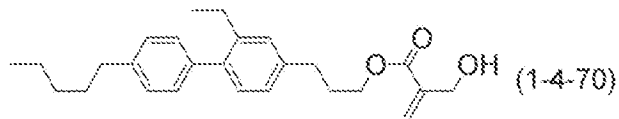
[0377] [使用例 7]

5-HB-F	(5-2)	12%
6-HB-F	(5-2)	9%
7-HB-F	(5-2)	7%
2-HHB-OCF ₃	(6-1)	5%
3-HHB-OCF ₃	(6-1)	7%
4-HHB-OCF ₃	(6-1)	7%

5-HHB-OCF ₃	(6-1)	5%
3-HH ₂ B-OCF ₃	(6-4)	7%
5-HH ₂ B-OCF ₃	(6-4)	4%
3-HHB(F, F)-OCF ₂ H	(6-3)	5%
3-HHB(F, F)-OCF ₃	(6-3)	4%
3-HH ₂ B(F)-F	(6-5)	3%
3-HBB(F)-F	(6-23)	11%
5-HBB(F)-F	(6-23)	8%
5-HBBH-3	(4-1)	3%
3-HB(F)BH-3	(4-2)	3%

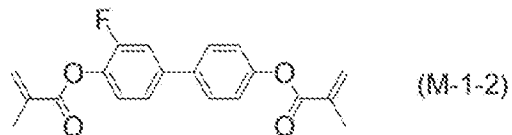
上記の組成物に下記の化合物(1-4-70)を5重量%の割合で添加した。

[化155]



さらに加えて、下記の化合物(M-1-2)を0.3重量%の割合で添加した。

[化156]



$n_D = 1.46$; $\eta = 1.47 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.092$; $\Delta \varepsilon = 4.4$.

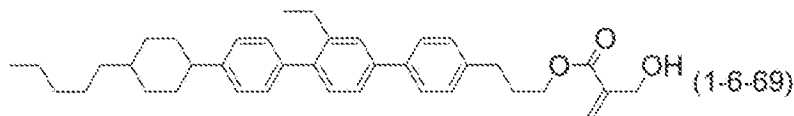
[0378] [使用例8]

1V2-BEB(F, F)-C	(8-15)	7%
3-HB-C	(8-1)	18%
2-BTB-1	(2-10)	10%

5-HH-VFF	(2-1)	30%
3-HHB-1	(3-1)	6%
VFF-HHB-1	(3-1)	5%
VFF2-HHB-1	(3-1)	11%
3-H2BTB-2	(3-17)	4%
3-H2BTB-3	(3-17)	5%
3-H2BTB-4	(3-17)	4%

上記の組成物に下記の化合物（1-6-69）を0.5重量%の割合で添加した。

[化157]



$n_D = 1.480$; 5°C ; $\eta = 1.2$ mPa·s; $\Delta n = 0.130$; $\Delta \varepsilon = 7.1$.

[0379] [使用例9]

3-HB-CL	(5-2)	7%
5-HB-CL	(5-2)	3%
3-HHB-OCF ₃	(6-1)	5%
3-H ₂ HB-OCF ₃	(6-13)	5%
5-H ₄ HB-OCF ₃	(6-19)	15%
V-HHB(F)-F	(6-2)	5%
3-HHB(F)-F	(6-2)	6%
5-HHB(F)-F	(6-2)	4%
3-H ₄ HB(F, F)-CF ₃	(6-21)	8%
5-H ₄ HB(F, F)-CF ₃	(6-21)	10%
5-H ₂ HB(F, F)-F	(6-15)	5%
5-H ₄ HB(F, F)-F	(6-21)	7%
2-H ₂ BB(F)-F	(6-26)	5%

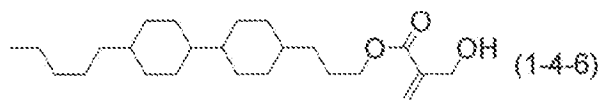
3-H₂BB (F) - F (6-26) 10%

3-HBEB (F, F) - F (6-39) 5%

上記の組成物に下記の化合物 (1-4-6) を4重量%の割合で添加した

。

[化158]



$n_D = 1.69$, 6°C ; $\eta = 25.3 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.097$; $\Delta \varepsilon = 8.3$.

[0380] [使用例10]

5-HB-CL (5-2) 3%

7-HB (F) - F (5-3) 7%

3-HH-4 (2-1) 9%

3-HH-EMe (2-2) 21%

3-HHEB-F (6-10) 9%

5-HHEB-F (6-10) 7%

3-HHEB (F, F) - F (6-12) 10%

4-HHEB (F, F) - F (6-12) 6%

4-HGB (F, F) - F (6-103) 6%

5-HGB (F, F) - F (6-103) 6%

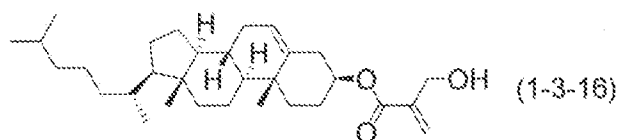
2-H₂GB (F, F) - F (6-106) 4%

3-H₂GB (F, F) - F (6-106) 6%

5-GHB (F, F) - F (6-109) 6%

上記の組成物に下記の化合物 (1-3-16) を2重量%の割合で添加した。

[化159]



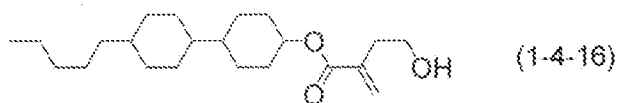
$N_I = 79.5^\circ\text{C}$; $\eta = 20.2 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.064$; $\Delta \varepsilon = 5.8$.

[0381] [使用例 1 1]

7-HB (F, F) - F	(5-4)	3%
3-HB-O2	(2-5)	7%
2-HHB (F) - F	(6-2)	9%
3-HHB (F) - F	(6-2)	11%
5-HHB (F) - F	(6-2)	9%
2-HBB (F) - F	(6-23)	9%
3-HBB (F) - F	(6-23)	10%
5-HBB (F) - F	(6-23)	15%
2-HBB-F	(6-22)	4%
3-HBB-F	(6-22)	5%
5-HBB-F	(6-22)	3%
3-HBB (F, F) - F	(6-24)	5%
5-HBB (F, F) - F	(6-24)	10%

上記の組成物に下記の化合物 (1-4-16) を 5 重量%の割合で添加した。

[化160]



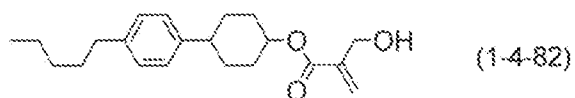
$N_I = 85.6^\circ\text{C}$; $\eta = 24.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.116$; $\Delta \varepsilon = 5.8$.

[0382] [使用例 1 2]

3-HB-O2	(2-5)	9%
5-HB-CL	(5-2)	12%
3-HBB(F, F)-F	(6-24)	8%
3-PyB(F)-F	(5-15)	10%
5-PyB(F)-F	(5-15)	10%
3-PyBB-F	(6-80)	11%
4-PyBB-F	(6-80)	10%
5-PyBB-F	(6-80)	11%
5-HBB(F)B-2	(4-5)	9%
5-HBB(F)B-3	(4-5)	10%

上記の組成物に下記の化合物(1-4-82)を4重量%の割合で添加した。

[化161]



$n_D = 1.00$, 2°C ; $\eta = 40$, $5\text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta n = 0.193$; $\Delta \varepsilon = 8.3$.

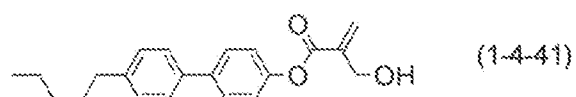
[0383] [使用例13]

5-HB-CL	(5-2)	9%
3-HH-4	(2-1)	9%
3-HHB-1	(3-1)	4%
3-HHB(F, F)-F	(6-3)	8%
3-HBB(F, F)-F	(6-24)	20%
5-HBB(F, F)-F	(6-24)	14%
3-HHEB(F, F)-F	(6-12)	9%
4-HHEB(F, F)-F	(6-12)	3%
5-HHEB(F, F)-F	(6-12)	4%
2-HBEB(F, F)-F	(6-39)	4%

3-HBEB (F, F) - F	(6-39)	5%
5-HBEB (F, F) - F	(6-39)	5%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	6%

上記の組成物に下記の化合物 (1-4-41) を3重量%の割合で添加した。

[化162]



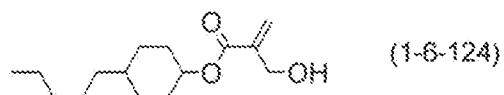
$n_D = 1.509$; 9°C ; $\eta = 23.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.103$; $\Delta \varepsilon = 9.1$.

[0384] [使用例14]

5-HB-CL	(5-2)	16%
7-HB (F, F) - F	(5-4)	4%
3-HH-4	(2-1)	10%
3-HH-5	(2-1)	6%
3-HB-O2	(2-5)	14%
3-HHB-1	(3-1)	8%
3-HHB-O1	(3-1)	6%
2-HHB (F) - F	(6-2)	6%
3-HHB (F) - F	(6-2)	6%
5-HHB (F) - F	(6-2)	6%
3-HHB (F, F) - F	(6-3)	5%
3-H2HB (F, F) - F	(6-15)	7%
4-H2HB (F, F) - F	(6-15)	6%

上記の組成物に下記の化合物 (1-6-124) を3重量%の割合で添加した。

[化163]



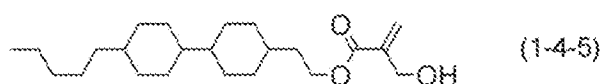
$N I = 70.9^{\circ}\text{C}$; $\eta = 13.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.073$; $\Delta \varepsilon = 2.8$.

[0385] [使用例 15]

7-HB (F, F) - F	(5-4)	4%
3-HB-O2	(2-5)	7%
2-HHB (F) - F	(6-2)	9%
3-HHB (F) - F	(6-2)	12%
5-HHB (F) - F	(6-2)	9%
2-HBB (F) - F	(6-23)	9%
3-HBB (F) - F	(6-23)	10%
5-HBB (F) - F	(6-23)	15%
2-HBB-F	(6-22)	4%
3-HBB-F	(6-22)	5%
5-HBB-F	(6-22)	3%
3-HBB (F, F) - F	(6-24)	5%
5-HBB (F, F) - F	(6-24)	8%

上記の組成物に下記の化合物 (1-4-5) を 5 重量%の割合で添加した。

[化164]



$N I = 84.8^{\circ}\text{C}$; $\eta = 24.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.114$; $\Delta \varepsilon = 5.6$.

