

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7346903号
(P7346903)

(45)発行日 令和5年9月20日(2023.9.20)

(24)登録日 令和5年9月11日(2023.9.11)

(51)国際特許分類		F I	
G 0 2 F	1/1334(2006.01)	G 0 2 F	1/1334
C 0 9 K	19/12 (2006.01)	C 0 9 K	19/12
C 0 9 K	19/14 (2006.01)	C 0 9 K	19/14
C 0 9 K	19/18 (2006.01)	C 0 9 K	19/18
C 0 9 K	19/20 (2006.01)	C 0 9 K	19/20

請求項の数 12 (全101頁) 最終頁に続く

(21)出願番号	特願2019-92873(P2019-92873)	(73)特許権者	000002886 D I C 株式会社 東京都板橋区坂下3丁目3番58号
(22)出願日	令和1年5月16日(2019.5.16)	(74)代理人	100177471 弁理士 小川 真治
(65)公開番号	特開2020-187293(P2020-187293 A)	(74)代理人	100163290 弁理士 岩本 明洋
(43)公開日	令和2年11月19日(2020.11.19)	(74)代理人	100149445 弁理士 大野 孝幸
審査請求日	令和4年3月17日(2022.3.17)	(72)発明者	野中 祐貴 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472 - 1 D I C 株式会社 埼玉工場内
		(72)発明者	中田 秀俊 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472 - 1 D I C 株式会社 埼玉工場内 最終頁に続く

(54)【発明の名称】 液晶素子、及び液晶素子を用いた物品

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

一对の基板と、

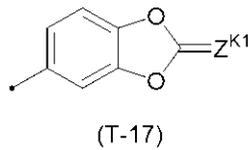
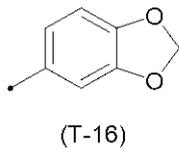
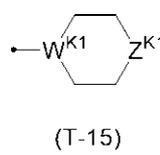
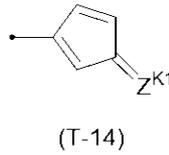
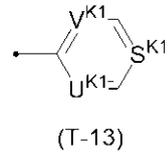
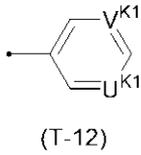
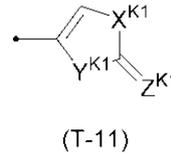
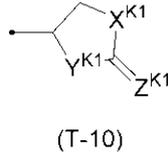
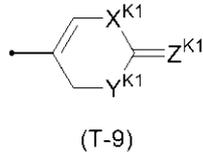
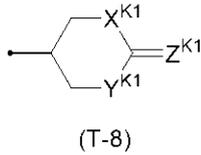
前記一对の基板間に挟持され、ポリマーネットワークを形成する重合体を含む液晶層を有し、

前記液晶層は、以下の K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤を1種又は2種以上を含む高分子分散型液晶素子。

K^{i1} は、炭素原子数3~40の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも2個以上の第二級炭素原子は $-C(=X^{i1})-$ 及び/又は $-(CH-CN)-$ で置換されており、また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-C(=CH_2)-$ 、 $-C(=CHR^{i3})-$ 、 $-C(=CR^{i3}2)-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、また、これらのアルキル基中の水素原子は $P^{i1}-Sp^{i1}-$ で置換されてもよく、 X^{i1} は、酸素原子、硫黄原子、NH又は NR^{i3} を表し、 R^{i3} は炭素原子数1~20の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH=C$ 、 $H-$ 又は $-C-C-$ で置換されてもよく、

又は、 K^{i1} は以下の一般式(T-8)から(T-17)

【化 4】



(式中、黒点は結合手を表し、

X^{K1} 及び Y^{K1} は、それぞれ独立して $-CH_2-$ 、酸素原子又は硫黄原子を表し、

Z^{K1} は、それぞれ独立して酸素原子又は硫黄原子を表し、

W^{K1} 、 U^{K1} 、 V^{K1} 及び S^{K1} は、それぞれ独立して、メチン基又は窒素原子を表し、

ここで一般式 (T-8) から (T-17) で表される基中の水素原子は $-Sp^{i1}-p^{i1}$ で置換されていてもよく、

P^{i1} は重合性基を表し、

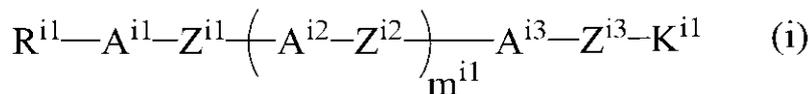
Sp^{i1} はスペーサー基又は単結合を表す。) で表される基を表し、

P^{i1} 、 Sp^{i1} 、 X^{i1} 、 R^{i3} が複数存在する場合、それらは同一であっても異なっても良い。

【請求項 2】

前記自発配向剤が一般式 (i) で表される請求項 1 に記載の液晶素子。

【化 1】



(式中、 K^{i1} は請求項 1 に記載の K^{i1} と同じ意味を表し、

R^{i1} は炭素原子数 1 ~ 40 の直鎖又は分岐のアルキル基又はハロゲン化アルキル基を表し、これらの基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH=CH-$ 又は $-C-C-$ で置換されてもよく、

A^{i1} 、 A^{i2} 及び A^{i3} はそれぞれ独立して 2 価の芳香族基、2 価の環式脂肪族基、又は 2 価の複素環式化合物基を表し、 A^{i1} 中の水素原子は L^{i1} で置換されてもよく、 A^{i2} 及び A^{i3} 中の水素原子は L^{i1} 、 $P^{i2}-Sp^{i2}$ 又は K^{i1} で置換されてもよく、

L^{i1} はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素原子数 1 ~ 40 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、

P^{i2} は重合性基を表し、

Sp^{i2} はスペーサー基又は単結合を表し、

Z^{i1} 、 Z^{i2} 及び Z^{i3} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$

、 - C C -、 - COO -、 - OCO -、 - OCOO -、 - CF₂O -、 - OCF₂ -、
 - CH=CHCOO -、 - OCOCH=CH -、 - CH=C(CH₃)COO -、 - OC
 OC(CH₃)=CH -、 - CH₂-CH(CH₃)COO -、 - OCOCH(CH₃)
 CH₂ -、 - OCH₂CH₂O - 又は炭素原子数 2 ~ 20 のアルキレン基を表し、このアル
 キレン基中の 1 個又は隣接しない 2 個以上の - CH₂ - は - O -、 - COO - 又は - OC
 O - で置換されてもよく、

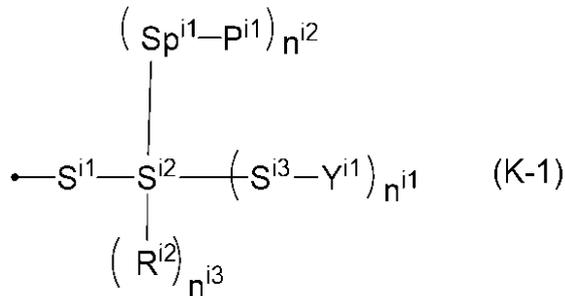
m^{i1} は、0 ~ 3 の整数を表し、

一般式 (i) 中に R^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i2} 、 L^{i1} 、 K^{i1} 、 X^{i1} 、 P^{i2} 及び Sp^{i2} が
 複数存在する場合、それらは同一であっても異なっても良い。))