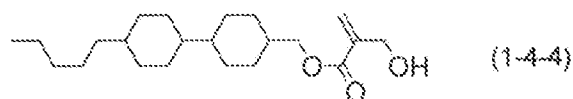
[0386] [使用例 16]

2-HB-C	(8-1)	5%
--------	-------	----

3-HB-C	(8-1)	12%
3-HB-O2	(2-5)	15%
2-BTB-1	(2-10)	3%
3-HHB-F	(6-1)	3%
3-HHB-1	(3-1)	7%
3-HHB-O1	(3-1)	4%
3-HHB-3	(3-1)	15%
3-HHEB-F	(6-10)	5%
5-HHEB-F	(6-10)	3%
2-HHB(F)-F	(6-2)	7%
3-HHB(F)-F	(6-2)	7%
5-HHB(F)-F	(6-2)	7%
3-HHB(F, F)-F	(6-3)	7%

上記の組成物に下記の化合物(1-4-4)を0.5重量%の割合で添加した。

[化165]



$n_D = 1.486$; $\eta = 1.76 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.099$; $\Delta \epsilon = 4.8$.

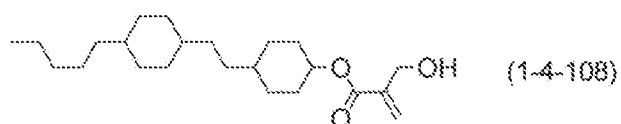
[0387] [使用例17]

1V2-BEB(F, F)-C	(8-15)	8%
3-HB-C	(8-1)	18%
2-BTB-1	(2-10)	10%
5-HH-VFF	(2-1)	28%
3-HHB-1	(3-1)	6%
VFF-HHB-1	(3-1)	6%
VFF2-HHB-1	(3-1)	11%

3-H2BTB-2	(3-17)	4%
3-H2BTB-3	(3-17)	4%
3-H2BTB-4	(3-17)	5%

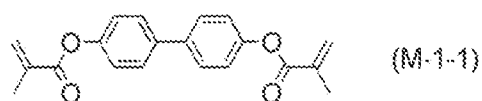
上記の組成物に下記の化合物（1-4-108）を4重量%の割合で添加した。

[化166]



さらに加えて、下記の化合物（M-1-1）を0.3重量%の割合で添加した。

[化167]



$n_D = 1.39$; $\eta = 1.3 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.132$; $\Delta \epsilon = 7.8$.

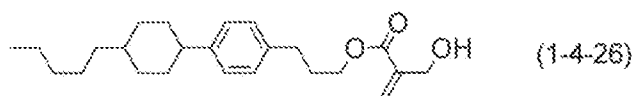
[0388] [使用例18]

5-HB-CL	(5-2)	17%
3-HH-4	(2-1)	11%
3-HH-5	(2-1)	4%
3-HHB-F	(6-1)	3%
3-HHB-CL	(6-1)	3%
4-HHB-CL	(6-1)	4%
3-HHB(F)-F	(6-2)	10%
4-HHB(F)-F	(6-2)	10%
5-HHB(F)-F	(6-2)	10%
7-HHB(F)-F	(6-2)	7%
5-HBB(F)-F	(6-23)	3%

1 O 1 - H B B H - 5	(4 - 1)	3 %
3 - H H B B (F, F) - F	(7 - 6)	2 %
4 - H H B B (F, F) - F	(7 - 6)	3 %
5 - H H B B (F, F) - F	(7 - 6)	2 %
3 - H H 2 B B (F, F) - F	(7 - 1 5)	4 %
4 - H H 2 B B (F, F) - F	(7 - 1 5)	4 %

上記の組成物に下記の化合物 (1 - 4 - 2 6) を 2 重量%の割合で添加した。

[化168]



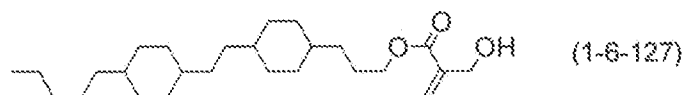
$N_I = 113.9^\circ\text{C}$; $\eta = 19.1 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.091$; $\Delta \varepsilon = 3.9$.

[0389] [使用例 1 9]

3 - H H B (F, F) - F	(6 - 3)	10 %
3 - H 2 H B (F, F) - F	(6 - 1 5)	9 %
4 - H 2 H B (F, F) - F	(6 - 1 5)	8 %
5 - H 2 H B (F, F) - F	(6 - 1 5)	7 %
3 - H B B (F, F) - F	(6 - 2 4)	20 %
5 - H B B (F, F) - F	(6 - 2 4)	21 %
3 - H 2 B B (F, F) - F	(6 - 2 7)	11 %
5 - H H B B (F, F) - F	(7 - 6)	3 %
5 - H H E B B - F	(7 - 1 7)	2 %
3 - H H 2 B B (F, F) - F	(7 - 1 5)	3 %
1 O 1 - H B B H - 4	(4 - 1)	3 %
1 O 1 - H B B H - 5	(4 - 1)	3 %

上記の組成物に下記の化合物 (1 - 6 - 1 2 7) を 3 重量%の割合で添加した。

[化169]



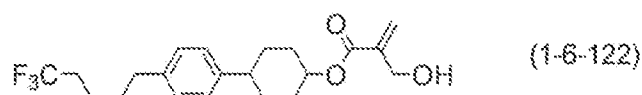
$N_I = 93.9^\circ\text{C}$; $\eta = 34.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.114$; $\Delta \varepsilon = 9.2$.

[0390] [使用例20]

5-HB-CL	(5-2)	3%
7-HB(F)-F	(5-3)	5%
3-HH-4	(2-1)	9%
3-HH-EMe	(2-2)	20%
3-HHEB-F	(6-10)	10%
5-HHEB-F	(6-10)	10%
3-HHEB(F, F)-F	(6-12)	10%
4-HHEB(F, F)-F	(6-12)	6%
4-HGB(F, F)-F	(6-103)	7%
5-HGB(F, F)-F	(6-103)	6%
2-H2GB(F, F)-F	(6-106)	4%
3-H2GB(F, F)-F	(6-106)	4%
5-GHB(F, F)-F	(6-109)	6%

上記の組成物に下記の化合物(1-6-122)を5重量%の割合で添加した。

[化170]



$N_I = 85.6^\circ\text{C}$; $\eta = 21.1 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.066$; $\Delta \varepsilon = 5.8$.

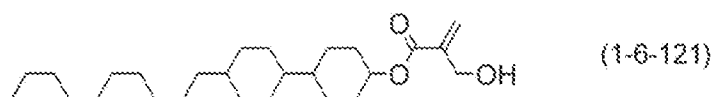
[0391] [使用例21]

5-HB-F	(5-2)	12%
--------	-------	-----

6-HB-F	(5-2)	9%
7-HB-F	(5-2)	7%
2-HHB-OCF ₃	(6-1)	6%
3-HHB-OCF ₃	(6-1)	6%
4-HHB-OCF ₃	(6-1)	7%
5-HHB-OCF ₃	(6-1)	5%
3-HH ₂ B-OCF ₃	(6-4)	6%
5-HH ₂ B-OCF ₃	(6-4)	4%
3-HHB(F, F)-OCF ₂ H	(6-3)	5%
3-HHB(F, F)-OCF ₃	(6-3)	5%
3-HH ₂ B(F)-F	(6-5)	3%
3-HHB(F)-F	(6-2)	11%
5-HBB(F)-F	(6-23)	8%
5-HBBH-3	(4-1)	3%
3-HB(F)BH-3	(4-2)	3%

上記の組成物に下記の化合物(1-6-121)を3重量%の割合で添加した。

[化171]



$N_I = 85.4^\circ\text{C}$; $\eta = 15.0 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta n = 0.092$; $\Delta \varepsilon = 4.5$.

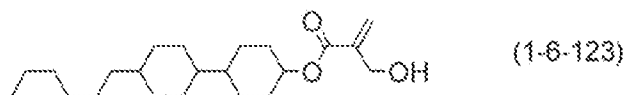
[0392] [使用例22]

3-HB-CL	(5-2)	6%
5-HB-CL	(5-2)	3%
3-HHB-OCF ₃	(6-1)	4%
3-H ₂ HB-OCF ₃	(6-4)	5%
5-H ₄ HB-OCF ₃	(6-7)	15%

V-HHB (F) - F	(6-2)	7%
3-HHB (F) - F	(6-2)	5%
5-HHB (F) - F	(6-2)	5%
3-H ₄ HB (F, F) - CF ₃	(6-21)	8%
5-H ₄ HB (F, F) - CF ₃	(6-21)	10%
5-H ₂ HB (F, F) - F	(6-15)	5%
5-H ₄ HB (F, F) - F	(6-21)	7%
2-H ₂ BB (F) - F	(6-5)	5%
3-H ₂ BB (F) - F	(6-5)	10%
3-HBEB (F, F) - F	(6-39)	5%

上記の組成物に下記の化合物 (1-6-123) を5重量%の割合で添加した。

[化172]



$n_D = 1.470$; 5°C ; $\eta = 25.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.097$; $\Delta \epsilon = 8.3$.

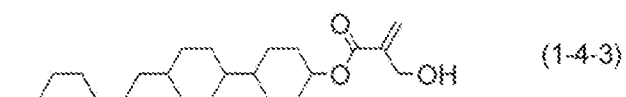
[0393] [使用例23]

5-HB-CL	(5-2)	9%
3-HH-4	(2-1)	9%
3-HHB-1	(3-1)	5%
3-HHB (F, F) - F	(6-3)	8%
3-HBB (F, F) - F	(6-24)	14%
5-HBB (F, F) - F	(6-24)	16%
3-HHEB (F, F) - F	(6-12)	9%
4-HHEB (F, F) - F	(6-12)	5%
5-HHEB (F, F) - F	(6-12)	5%
2-HBEB (F, F) - F	(6-39)	5%

3-HBEB (F, F) - F	(6-39)	5%
5-HBEB (F, F) - F	(6-39)	4%
3-HHBB (F, F) - F	(7-6)	6%

上記の組成物に下記の化合物 (1-4-3) を 2.5 重量%の割合で添加した。

[化173]



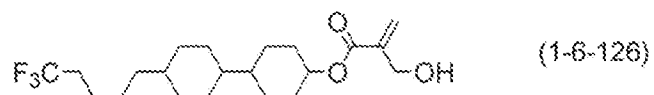
$N_I = 83.3^\circ\text{C}$; $\eta = 23.6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.101$; $\Delta \varepsilon = 9.1$.