【請求項 3】

K^{i1} が、一般式 (K-1)

【化 1】



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

S^{i1} 及び S^{i3} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 6 のアルキレン基又は単結合を表し
 、該アルキレン基中の - CH₂ - は酸素原子が直接隣接しないように - CH = CH -、 -
 C C -、 - C (=CH₂) -、 - C (=CHRⁱ³) -、 - C (=CRⁱ³₂) -、 - O
 -、 - NH -、 - C = O -、 - COO - 又は - OCO - で置換されてもよく、

S^{i2} は炭素原子、窒素原子又はケイ素原子を表し、

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

P^{i1} は重合性基を表し、

Sp^{i1} はスペーサー基又は単結合を表し、

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

から選ばれる基を表す請求項 1 又は 2 のいずれか一項に記載の液晶素子。

【請求項 4】

一般式 (K-1) 中の Y^{i1} が、一般式 (Y-1)

10

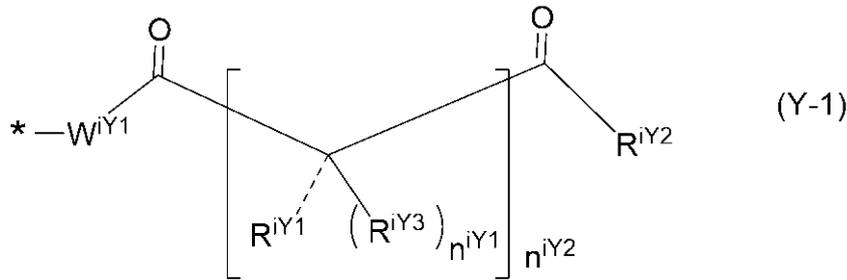
20

30

40

50

【化 1】



(式中、 W^{iY1} は単結合又は酸素原子を表し、破線は単結合又は二重結合を表し、 R^{iY1} は、破線が単結合を表す場合、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O -、- CH = CH - 又は - C C - で置換されてもよく、破線が二重結合を表す場合、= CH₂、= CHR^{iY4}、又は = CR^{iY4}₂ を表し、 R^{iY4} は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O -、- CH = CH - 又は - C C - で置換されてもよく、 R^{iY3} は、破線が単結合を表す場合の R^{iY1} と同じ意味を表し、 R^{iY2} は水素原子又は炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O -、- CH = CH - 又は - C C - で置換されてもよく、 n^{iY1} は破線が二重結合を表す場合 0 であり、破線が単結合を表す場合 1 であり、 n^{iY2} は 0 ~ 5 の整数を表し、 R^{iY1} 、 R^{iY3} 及び R^{iY4} が複数存在する場合、それらは同一であっても異なってもよく、* で S^{i3} と結合する。)

から選ばれる基を表す、請求項 3 に記載の液晶素子。

【請求項 5】

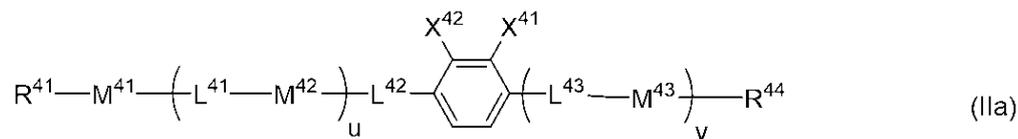
前記自発配向剤は重合性基を有し、

前記液晶層は、基板と接する側に前記自発配向剤から形成された配向制御層を有する請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の液晶素子。

【請求項 6】

前記液晶層は、液晶化合物として、一般式 (IIa) で表される化合物を 1 種または 2 種以上含有する請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の液晶素子。

【化 1】



(式中 R^{41} 及び R^{44} はお互い独立して炭素原子数 1 から 10 のアルキル基又は炭素原子数 2 から 10 のアルケニル基を表し、これらの基中に存在する 1 個のメチレン基又は隣接していない 2 個以上のメチレン基は - O - 又は - S - に置換されていても良く、またこれらの基中に存在する 1 個又は 2 個以上の水素原子はフッ素原子又は塩素原子に置換されても良く、

M^{41} 、 M^{42} 及び M^{43} はお互い独立して、

(a) 1, 4 - シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 個の - CH₂ - 又は隣接していない 2 個以上の - CH₂ - は - O - に置き換えられてもよい。) 及び

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

(c) ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又はデカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基 (ナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基中に存在する 1

個の - C H = 又は隣接していない 2 個以上の - C H = は - N = に置き換えられても良い。))

(d) 1 , 4 - シクロヘキセニレン基

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a)、基 (b)、基 (c) 及び基 (d) はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良く、

L^{41} 、 L^{42} 及び L^{43} はお互い独立して単結合、- C O O -、- O C O -、- C H ₂ C H ₂ -、- (C H ₂) ₄ -、- O C H ₂ -、- C H ₂ O -、- O C F ₂ -、- C F ₂ O - 又は - C C - を表し、 M^{42} 、 M^{43} L^{41} 及び / 又は L^{43} が複数存在する場合は、それらは同一でも良く異なっても良く、

X^{41} 及び X^{42} はフッ素原子を表し、

u 及び v はお互い独立して、0、1 又は 2 を表すが、u + v は 2 以下である。))

10

【請求項 7】

ポリマーネットワークを形成する重合体は、メソゲン骨格を有する重合性化合物から形成される請求項 1 ~ 6 のいずれか一項に記載の液晶素子。

【請求項 8】

請求項 1 に記載の K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤を 1 種又は 2 種以上を含む、高分子分散型液晶素子用液晶組成物。

【請求項 9】

重合開始剤を 1 種又は 2 種以上含有する、請求項 8 に記載の高分子分散型液晶素子用液晶組成物。

【請求項 10】

メソゲン骨格を有する重合性化合物を含有する、請求項 8 又は 9 に記載の高分子分散型液晶素子用液晶組成物。

20

【請求項 11】

メソゲン骨格を有さない重合性化合物を含有する、請求項 8 ~ 10 のいずれか一項に記載の高分子分散型液晶組成物。

【請求項 12】

重合性化合物 (但し、自発配向剤が重合性基を有する場合は自発配向剤を除く) の割合が、液晶組成物全体に対して 1 質量 % から 30 質量 % の範囲である請求項 8 ~ 11 のいずれか一項に記載の高分子分散型液晶組成物。

【発明の詳細な説明】

30

【技術分野】

【0001】

本発明は、液晶素子、及び、それを用いた窓、天窓、屋根、壁、仕切り、間仕切り、扉等の建築用調光素子、扉、窓、ドア、ヘルメット、サンルーフ等の輸送用調光素子、サングラス、眼鏡、サンバイザー、時計、鏡、反射板等の装飾用調光素子、フレキシブル液晶表示素子、反射型液晶表示素子、透明液晶表示素子、可変式拡散フィルム等のディスプレイ用部材等を含む物品に関する。

【背景技術】

【0002】

ディスプレイの高性能化に伴い、表現力の高いスマートフォンやタブレットデバイスなどのモバイル機器ディスプレイ、TV やウィンドウディスプレイなどへの応用が期待される透明ディスプレイ、コントラスト比の高い液晶ディスプレイ、所望の透過 散乱度合いの調光が可能な光シャッター機能をもつ調光素子などの実現が期待されており、これらを実現するための調光材料の開発が重要な課題となっている。