[0394] [使用例24]

7-HB (F, F) - F	(5-4)	3%
3-HB-O2	(2-5)	5%
2-HHBB (F) - F	(6-2)	9%
3-HHBB (F) - F	(6-2)	13%
5-HHBB (F) - F	(6-2)	9%
2-HBBB (F) - F	(6-23)	9%
3-HBBB (F) - F	(6-23)	9%
5-HBBB (F) - F	(6-23)	15%
2-HBBB-F	(6-22)	4%
3-HBBB-F	(6-22)	5%
5-HBBB-F	(6-22)	5%
3-HBBB (F, F) - F	(6-24)	5%
5-HBBB (F, F) - F	(6-24)	9%

上記の組成物に下記の化合物 (1-6-126) を 5 重量%の割合で添加した。

[化174]



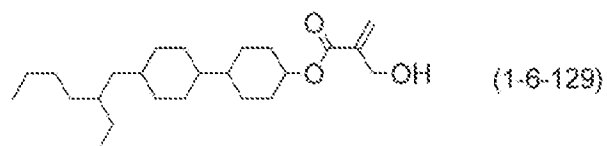
$n_D = 1.488$, 3°C ; $\eta = 25.5 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta n = 0.117$; $\Delta \varepsilon = 5.8$.

[0395] [使用例 25]

3-HB-O2	(2-5)	10%
5-HB-CL	(5-2)	13%
3-HBB (F, F) - F	(6-24)	7%
3-PyB (F) - F	(5-15)	10%
5-PyB (F) - F	(5-15)	10%
3-PyBB - F	(6-80)	12%
4-PyBB - F	(6-80)	8%
5-PyBB - F	(6-80)	13%
5-HBB (F) B-2	(4-5)	7%
5-HBB (F) B-3	(4-5)	10%

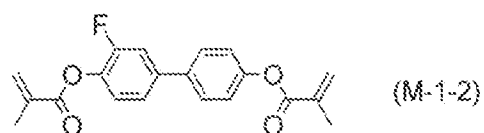
上記の組成物に下記の化合物 (1-6-129) を 5 重量%の割合で添加した。

[化175]



さらに加えて、下記の化合物 (M-1-2) を 0.3 重量%の割合で添加した。

[化176]



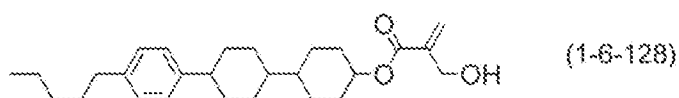
$n_D = 1.496$; 8°C ; $\eta = 39.3 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.190$; $\Delta \varepsilon = 8.4$.

[0396] [使用例 26]

1V2-BEB (F, F) - C	(8-15)	7%
3-HB-C	(8-1)	20%
2-BTB-1	(2-10)	10%
5-HH-VFF	(2-1)	30%
3-HHB-1	(3-1)	6%
VFF-HHB-1	(3-1)	5%
VFF2-HHB-1	(3-1)	9%
3-H2BTB-2	(3-17)	3%
3-H2BTB-3	(3-17)	7%
3-H2BTB-4	(3-17)	3%

上記の組成物に下記の化合物 (1-6-128) を 3 重量%の割合で添加した。

[化177]



$n_D = 1.478$; 6°C ; $\eta = 12.3 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.130$; $\Delta \varepsilon = 7.3$.

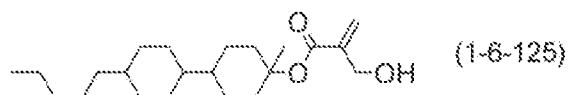
[0397] [使用例 28]

3-HB-CL	(5-2)	8%
5-HB-CL	(5-2)	3%
3-HHB-OCF ₃	(6-1)	5%
3-H ₂ HB-OCF ₃	(6-4)	5%
5-H ₄ HB-OCF ₃	(6-7)	15%
V-HHB (F) - F	(6-2)	5%
3-HHB (F) - F	(6-2)	4%

5-HHB(F)-F	(6-2)	7%
3-H ₄ HB(F, F)-CF ₃	(6-21)	8%
5-H ₄ HB(F, F)-CF ₃	(6-21)	10%
5-H ₂ HB(F, F)-F	(6-15)	5%
5-H ₄ HB(F, F)-F	(6-21)	7%
2-H ₂ BB(F)-F	(6-26)	5%
3-H ₂ BB(F)-F	(6-26)	8%
3-HBEB(F, F)-F	(6-39)	5%

上記の組成物に下記の化合物(1-6-125)を5重量%の割合で添加した。

[化178]



$n_D = 1.499$; 1°C ; $\eta = 24.7 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.096$; $\Delta \varepsilon = 8.2$.

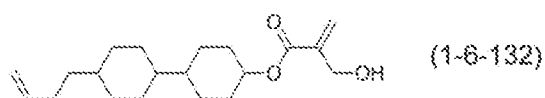
[0398] [使用例29]

5-HB-F	(5-2)	12%
6-HB-F	(5-2)	9%
7-HB-F	(5-2)	7%
2-HHB-OCF ₃	(6-1)	5%
3-HHB-OCF ₃	(6-1)	6%
4-HHB-OCF ₃	(6-1)	7%
5-HHB-OCF ₃	(6-1)	5%
3-HH ₂ B-OCF ₃	(6-4)	5%
5-HH ₂ B-OCF ₃	(6-4)	4%
3-HHB(F, F)-OCF ₂ H	(6-3)	5%
3-HHB(F, F)-OCF ₃	(6-3)	5%
3-HH ₂ B(F)-F	(6-5)	3%

3-HBB(F)-F	(6-23)	11%
5-HBB(F)-F	(6-23)	10%
5-HBBH-3	(4-1)	3%
3-HB(F)BH-3	(4-2)	3%

上記の組成物に下記の化合物(1-6-132)を5重量%の割合で添加した。

[化179]



$n_D = 1.51$; $\eta = 1.5$ mPa·s; $\Delta n = 0.093$; $\Delta \varepsilon = 4.5$.

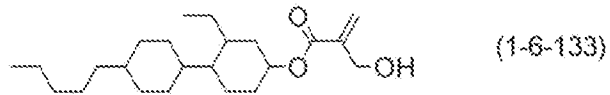
[0399] [使用例30]

5-HB-CL	(5-2)	16%
3-HH-4	(2-1)	13%
3-HH-5	(2-1)	4%
3-HHB-F	(6-1)	3%
3-HHB-CL	(6-1)	3%
4-HHB-CL	(6-1)	4%
3-HHB(F)-F	(6-2)	10%
4-HHB(F)-F	(6-2)	10%
5-HHB(F)-F	(6-2)	8%
7-HHB(F)-F	(6-2)	8%
5-HBB(F)-F	(6-23)	3%
101-HBBH-5	(4-1)	3%
3-HHBB(F, F)-F	(7-6)	3%
4-HHBB(F, F)-F	(7-6)	3%
5-HHBB(F, F)-F	(7-6)	3%
3-HH2BB(F, F)-F	(7-15)	3%

4-HH2BB (F, F) - F (7-15) 3%

上記の組成物に下記の化合物 (1-6-133) を3重量%の割合で添加した。

[化180]



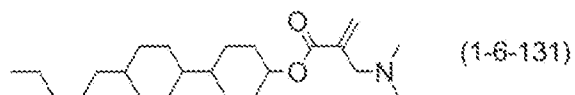
$N_I = 114.2^\circ\text{C}$; $\eta = 18.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.090$; $\Delta \varepsilon = 3.8$.

[0400] [使用例31]

5-HB-CL	(5-2)	3%
7-HB (F) - F	(5-3)	7%
3-HH-4	(2-1)	9%
3-HH-EMe	(2-2)	21%
3-HHEB-F	(6-10)	9%
5-HHEB-F	(6-10)	8%
3-HHEB (F, F) - F	(6-12)	9%
4-HHEB (F, F) - F	(6-12)	7%
4-HGB (F, F) - F	(6-103)	6%
5-HGB (F, F) - F	(6-103)	6%
2-H2GB (F, F) - F	(6-106)	4%
3-H2GB (F, F) - F	(6-106)	6%
5-GHB (F, F) - F	(6-109)	5%

上記の組成物に下記の化合物 (1-6-131) を5重量%の割合で添加した。

[化181]



$N_I = 80.6^\circ\text{C}$; $\eta = 19.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta n = 0.065$; $\Delta \varepsilon =$

5. 6.