40

【0003】

調光素子用材料のうち、透過 散乱型の調光素子用材料として、高分子分散型液晶 (Polymer-Dispersed Liquid Crystal, PDLC) を用いた高分子分散型液晶表示素子 (PD-LCD) は、素子中において液晶と高分子が互いに相分離し、高分子によるポリマーネットワークが形成された液晶素子方式である。PD-LCD は、透明状態と白濁状態との間のコントラスト比を利用する表示方式のため、偏光板等の光学フィルムを必要としない。そのため、

50

偏光板を用いたTN、STN、IPS又はVAモードの液晶表示素子に比べ、明るい表示が実現できるメリットがあり、しかも、素子の構成も単純であることから、調光ガラス等の光シャッター用途、時計等セグメント表示用途に応用されている。近年では、透過型ディスプレイ、フレキシブルディスプレイといった、従来に無い設計の液晶表示装置も実用化へ向け開発が進められている。特に電圧の無印加時に透過状態、電圧の印加時に非透過状態となるリバースモードタイプの高分子分散型液晶素子が、低消費電力に寄与する用途には好ましい。特に、液晶として負の誘電異方性を有する材料を用い、電圧無印加時に液晶材料が基板に対して垂直配向する構成とすれば、ラビングなど基板への配向処理が不要となるとともに、正の誘電異方性を有する液晶材料を用いたノーマルモードタイプ（電圧の無印加時に非透過状態、電圧の印加時に透過状態）の素子の透明状態に比べて高い透明性が得られ、また正の誘電異方性を有する液晶材料を用いたリバースモードタイプの素子の非透過状態に比べて高い散乱性が得られるため好ましい。

10

【0004】

一方、VA方式の液晶ディスプレイでは、電圧無印加時に液晶分子の垂直配向を誘起するために用いられるポリイミド配向膜（PI）層の製膜にかかるコスト等を省くため、自発配向性添加剤を含有する液晶組成物を用いることにより、PI層を省きつつも、液晶分子の配向を実現するための方法が検討されている（特許文献1参照）。また、リバースモードタイプの高分子分散型液晶素子においても、垂直配向剤を用いてPI層を省く検討が開始されている（特許文献2参照）。

【先行技術文献】

20

【特許文献】

【0005】

【文献】特表2014-524951号公報

国際公開第2018/105726号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

リバースモードタイプの高分子分散型液晶素子は、液晶分子を垂直に配向させた状態で紫外光を照射して重合性モノマーを重合し、ポリマーネットワークを形成させることから、通常のVA方式の液晶表示素子に比べて、重合性モノマーの割合が多く、液晶分子の垂直配向性が乱れやすい。そのため、高分子分散型液晶素子において垂直配向剤を用いる開発は、液晶分子を垂直に配向させる配向規制力及び配向ムラ等の電気光学特性において、更なる改善が求められている。

30

【0007】

また、高分子分散型液晶素子は、重合性モノマーや、重合開始剤等の添加剤を含有することから、液晶分子との相溶性が高く、液晶化合物や重合性モノマーなどが析出しない高分子分散型液晶素子用液晶組成物が求められている。

【0008】

そこで、本発明の目的は、PI層を設けなくとも配向性に優れ、配向ムラの少ない、ポリマーネットワークを形成した液晶層を有する液晶素子、及び該液晶素子を用いた物品、並びにそれらの液晶素子及び物品に適し、相溶性に優れた高分子分散型液晶素子用液晶組成物を提供することにある。

40

【課題を解決するための手段】

【0009】

本発明は、前記課題に対して鋭意検討した結果、特定の極性基を有する自発配向剤を用いて、ポリマーネットワークが形成された液晶層とすることで、前記課題を解決できることを見出し本願発明の完成に至った。

【0010】

即ち、本発明は、

一対の基板と、

50

前記一对の基板間に挟持され、ポリマーネットワークを形成する重合体を含む液晶層を有し、

前記液晶層は、以下の K^{i1}

K^{i1} は、炭素原子数3～40の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも2個以上の第二級炭素原子は $-C(=X^{i1})-$ 及び/又は $-(CH-CN)-$ で置換されており、また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-C(=CH_2)-$ 、 $-C(=CHR^{i3})-$ 、 $-C(=CR^{i3}_2)-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C=C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、また、これらのアルキル基中の水素原子は $P^{i1}-Sp^{i1}-$ で置換されてもよく、 X^{i1} は、酸素原子、硫黄原子、NH又は NR^{i3} を表し、 R^{i3} は炭素原子数1～20の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH=CH-$ 又は $-C=C-$ で置換されてもよく、また、少なくとも1つ以上の $P^{i1}-Sp^{i1}-$ を有してもよいか、

又は、 K^{i1} は1価の芳香族基、1価の環式脂肪族基、又は1価の複素環式化合物基を表し、これらの基の少なくとも1個以上の第二級炭素原子は $-C(=X^{i1})-$ 及び/又は $-(CH-CN)-$ で置換されている。

で表される部分構造を有する自発配向剤を1種又は2種以上を含む液晶素子を提供する。

【発明の効果】

【0011】

本発明の液晶素子は、ポリマーネットワークを形成する重合体を含む液晶層を有し、PI層を設けなくとも、配向ムラが無いまたは低減された配向ムラを示し、液晶分子の均一な垂直配向が可能な液晶表示素子の提供が可能となる。

【図面の簡単な説明】

【0012】

【図1】本発明の液晶素子の構成の一例であって、電圧無印加の状態を模式的に示す図

【図2】図1において電圧印加した状態を模式的に示す図

【発明を実施するための形態】

【0013】

本発明の液晶素子の実施について説明する。

【0014】

なお、本実施の形態は、発明の趣旨をよりよく理解させるために具体的な例として説明するものであり、特に指定のない限り、本発明を限定するものではない。

<液晶素子>

本発明の液晶素子は、一对の基板と、一对の基板間に挟持され、ポリマーネットワークを形成する重合体を含む液晶層を有し、液晶層中に K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤を含むものである。

【0015】

本発明の液晶素子は、 K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤を含有する液晶層が設けられているため、一对の基板間の液晶層側にポリイミド配向膜等の配向膜が設けられている必要がない。すなわち、本実施形態の液晶素子は、二つの基板のうち少なくとも一方の基板がポリイミド配向膜等の配向膜を有さない構成をとることができる。

【0016】

本発明の前記液晶素子は、上記要素を備えるものであれば、具体的な実施形態は特に限定されるものではないが、例えば、少なくとも一方に電極を有する2枚の基材から構成される中空素子中に相分離液晶層が挟持された構成が好ましい。

【0017】

本発明の前記液晶素子は、無電源状態において相分離液晶層中の液晶のホメオトロピック配向が維持されるものである。このため、いわゆるリバースモードで駆動可能な素子として利用できる。すなわち、該液晶素子は、電圧無印加時には透明状態であり、電圧印加

10

20

30

40

50

時には散乱状態とすることができる。

【0018】

本発明の前記液晶素子は、ポリマーネットワークを形成する緻密な重合体によっても液晶分子の配向が制御されている。よって、本発明の液晶素子は、外的な応力による配向乱れを起こしにくく、高い応力耐性を有する。本発明の前記液晶素子は、曲げ応力加わる環境下でも表示不良を起こしにくいため、屈曲可能なものとしてすることができる。従って、本発明の前記液晶素子は、素子表面が局面であってもよい。