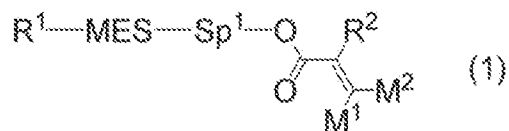
産業上の利用可能性

[0401] 化合物（１）は、化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、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。化合物（１）を含む液晶組成物は、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、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。この組成物を含む液晶表示素子は、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するので、液晶プロジェクター、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。

[化1]



式(1)において、

R¹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く；

MESは、少なくとも1つの環を有するメソゲン基であり；

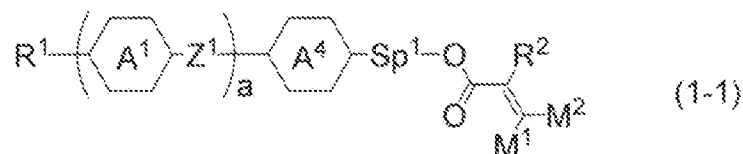
Sp¹は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの−CH₂−は、−O−、−CO−、−COO−、−OCO−、または−OCOO−で置き換えられてもよく、少なくとも1つの−(CH₂)₂−は、−CH=CH−または−C≡C−で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

M¹およびM²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、式(1a)、式(1b)、または式(1c)で表される基であり：

[請求項2] 式(1-1)で表される、請求項1に記載の化合物。

[化4]



式(1-1)において、

R^1 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く；

環 A^1 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、または2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から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く；

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

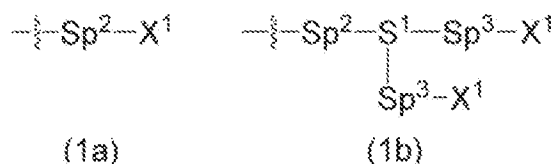
Sp^1 は、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

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のアルキルであり；

a は0、1、2、3、または4であり；

R^2 は、式(1a)または式(1b)で表される基であり：

[化5]



式(1a)および式(1b)において、

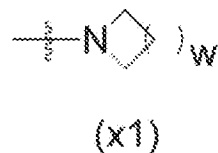
Sp^2 および Sp^3 は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられて

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；

S^1 は、 $>CH-$ または $>N-$ であり；

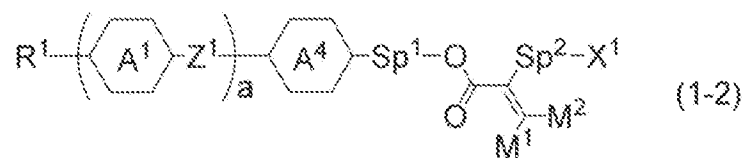
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式(x1)、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、式(x1)におけるwは1、2、3または4である。

[化6]



[請求項3] 式(1-2)で表される、請求項1または2に記載の化合物。

[化7]



式(1-2)において、

R^1 は、炭素数1から15のアルキル、炭素数2から15のアルケニル、炭素数1から14のアルコキシ、または炭素数2から14のアルケニルオキシであり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

環 A^1 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-

ージイル、デカヒドロナフタレンー2, 6ージイル、1, 2, 3, 4ーテトラヒドロナフタレンー2, 6ージイル、テトラヒドロピランー2, 5ージイル、1, 3ージオキサソーンー2, 5ージイル、ピリミジンー2, 5ージイル、ピリジンー2, 5ージイル、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレンー3, 17ージイル、または2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17ーテトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレンー3, 17ージイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、フッ素、塩素、炭素数1から12のアルキル、炭素数2から12のアルケニル、炭素数1から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く；

Z^1 は、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；

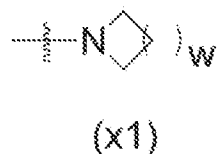
Sp^1 および Sp^2 は独立して、単結合または炭素数1から10のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

M^1 および M^2 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つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数1から5のアルキルであり；

X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式 (x1)、 $-COOH$ 、 $-SH$ 、 $-B(OH)_2$ 、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から10のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は

、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ 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、式(×1)におけるwは1、2、3または4であり；

[化8]

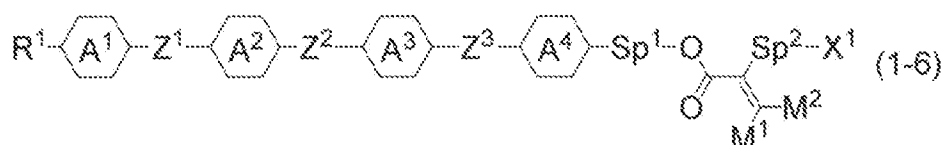
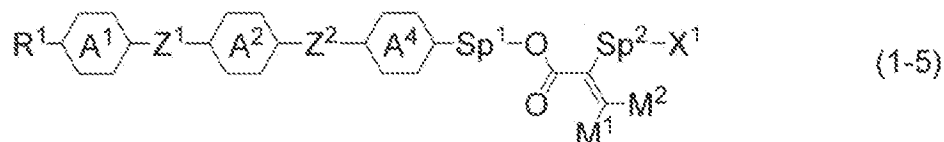
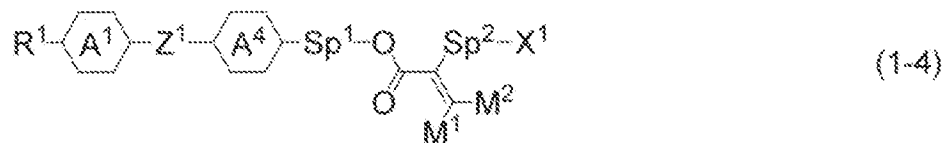


aは0、1、2、3、または4である。

[請求項4]

式(1-3)から式(1-6)のいずれか1つで表される、請求項1から3のいずれか1項に記載の化合物。

[化9]



式(1-3)から式(1-6)において、

R^1 は、炭素数1から15のアルキル、炭素数2から15のアルケ

ニル、炭素数 1 から 14 のアルコキシ、または炭素数 2 から 14 のアルケニルオキシであり、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

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、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、ペルヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイル、または 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-テトラデカヒドロシクロペンタ [a] フェナントレン-3, 17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも 1 つの水素はフッ素、塩素、炭素数 1 から 7 のアルキル、炭素数 2 から 7 のアルケニル、または炭素数 1 から 6 のアルコキシで置き換えられてもよく；

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 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；

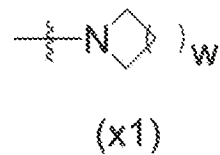
Sp^1 および Sp^2 は独立して、単結合または炭素数 1 から 7 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、または $-OCO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

M^1 および M^2 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り；

X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-OR^3$ 、 $-N(R^3)_2$ 、式 (x1)、または $-Si(R^3)_3$ で表される基であり、ここで、 R^3 は、水素ま

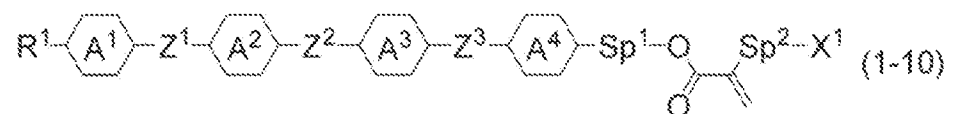
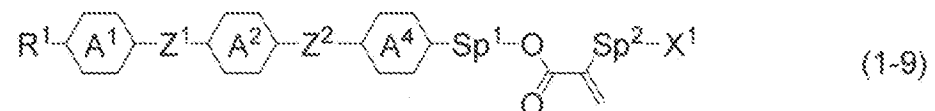
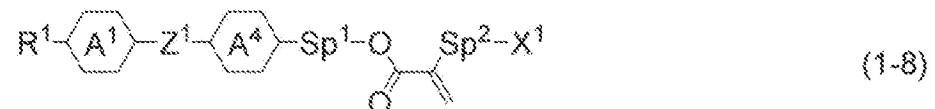
たは炭素数 1 から 5 のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも 1 つの $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(\text{CH}_2)_2-$ は、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく、式 (x1) における w は 1、2、3 または 4 である。

[化10]



[請求項5] 式 (1-7) から式 (1-10) のいずれか 1 つで表される、請求項 1 から 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

[化11]



式 (1-7) から式 (1-10) において、

R^1 は、炭素数1から10のアルキル、炭素数2から10のアルケニル、または炭素数1から9のアルコキシであり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

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、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、ペルヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイル、または2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-テトラデカヒドロシクロペンタ[a]フェナントレン-3,17-ジイルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素はフッ素、塩素、炭素数1から5のアルキル、炭素数2から5のアルケニル、または炭素数1から4のアルコキシで置き換えられてもよく；

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ であり；

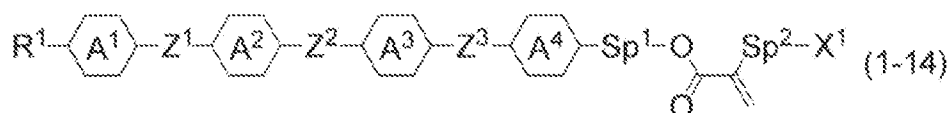
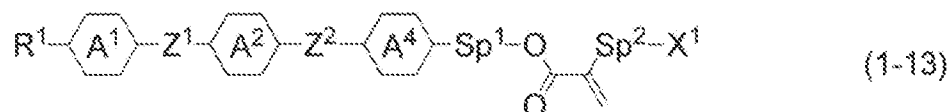
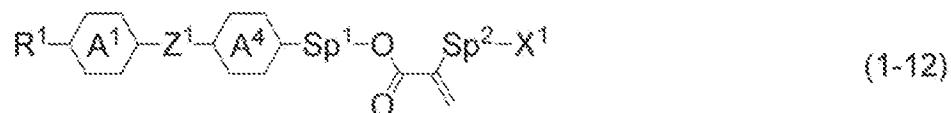
Sp^1 は、単結合または炭素数1から7のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数1から7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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数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 $-CH_2-$ は、 $-O-$ 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、フッ素で置き換えられてもよい。

[請求項6] 式(1-11)から式(1-14)のいずれか1つで表される、請求項1から5のいずれか1項に記載の化合物。

[化12]



式(1-11)から式(1-14)において、

R^1 は、炭素数1から10のアルキル、炭素数2から10のアルケニル、または炭素数1から9のアルコキシであり、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

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、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く；

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合または $-(CH_2)_2-$ で

あり；

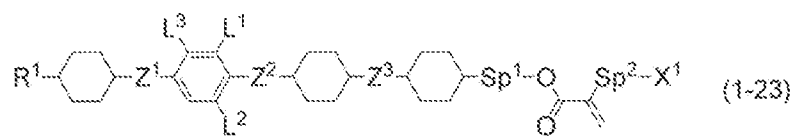
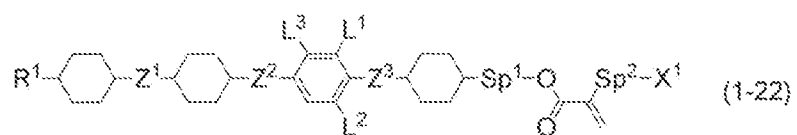
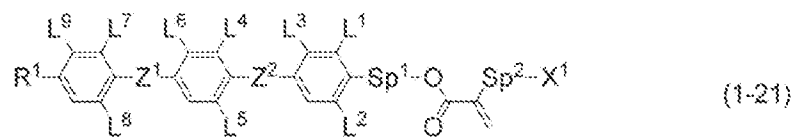
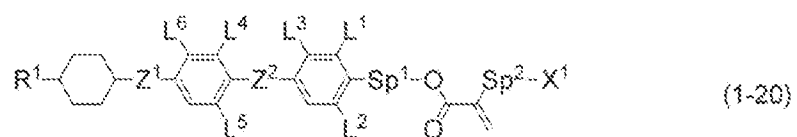
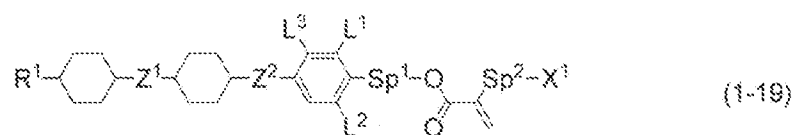
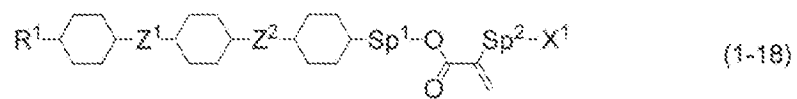
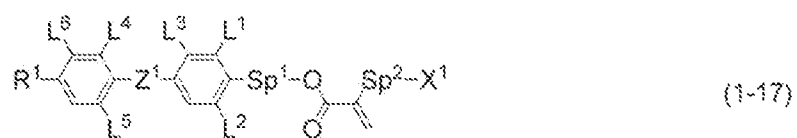
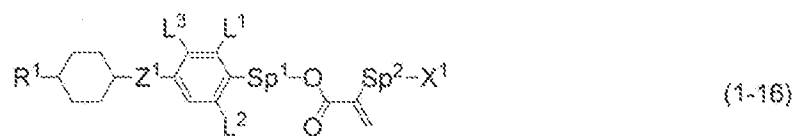
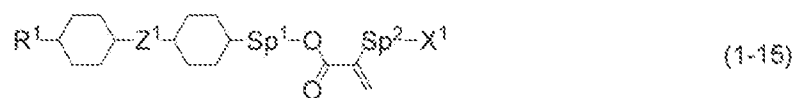
$S p^1$ は、単結合または炭素数1から5のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

$S p^2$ は、炭素数1から5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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

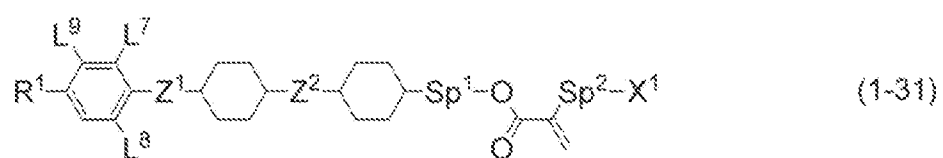
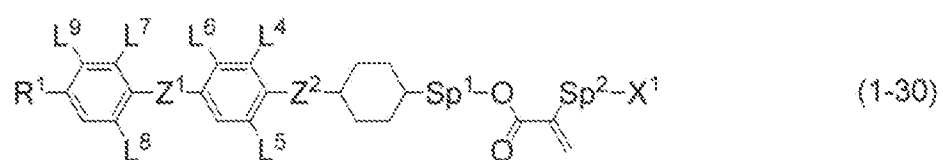
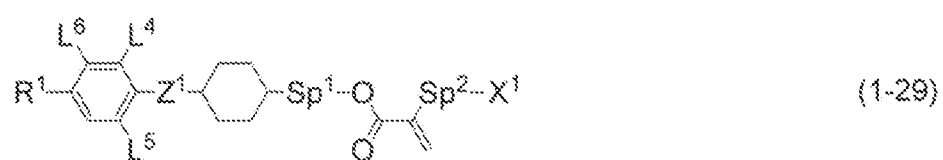
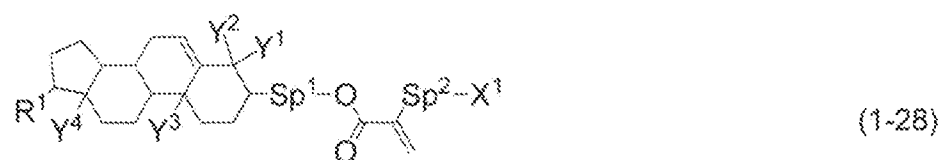
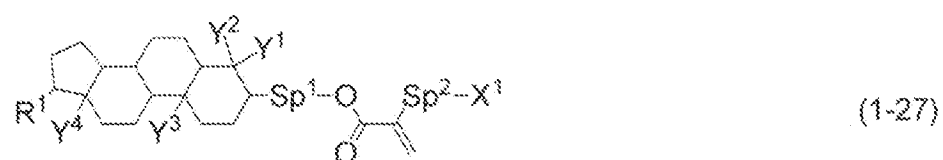
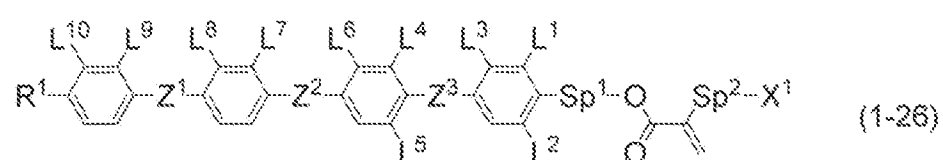
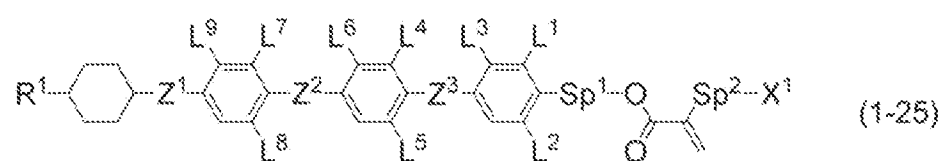
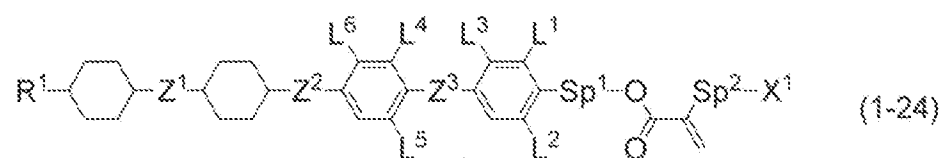
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数1から5のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも1つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも1つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

[請求項7] 式(1-15)から式(1-31)のいずれか1つで表される、請求項1から6のいずれか1項に記載の化合物。

[化13]



[化14]



式 (1-15) から式 (1-31) において、

R^1 は、炭素数 1 から 10 のアルキル、炭素数 2 から 10 のアルケニル、または炭素数 1 から 9 のアルコキシであり、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

Z^1 、 Z^2 、および Z^3 は独立して、単結合または $-(CH_2)_2-$ であり；

Sp^1 は、単結合または炭素数 1 から 5 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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数 1 から 5 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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

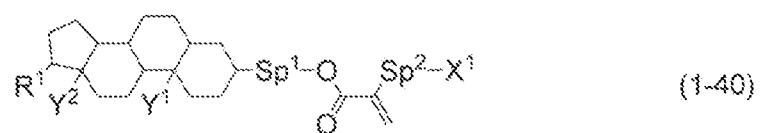
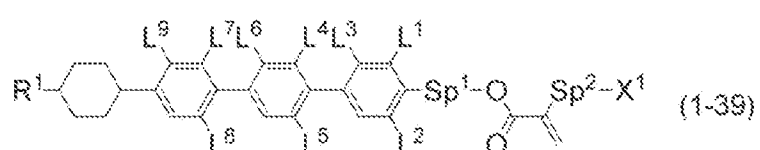
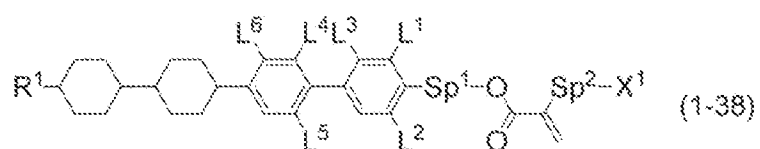
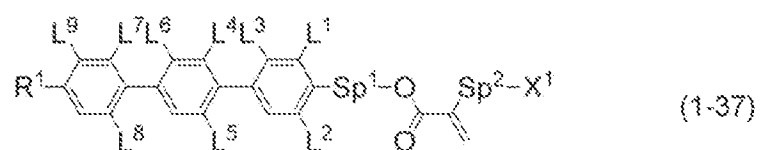
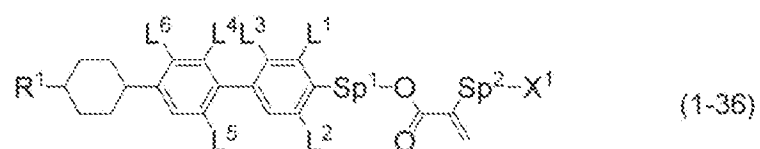
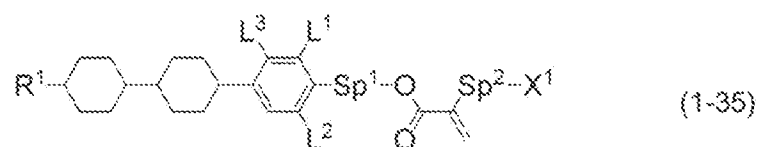
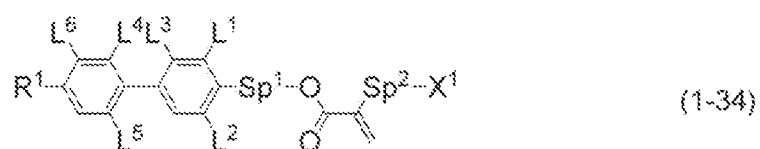
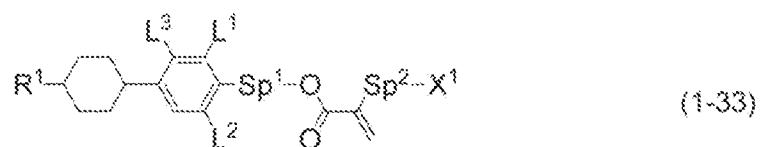
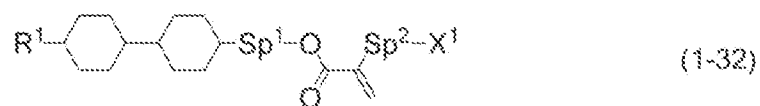
L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、 L^9 、および L^{10} は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、および Y^4 は独立して、水素またはメチルであり；