【0019】

以下、図面を用いて本発明の液晶素子の好ましい実施形態の一例を説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

【0020】

本発明の液晶素子は、電圧印加により液晶分子の配向を制御できるよう構成されればよいが、垂直電界型液晶素子として構成されることが好ましい。垂直電界型液晶素子は、基板に対して垂直に電界が生じるように電極が配置された液晶素子である。垂直電界型液晶素子においては、通常、相分離液晶層を挟持する2つの透明基板の両方に電極が設けられる。

【0021】

図1は、電圧無印加時の垂直電界型液晶素子の構成の一例を模式的に示す図である。以下、図1を参照して、本発明に係る垂直電界型の液晶素子を説明する。

【0022】

本発明に係るポリマーネットワーク垂直電界型の液晶素子の構成は、図1に記載するように、それぞれ透明導電性材料からなる透明電極(層)2を具備した第一の基板11と第二の基板12、前記第一の基板11と第二の基板12との間に挟持された相分離液晶層3を有し、該相分離液晶層中の液晶分子4の電圧無印加時の配向が基板11に対して略垂直である液晶素子である。相分離液晶層は、液晶分子4を含む液晶組成物と重合体5を含む。なお、図1では便宜上、重合体5は固定された多数の重合性化合物によって表現しているが、実際は各重合性化合物同士が複雑に繋がったポリマーネットワークを形成している。

【0023】

図2は、電圧印加時の垂直電界型素子の構成の一例を模式的に示す図である。

【0024】

電極への電圧印加により、垂直電界型液晶素子は、図1の状態から図2の状態に移る。このとき、液晶分子4が垂直電界の発生により、ホメオトロピック配向膜に対して平行方向に配向する。図2に示す垂直電界型液晶素子は、相分離液晶層における液晶分子4と重合体5との配向方向が異なるため、それぞれの成分の界面にて光散乱が起こり、垂直電界型液晶素子として光が非透過の状態となる。

【0025】

このように、本発明の垂直電界型液晶素子は電圧印加の有無により光の透過状態を変化させられるため、調光機能が求められる装置に組み込んで用いる液晶調光素子や、映像表示用ディスプレイに用いられる液晶表示素子として利用することができる。特に、本発明の垂直電界型液晶素子はリバースモードで駆動可能なため、省電力性、停電時や無電源下での透過性が求められる用途に特に好適である。

(基材：基板11及び基板12)

本発明の液晶素子に用いられる基材は、液晶表示素子、有機発光表示素子、その他表示素子、光学部品、調光素子、着色剤、マーキング、印刷物や光学フィルムに通常使用する基材であって、前記液晶素子の製造工程における加熱、及び、使用される温度範囲において耐えうる耐熱性、あるいは、透過性を重視する用途においては、実用に耐えうる透明性を有する材料であれば、特に制限はない。

そのような基材としては、ガラス基材、金属基材、セラミックス基材、プラスチック基材や紙等の有機材料が挙げられる。特に基材が有機材料の場合、セルロース誘導体、ポリオレフィン、ポリエステル、ポリオレフィン、ポリカーボネート、ポリアクリレート、ポリ

10

20

30

40

50

アリレート、ポリエーテルサルホン、ポリイミド、ポリフェニレンスルフィド、ポリフェニレンエーテル、ナイロン又はポリスチレン等が挙げられる。中でもポリエステル、ポリスチレン、ポリオレフィン、セルロース誘導体、ポリアリレート、ポリカーボネート、ポリイミド等のプラスチック基材が好ましい。

【0026】

図1の基板11及び基板12のように2枚の基板を有する場合、一方の基板が液晶素子として実用性を有する透明性を具備すればよく、他方の基板は、透明性を具備していてもいなくてもよい。

【0027】

基材の形状としては、図1の例では平板の形状を示したが、曲面を有するもののような他の形状であっても良い。また、基材は、必要に応じて、電極層、反射防止機能、反射機能を有していてもよい。

10

【0028】

本発明のポリマーネットワーク型液晶素子における密着性向上のために、これらの基材の表面処理を行っても良い。表面処理として、オゾン処理、プラズマ処理、コロナ処理、シランカップリング処理などが挙げられる。また、光の透過率や反射率を調節するために、基材表面に有機薄膜、無機酸化物薄膜や金属薄膜等を蒸着など方法によって設ける、あるいは、光学的な付加価値をつけるために、基材がピックアップレンズ、ロッドレンズ、光ディスク、位相差フィルム、光拡散フィルム、マイクロレンズシート、カラーフィルター、等であっても良い。

20

(電極：透明電極層2)

本発明の液晶素子に用いられる電極は、液晶素子中において、相分離液晶層中の液晶分子を配向制御可能な電界を生じるように設けられる。電界強度は、電極への電圧印加の程度により制御される。

【0029】

電極の形状は特に限定されず、導電部がストライプ状もしくはメッシュ状、またはランダムな網目状であってよい。

【0030】

このような電極材料としては、金属材料で構成することが好ましく、具体的には、Al、Cu、Au、Ag、Cr、Ta、Ti、Mo、W、Niまたはこれらのうちの少なくとも1種を含む合金が挙げられ、AlまたはAlを含む合金が好ましい。

30

【0031】

液晶素子の透明性を高めるためには、図1に示すように、電極を透明電極層2で構成することが好ましい。このような透明電極層は、例えばITO (Indium Tin Oxide)、IZO (Indium Zinc Oxide)、IZTO (Indium Zinc Tin Oxide)のような公知の透明導電性材料で構成することができる。また、一方の基板が透明性を有さない材料で構成される場合には、該透明性を有さない基板上に設けられる電極も透明性を有する必要はなく、公知の金属材料から適宜選択することができる。

(相分離液晶層3)

相分離液晶層3は、液晶分子4 (液晶化合物)等を含有する液晶組成物と、重合体5と、図1中に図示はしていないが自発配向剤を含む。相分離液晶層3は、重合体5によって緻密なポリマーネットワークが構成されている。このような相分離液晶層3は、液晶組成物、自発配向剤、及び重合性化合物等を含む複合組成物を用いて、重合性化合物を重合させてポリマーネットワークを形成することにより得られる。以下、複合組成物に含まれる各成分について説明する。

40

(自発配向剤)

本発明の自発配向剤は K^{i1} で表される部分構造を有する。そのため、液晶層3を挟持する基板上に配向し、液晶分子を垂直方向に配向させた状態で保持することができる。つまり、 K^{i1} で表される部分構造が極性を有するため、自発配向剤は液晶層3を挟持する基板に吸着し、液晶分子を垂直方向に配向させた状態で保持すると考えられる。したがっ

50

て、本実施形態の液晶素子によれば、PI層を設けなくとも液晶分子を垂直に配向させることが可能となる。このように、 K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤は、液晶分子の垂直配向を助けるために好適に使用される。

【0032】

K^{i1} は、炭素原子数3～40の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも2個以上の第二級炭素原子は $-C(=X^{i1})-$ 及び/又は $-(CH-CN)-$ で置換されており、また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-C(=CH_2)-$ 、 $-C(=CHR^{i3})-$ 、 $-C(=CR^{i3}_2)-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C=C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、また、これらのアルキル基中の水素原子は $P^{i1}-Sp^{i1}$ で置換されてもよく、 X^{i1} は、酸素原子、硫黄原子、NH又は NR^{i3} を表し、 R^{i3} は炭素原子数1～20の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH=CH-$ 又は $-C=C-$ で置換されてもよく、また、少なくとも1つ以上の $P^{i2}-Sp^{i3}$ を有してもよい。