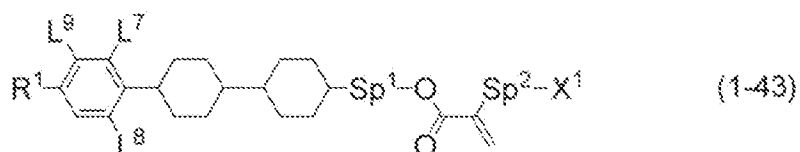
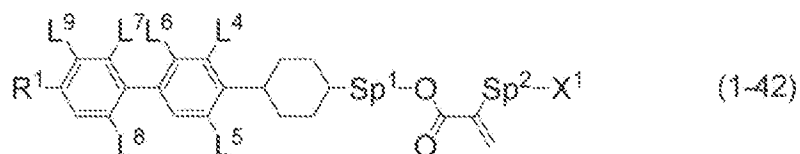
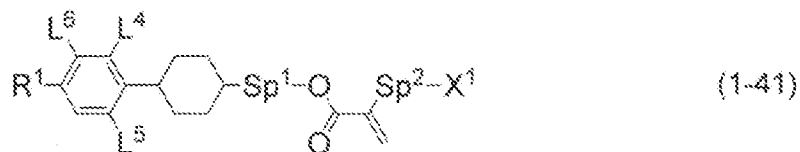
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数 1 から 4 のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

[請求項8] 式 (1-32) から式 (1-43) のいずれか 1 つで表される、請求項 1 から 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

[化15]



[化16]



式（１－３２）から式（１－４３）において、

R^1 は、炭素数１から１０のアルキルであり；

Sp^1 は、単結合または炭素数１から５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、 $-O-$ 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、フッ素で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数１から５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、 $-O-$ で置き換えられてもよく；

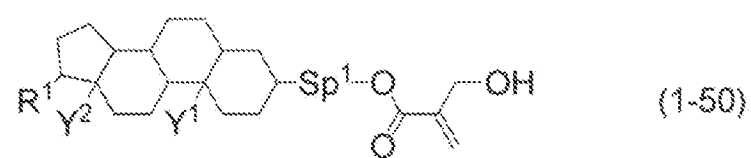
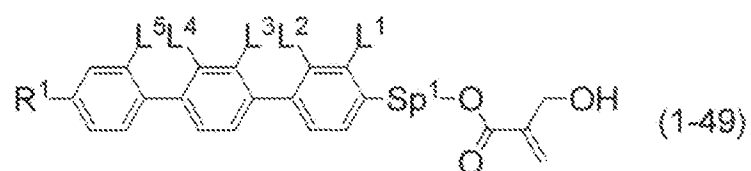
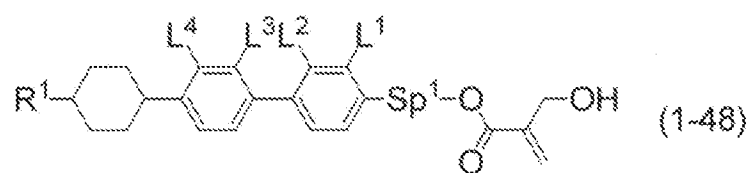
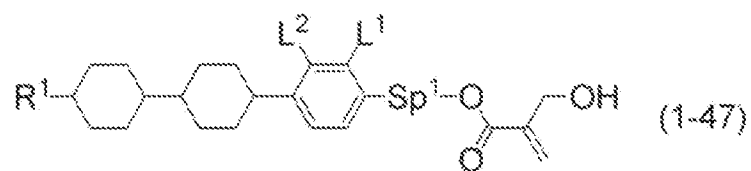
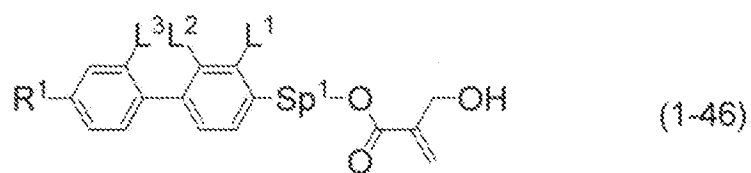
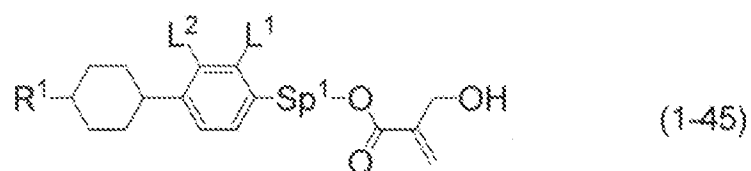
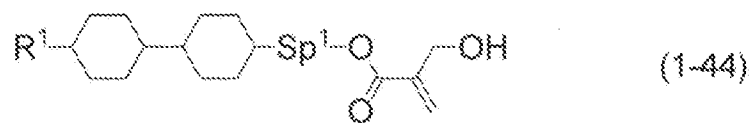
L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L^6 、 L^7 、 L^8 、および L^9 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Y^1 および Y^2 は独立して、水素またはメチルであり；

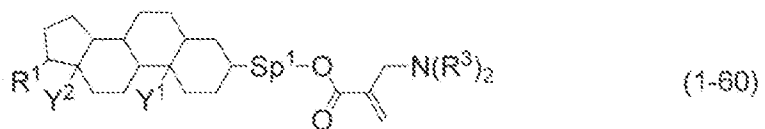
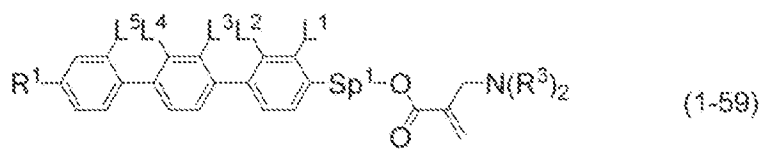
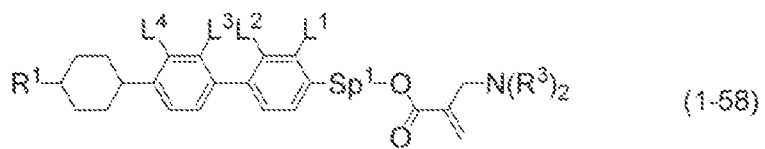
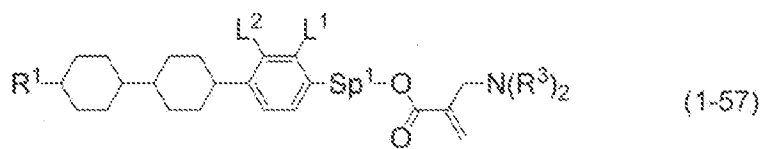
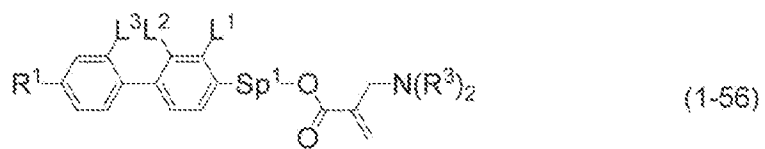
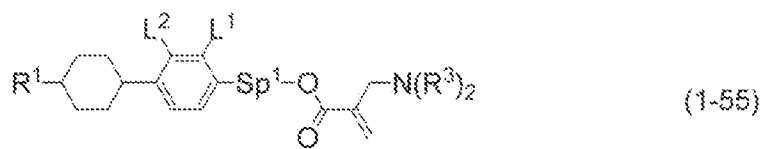
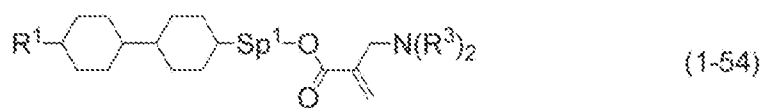
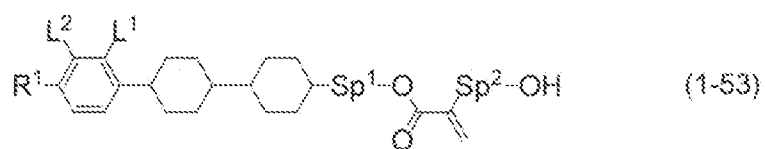
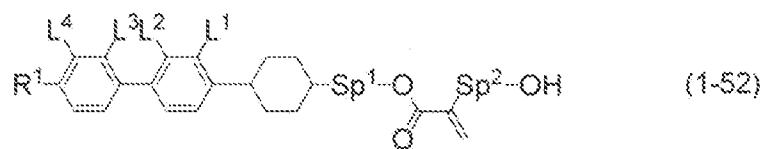
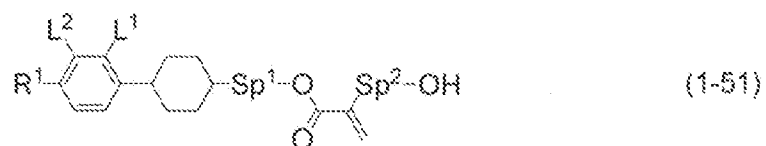
X^1 は、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^3)_2$ であり、ここで、 R^3 は、水素または炭素数１から４のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ で置き換えられてもよい。

[請求項9] 式(1-44)から式(1-63)のいずれか1つで表される、請求項1から8のいずれか1項に記載の化合物。

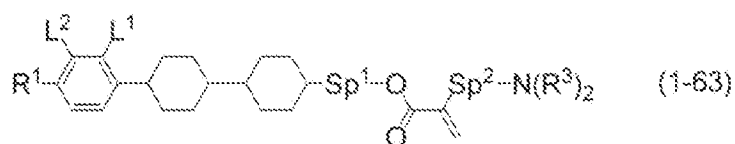
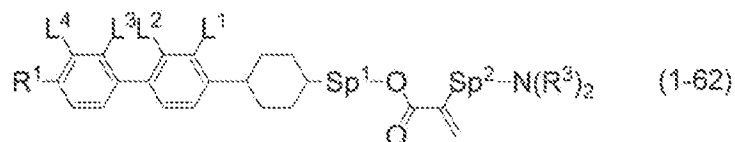
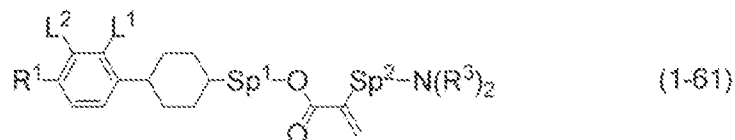
[化17]



[化18]



[化19]



式（１－４４）から式（１－６３）において、

R^1 は、炭素数１から１０のアルキルであり；

Sp^1 は、単結合または炭素数１から３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、 $-\text{O}-$ 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、フッ素で置き換えられてもよく；

Sp^2 は、炭素数１から５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、 $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく；

L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、および L^5 は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