10

【0033】

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

20

30

【0034】

また、 K^{i1} 中の水素原子は重合性基、すなわち $P^{i2}-Sp^{i2}$ で置換されていることが好ましい。 K^{i1} 中に極性基と重合性基が存在していることで、より良好な配向性が得られる。

40

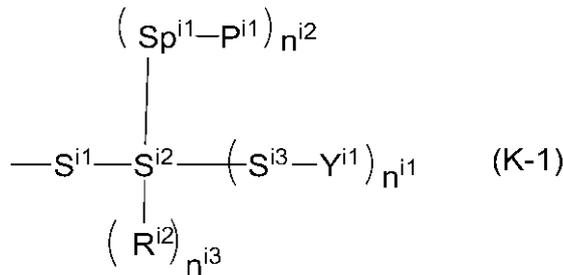
【0035】

K^{i1} は、一般式(K-1)を表すことが好ましい。

【0036】

50

【化 1】



10

【0037】

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

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

20

S^{i2} は炭素原子、窒素原子又はケイ素原子を表し、

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

P^{i1} は重合性基を表し、

Sp^{i1} はスペーサー基又は単結合を表し、

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

30

一般式 (K - 1) 中の S^{i1} 及び S^{i3} は好ましくは、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖又は分岐のアルキレン基又は単結合であり、該アルキレン基中の - $\text{CH}_2 -$ は酸素原子が直接隣接しないように - $\text{CH} = \text{CH} -$ 、 - ($\text{C} = \text{CH}_2$) -、 - $\text{O} -$ 、 - ($\text{C} = \text{O}$) -、 - $\text{COO} -$ 又は - $\text{OCO} -$ で置換されてもよく、より好ましくは、単結合、炭素原子数 1 ~ 6 の直鎖状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の - $\text{CH}_2 -$ は酸素原子が直接隣接しないように - $\text{O} -$ で置換された基であることが好ましい。 S^{i1} 及び S^{i3} は、具体的には - (CH_2) n -、 - $\text{O} - (\text{CH}_2) n -$ 、 - (CH_2) $n - \text{O} -$ 、 - (CH_2) $n - \text{O} - (\text{CH}_2) m -$ 、 - $\text{COO} - (\text{CH}_2) n -$ 、 - $\text{OCO} - (\text{CH}_2) n -$ を表すことが好ましい (n 及び m は、1 ~ 6 の整数を表す。)

40

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

50

原子数 1 ~ 3 の直鎖アルキル基が好ましい。

【 0 0 3 8 】

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

10

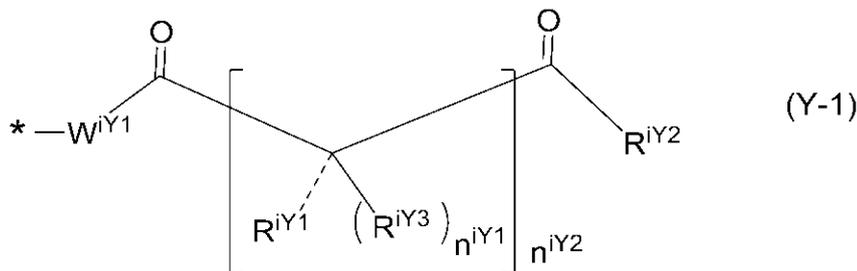
【 0 0 3 9 】

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

20

【 0 0 4 0 】

【 化 2 】



30

【 0 0 4 1 】

(式中、 W^{iY1} は単結合又は酸素原子を表し、破線は単結合又は二重結合を表し、 R^{iY1} は、破線が単結合を表す場合、水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基又は $P^{i1} - Sp^{i1}$ を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH = CH-$ 、 $-C - C-$ 又は $-CO-$ で置換されてもよく、破線が二重結合を表す場合、 $=CH_2$ 、 $=CHR^{iY4}$ 、又は $=CR^{iY4}_2$ を表し、 R^{iY4} は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH = CH-$ 又は $-C - C-$ で置換されてもよく、 R^{iY3} は、破線が単結合を表す場合の R^{iY1} と同じ意味を表し、 R^{iY2} は水素原子、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-CH = CH-$ 、 $-C - C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-C(=O)-$ 又は $-CH_2(-CN)-$ で置換されてもよく、また、 R^{iY2} は $P^{i1} - Sp^{i1}$ を表し、 n^{iY1} は破線が二重結合を表す場合 0 であり、破線が単結合を表す場合 1 であり、 n^{iY2} は 0 ~ 5 の整数を表し、 P^{i1} は重合性基を表し、 Sp^{i1} はスペーサー基又は単結合を表し、 R^{iY1} 、 R^{iY3} 、 R^{iY4} 、 P^{i1} 及び Sp^{i1} が複数存在する場合、それらは同一であっても異なってもよく、*で Si^3 と結合する。)

40

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

50

原子又は炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましく、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O -、- CH = CH - 又は - C C - で置換されてもよい。具体的には、水素原子を表すことが好ましく、また、耐熱性向上の観点から、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 3 のアルコキシ基、- CO - CH₃、- CH₂ - O - CH₃ を表すことが好ましい。また、R^{iY1} は耐熱性向上の観点から Pⁱ¹ - Spⁱ¹ - を表すことも好ましい。R^{iY1} が Pⁱ¹ - Spⁱ¹ - を表す場合、一般式 (i) で表される化合物が熱により分解してしまうことにより生じる分解物が重合されることから、不純物の増加を防ぐことができ、液晶組成物への悪影響が少なくなると考えられる。Pⁱ¹ は重合性基を表し、アクリロイル基、メタクリロイル基、又は後述する一般式 (P - 1) ~ (P - 15) で表される群より選ばれる置換基を表すことが好ましい。Spⁱ¹ は好ましくは炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表し、より好ましくは炭素原子数 2 ~ 15 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表し、更に好ましくは炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖状アルキレン基又は単結合を表す。

10

【0042】

また、破線が二重結合を表す場合、= CH₂、= CHR^{iY4}、又は = CR^{iY4}₂ を表し、= CH₂ を表すことが好ましい。R^{iY4} は炭素原子数 1 ~ 10 の直鎖又は分岐のアルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 7 のアルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましく、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O -、- CH = CH - 又は - C C - で置換されてもよい。

【0043】

R^{iY3} の好ましい基は、破線が単結合を表す場合の R^{iY1} の好ましい基と同じである。n^{iY1} は 0 が好ましい。

20

【0044】

R^{iY1} 及び R^{iY3} の好ましい組み合わせとして、共に水素原子、共に炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基、共に炭素原子数 1 ~ 3 のアルコキシ基、共に - CH₂ - O - CH₃ 等があげられる。R^{iY1} 及び R^{iY3} のいずれか一方が Pⁱ¹ - Spⁱ¹ - 又は - CO - CH₃ を表す場合、他方は水素原子を表すことが好ましい。n^{iY2} は 0 ~ 3 の整数が好ましく、0、1 又は 2 がより好ましく、0 又は 1 がより好ましい。

【0045】

R^{iY2} は、水素原子又は炭素原子数 1 ~ 10 のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 7 のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基が好ましく、炭素原子数 1 ~ 3 のアルキル基が好ましい。また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように - O -、- (C = Xⁱ²) - 又は - (CH₂ - CN) - で置換されていることが好ましい。Xⁱ² はVHR向上の観点から酸素原子が好ましい。また、R^{iY2} は、Pⁱ¹ - Spⁱ¹ - を表すことが好ましい。R^{iY2} が Pⁱ¹ - Spⁱ¹ - を表す場合、一般式 (i) で表される化合物が熱により分解してしまうことにより生じる分解物が重合されることから、不純物の増加を防ぐことができ、液晶組成物への悪影響が少なくなると考えられる。

30

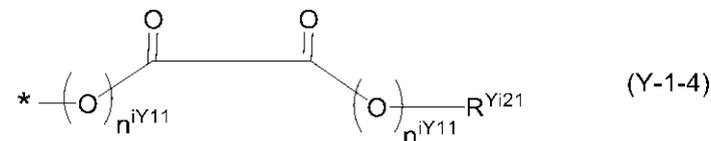
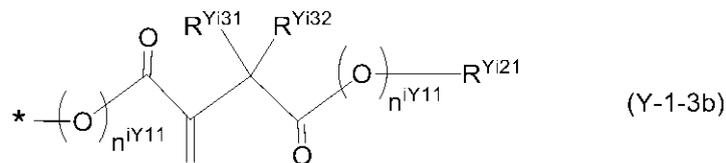
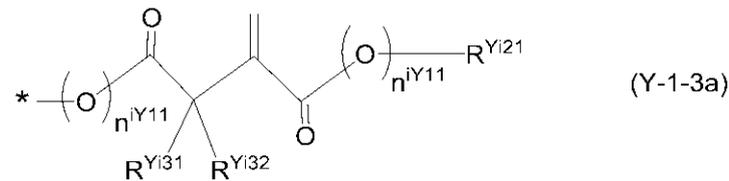
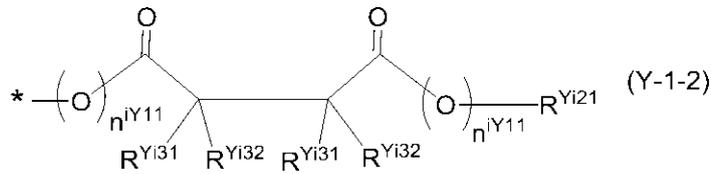
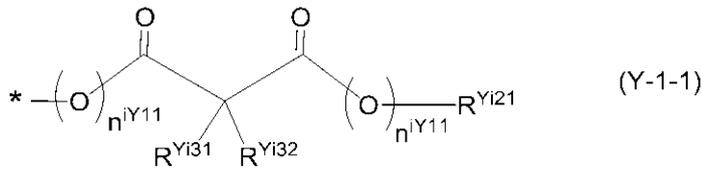
【0046】

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

40

【0047】

【化 3】



10

20

【0048】

(式中、 n^{iY11} は0又は1を表し、 R^{iY21} は炭素原子数1~10のアルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -CH=CH-、-C-C-、-O-、-NH-、-COO-、-OCO-、-(C=O)-又は-(CH₂-CN)-で置換されてもよく、また、 R^{iY21} はPi¹-Sp¹-を表し、 R^{iY31} 及び R^{iY32} はそれぞれ独立して水素原子、炭素原子数1~10の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように -O-、-CH=CH-、-C-C-又は-CO-で置換されてもよく、また、 R^{iY31} 及び R^{iY32} はPi¹-Sp¹-を表す。)

30

R^{iY21} は、炭素原子数1~7のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基が好ましく、炭素原子数1~3のアルキル基が好ましい。また、 R^{iY21} は、Pi¹-Sp¹-を表すことが好ましい。 R^{iY31} 及び R^{iY32} は水素原子、炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数1~5のアルコキシ基が好ましく、水素原子又、炭素原子数1~3のアルキル基、炭素原子数1~3のアルコキシ基、-CO-CH₃、-CH₂-O-CH₃を表すことが好ましい。また、 R^{iY31} 及び R^{iY32} の少なくともいずれか一方は、Pi¹-Sp¹-を表すことが好ましい。