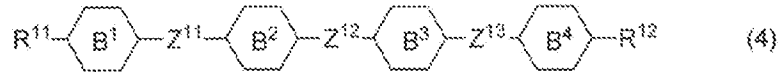
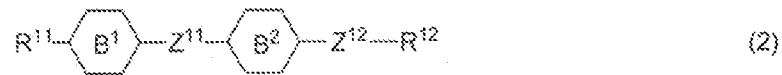
Y^1 および Y^2 は独立して、水素またはメチルであり；

R^3 は、水素、メチルまたはエチルである。

[請求項10] 請求項１から９のいずれか１項に記載の化合物の少なくとも１つを含有する液晶組成物。

[請求項11] 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１０に記載の液晶組成物。

[化20]



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 $-\text{CH}_2-$ 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；

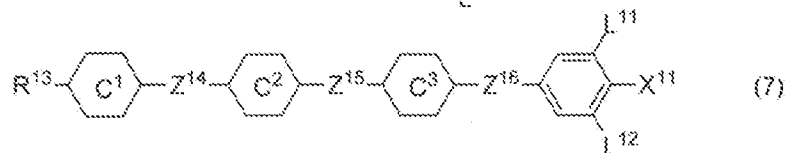
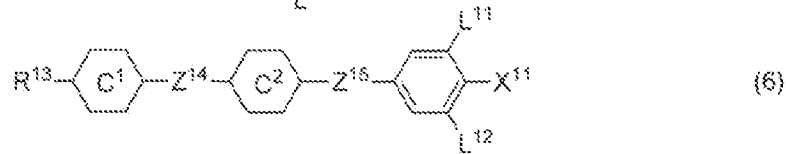
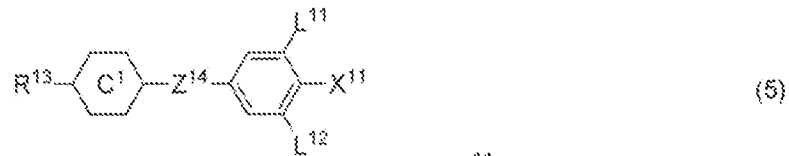
環 B^1 、環 B^2 、環 B^3 、および環 B^4 は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

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

[請求項12]

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10または11に記載の液晶組成物。

[化21]



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；

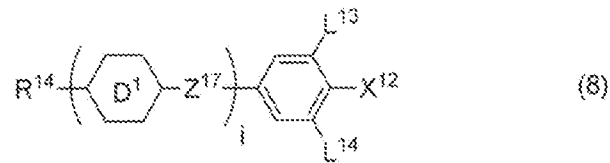
Z^{14} 、 Z^{15} 、および Z^{16} は独立して、単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、または $-(\text{CH}_2)_4-$ であり；

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13]

式（８）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１０または１１に記載の液晶組成物。

[化22]



(8)

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、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または $-CH_2O-$ であり；

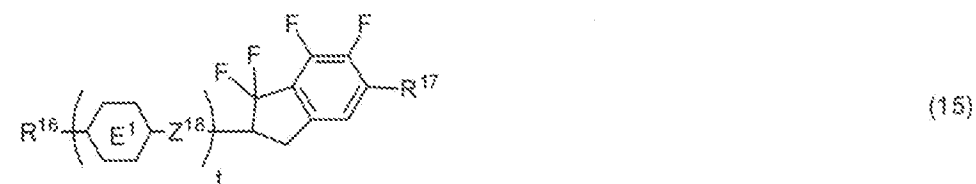
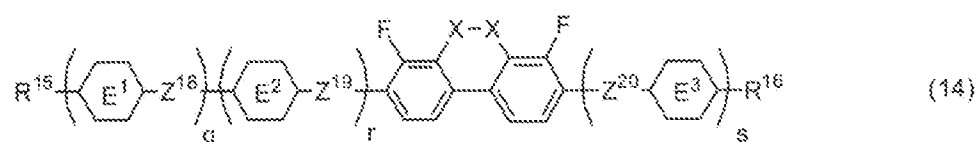
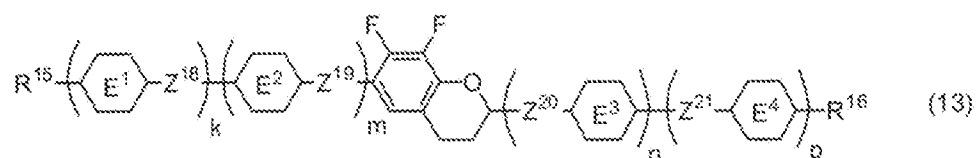
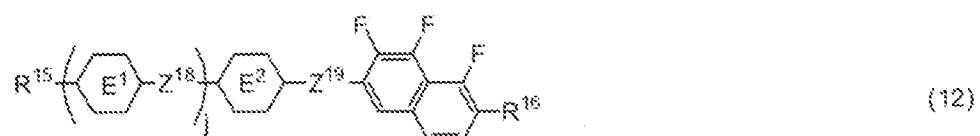
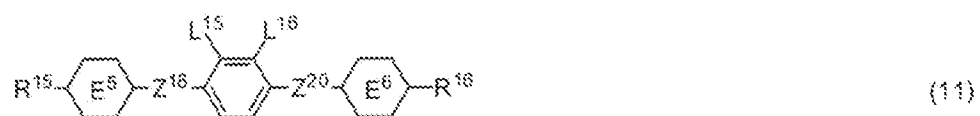
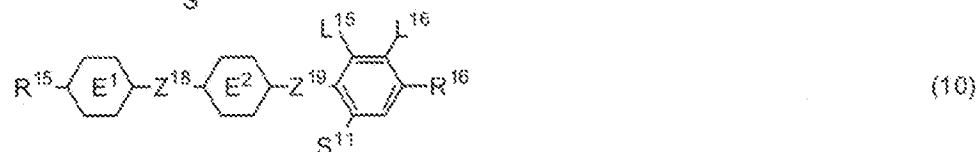
L^{13} および L^{14} は独立して、水素またはフッ素であり；

i は、１、２、３、または４である。

[請求項14]

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１０または１１に記載の液晶組成物。

[化23]



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E¹、環E²、環E³、および環E⁴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、-(CH₂)₂-、-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；

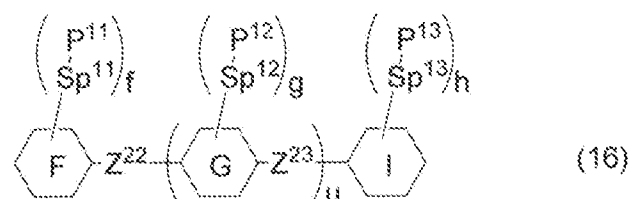
S¹¹は、水素またはメチルであり；

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15] 式(16)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの重合性化合物を含有する、請求項10から14のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[化24]



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-ジオキサン-2-イル、ピリミジン-2-イル、またはピリジン-2-イルであり、これらの環において、少なくとも1つの水素は、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 $-(CH_2)_2-$ 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、重合性基であり；

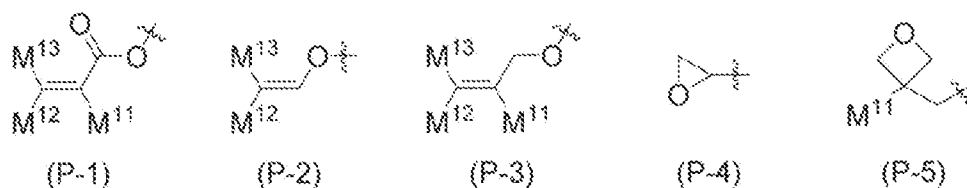
$S p^{11}$ 、 $S p^{12}$ 、および $S p^{13}$ は独立して、単結合または炭素数 1 から 10 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、または $-OCOO-$ で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの $-(CH_2)_2-$ は、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも 1 つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

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16] 請求項15に記載の式(16)において、 P^{11} 、 P^{12} 、および P^{13} が独立して式(P-1)から式(P-5)で表される基の群から選択される重合性基である、請求項15に記載の液晶組成物。

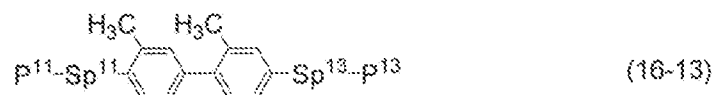
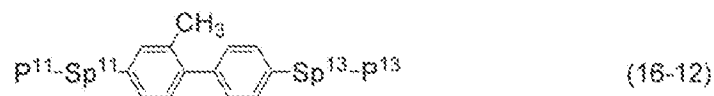
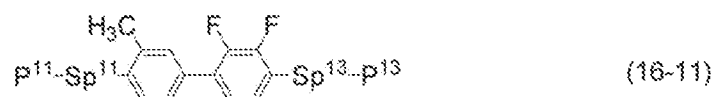
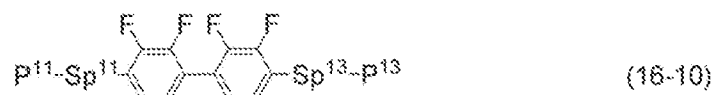
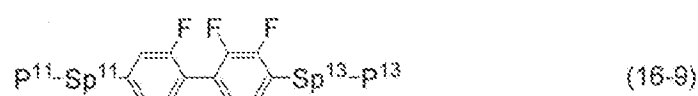
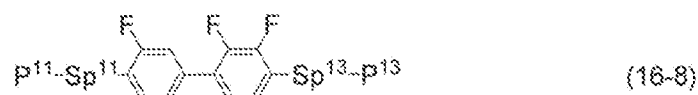
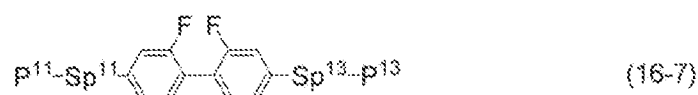
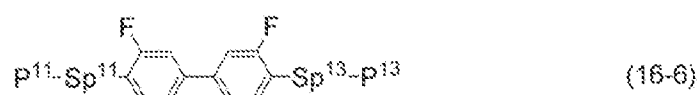
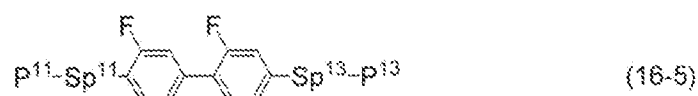
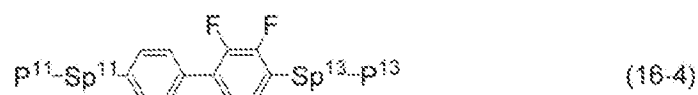
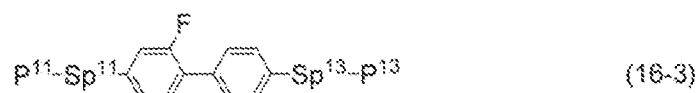
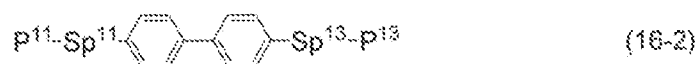
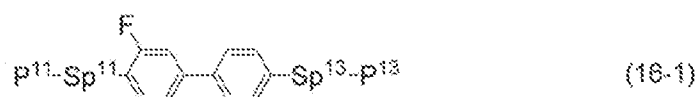
[化25]