40

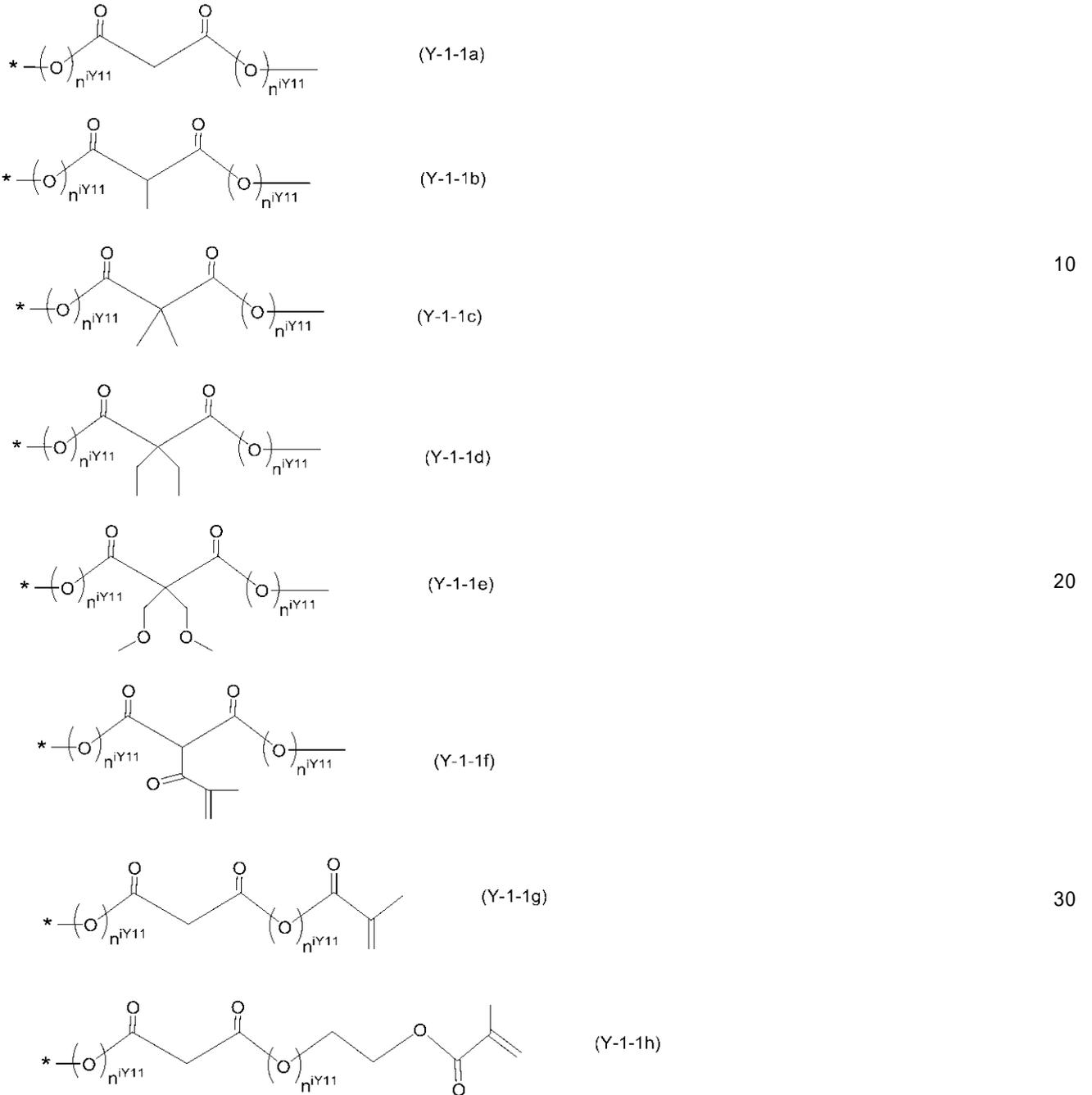
【0049】

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

【0050】

50

【化 4】



【 0 0 5 1】

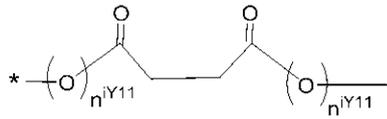
(式中、 n^{iY11} は 0 又は 1 を表す。)

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

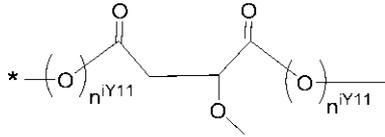
【 0 0 5 2】

40

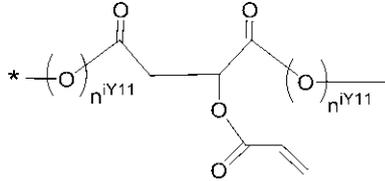
【化5】



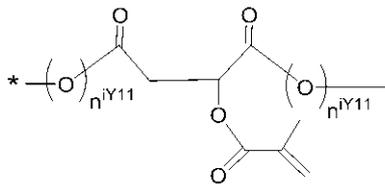
(Y-1-2a)



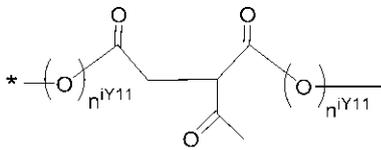
(Y-1-2b)



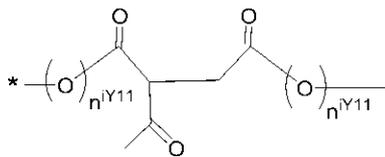
(Y-1-2c)



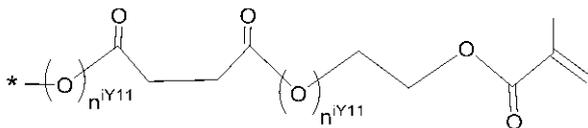
(Y-1-2d)



(Y-1-2e)



(Y-1-2f)



(Y-1-2g)

【0053】

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

【0054】

10

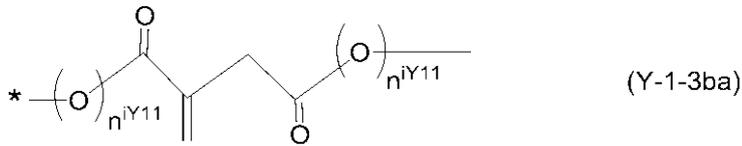
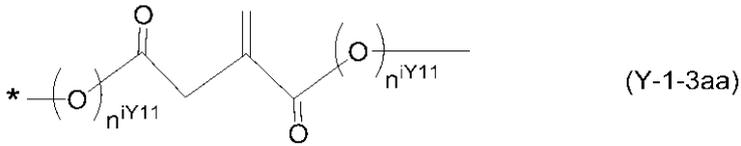
20

30

40

50

【化6】



10

【0055】

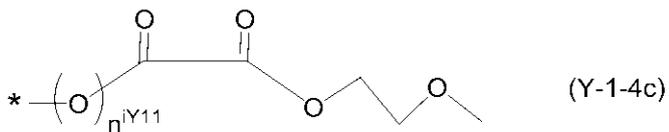
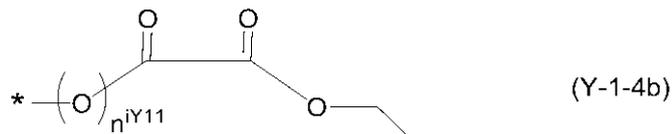
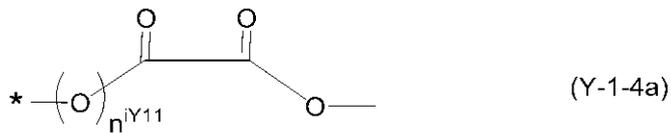
(式中、 n^{iY11} は0又は1を表す。)

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

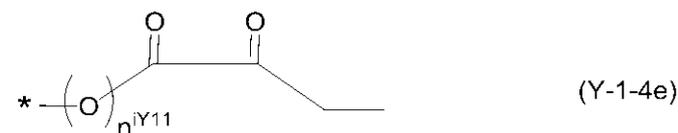
【0056】

【化7】

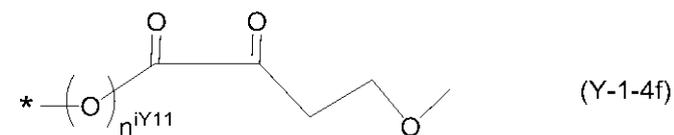
20



30



40



【0057】

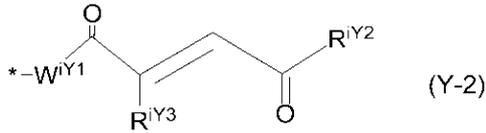
(式中、 n^{iY11} は0又は1を表す。)

また、 Y^{i1} は、一般式(Y-2)から選ばれる基を表すことが、好ましい。

【0058】

50

【化 8】



【0059】

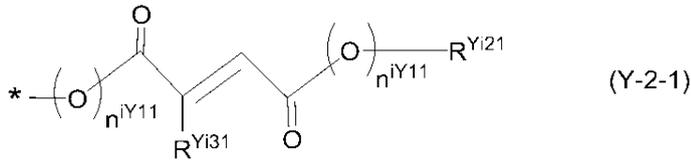
(式中、 W^{iY1} 、 R^{iY3} 及び R^{iY2} は一般式(Y-1)中の W^{iY1} 、 R^{iY3} 及び R^{iY2} と同じ意味を表す。)

一般式(Y-2)は、一般式(Y-2-1)を表すことが好ましい。

10

【0060】

【化 9】



【0061】

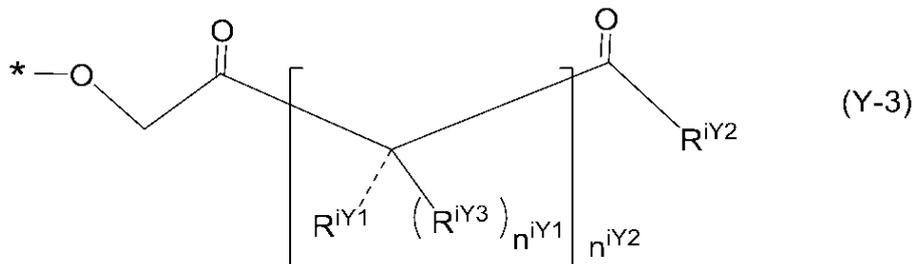
(式中、 n^{iY11} 、 R^{iY21} 及び R^{iY31} は一般式(Y-1-1)中の n^{iY11} 、 R^{iY21} 及び R^{iY31} と同じ意味を表す。)