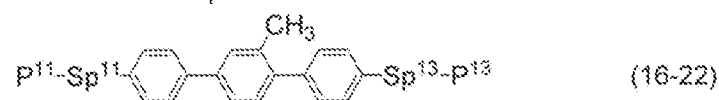
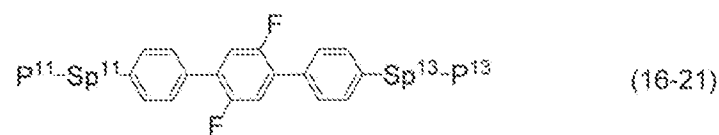
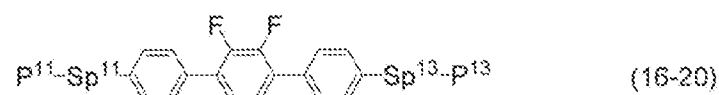
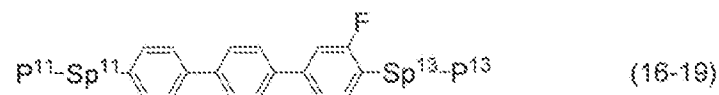
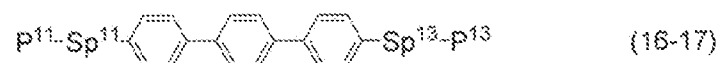
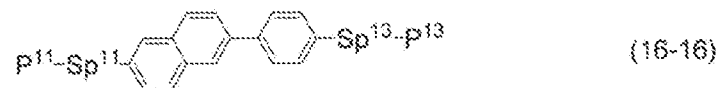
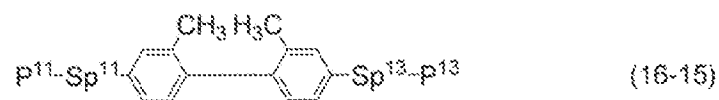
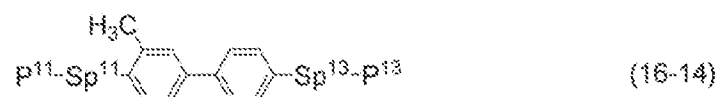
式(P-1)から式(P-5)において、 M^{11} 、 M^{12} 、および M^{13} は独立して、水素、フッ素、炭素数1から5のアルキル、または少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数1から5のアルキルである。

[請求項17] 式(16-1)から式(16-27)で表される化合物の群から選択される少なくとも1つの重合性化合物を含有する、請求項10から16のいずれか1項に記載の液晶組成物。

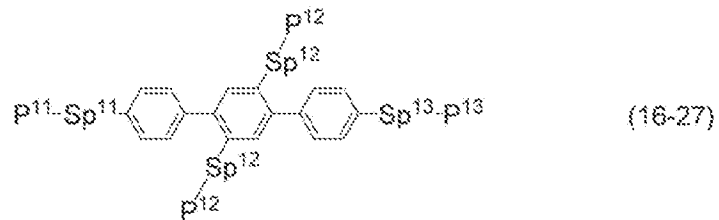
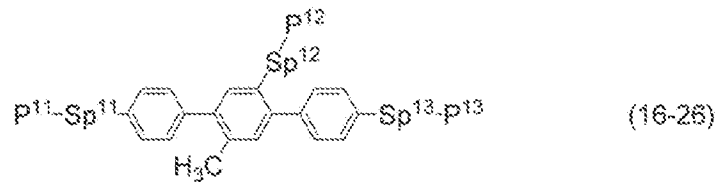
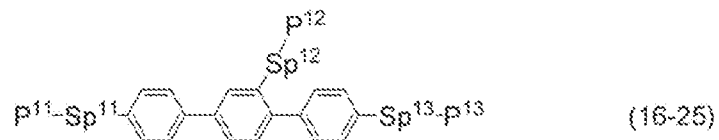
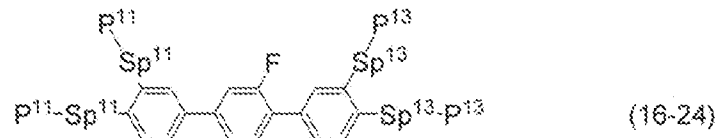
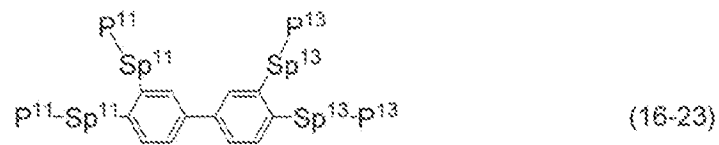
[化26]



[化27]



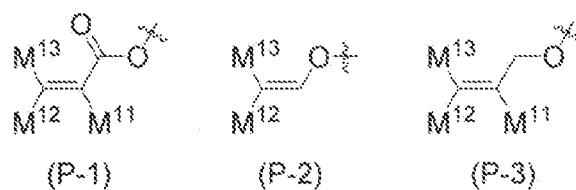
[化28]



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る重合性基であり、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：

[化29]



$S p^{11}$ 、 $S p^{12}$ 、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 $-(CH_2)_2-$ 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、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

[請求項18] 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、および消泡剤から選択される少なくとも1つをさらに含有する、請求項10から17のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項19] 請求項10から18のいずれか1項に記載の液晶組成物を少なくとも1つ含有する液晶表示素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/053316

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

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)

C07C, C07D, C07F, C09K19/00-19/60, G02F1/1337

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

Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2016

Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2016 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2016

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

CAPLUS/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 A	JP 2005-128201 A (NOF Corp.), 19 May 2005 (19.05.2005), claims; paragraphs [0043], [0048]; examples (Family: none)	1-2, 10, 15-19 11-14 3-9
Y	WO 2014/129268 A1 (JNC Corp.), 28 August 2014 (28.08.2014), claims; examples & US 2015/0376504 A1 claims; examples & EP 2960226 A1 & CN 105143164 A & TW 201435049 A & KR 10-2015-0123848 A	11-14
Y	WO 2014/174929 A1 (JNC Corp.), 30 October 2014 (30.10.2014), claims; examples & CN 105143283 A & TW 201446943 A	11-13



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

01 April 2016 (01.04.16)

Date of mailing of the international search report

12 April 2016 (12.04.16)

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/JP2016/053316

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2013-0132032 A (KOREA RESEARCH INSTITUTE OF CHEMICAL TECHNOLOGY), 04 December 2013 (04.12.2013), claims; examples (Family: none)	1-19
A	JP 2012-255845 A (Fujifilm Corp.), 27 December 2012 (27.12.2012), claims; page 44, the lowest part, 3rd compound from the left; examples (Family: none)	1-19

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/053316

Continuation of A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

(International Patent Classification (IPC))

*C07C69/732(2006.01)i, C07C229/08(2006.01)i, C07C229/30(2006.01)i,
C07C321/10(2006.01)i, C07D213/55(2006.01)i, C07D239/26(2006.01)i,
C07D295/145(2006.01)i, C07D309/06(2006.01)i, C07D319/06(2006.01)i,
C07F5/02(2006.01)i, C07F7/18(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i,
C09K19/34(2006.01)i, C09K19/42(2006.01)i, C09K19/54(2006.01)i,
G02F1/1337(2006.01)i*

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

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（I P C））

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（I P C））

Int.Cl. C07C, C07D, C07F, C09K19/00-19/60, G02F1/1337

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	1 9 2 2 - 1 9 9 6 年
日本国公開実用新案公報	1 9 7 1 - 2 0 1 6 年
日本国実用新案登録公報	1 9 9 6 - 2 0 1 6 年
日本国登録実用新案公報	1 9 9 4 - 2 0 1 6 年

国際調査で使用了電子データベース（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	JP 2005-128201 A（日本油脂株式会社）	1-2, 10, 15-19
Y	2005.05.19, 特許請求の範囲、段落[0043]、[0048]、実施例	11-14
A	（ファミリーなし）	3-9
Y	WO 2014/129268 A1（J N C株式会社） 2014.08.28, 特許請求の範囲、実施例 & US 2015/0376504 A1, Claims, Examples & EP 2960226 A1 & CN 105143164 A & TW 201435049 A & KR 10-2015-0123848 A	11-14

☒ 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

0 1 . 0 4 . 2 0 1 6

国際調査報告の発送日

1 2 . 0 4 . 2 0 1 6

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁（I S A / J P）

郵便番号 1 0 0 - 8 9 1 5

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）

松本 淳

電話番号 0 3 - 3 5 8 1 - 1 1 0 1 内線 3 4 4 3

4 H

4 6 7 5

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリ*	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
Y	WO 2014/174929 A1 (JNC株式会社) 2014. 10. 30, 特許請求の範囲、実施例 & CN 105143283 A & TW 201446943 A	11-13
A	KR 10-2013-0132032 A (KOREA RESEARCH INSTITUTE OF CHEMICAL TECHNOLOGY) 2013. 12. 04, Claims, Examples (ファミリーなし)	1-19
A	JP 2012-255845 A (富士フイルム株式会社) 2012. 12. 27, 特許請求の範囲、 第44頁際下段左から3番目の化合物、実施例 (ファミリーなし)	1-19

発明の属する分野の分類

C07C69/732(2006.01)i, C07C229/08(2006.01)i, C07C229/30(2006.01)i,
C07C321/10(2006.01)i, C07D213/55(2006.01)i, C07D239/26(2006.01)i,
C07D295/145(2006.01)i, C07D309/06(2006.01)i, C07D319/06(2006.01)i,
C07F5/02(2006.01)i, C07F7/18(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i,
C09K19/42(2006.01)i, C09K19/54(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i