20

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

【0062】

【化 10】



30

【0063】

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

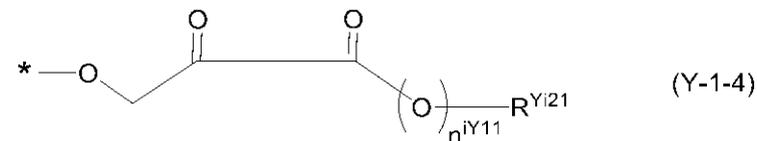
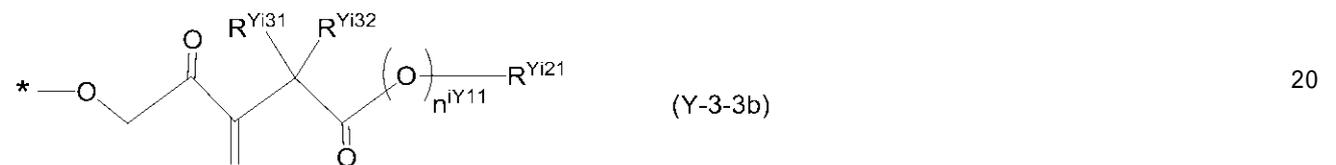
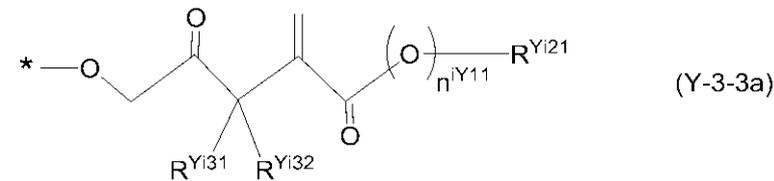
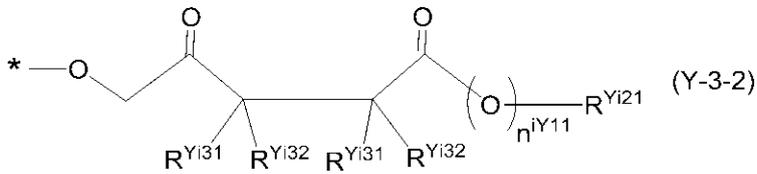
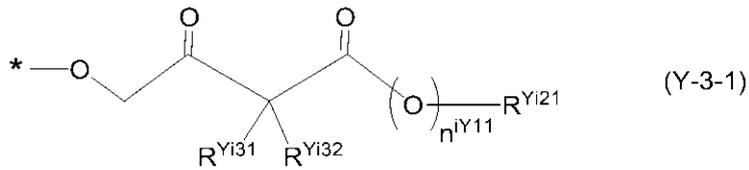
一般式(Y-3)は、一般式(Y-3-1)～一般式(Y-3-4)を表すことが好ましい。

【0064】

40

50

【化 1 1】



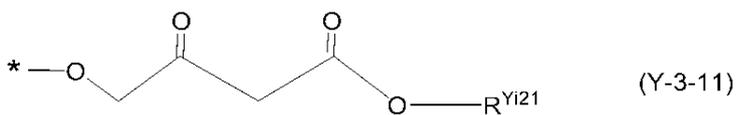
【0065】

(式中、 $R^{\text{Yi}21}$ 、 $R^{\text{Yi}31}$ 、 $R^{\text{Yi}32}$ 及び $n^{\text{Yi}11}$ は一般式(Y-1-1)中の $R^{\text{Yi}21}$ 、 $R^{\text{Yi}31}$ 、 $R^{\text{Yi}32}$ 及び $n^{\text{Yi}11}$ とそれぞれ同じ意味を表す。)

より具体的には、一般式(Y-3-1)は一般式(Y-3-11)が好ましい。

【0066】

【化 1 2】



【0067】

(式中、 $R^{\text{Yi}21}$ は一般式(Y-3-1)中の $R^{\text{Yi}21}$ と同じ意味を表す。)

また、 $Y^{\text{Yi}1}$ は、一般式(Y-4)から選ばれる基を表すことが、耐熱性向上の観点から好ましい。

【0068】

10

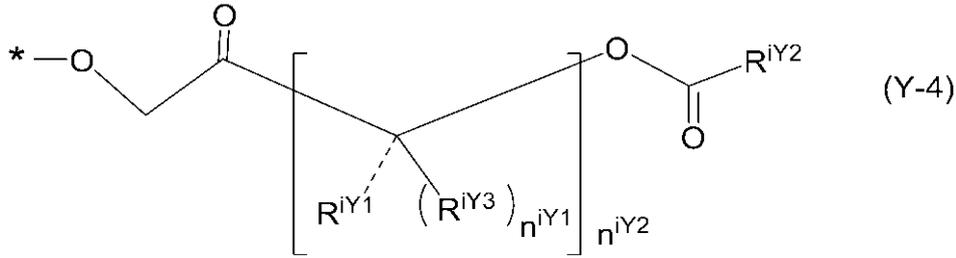
20

30

40

50

【化13】



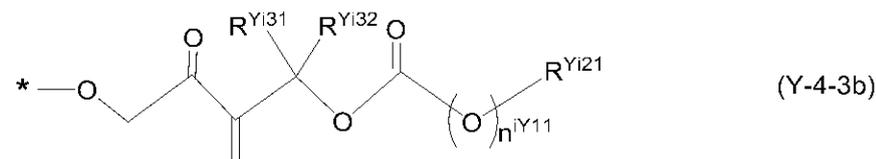
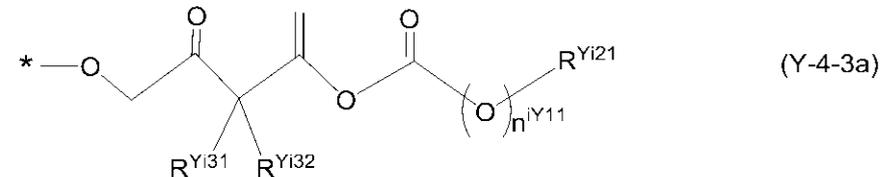
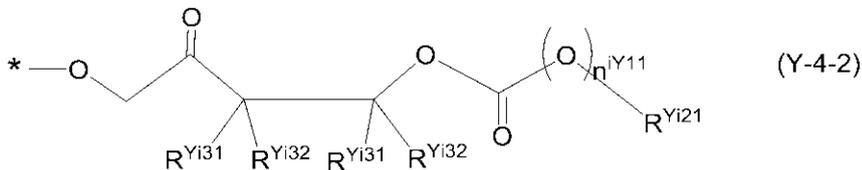
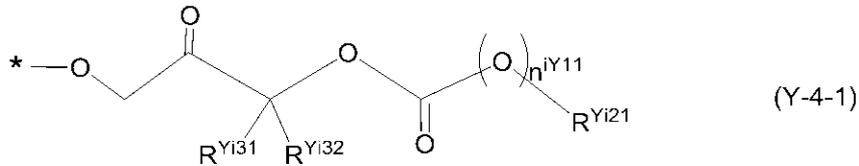
【0069】

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

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

【0070】

【化14】



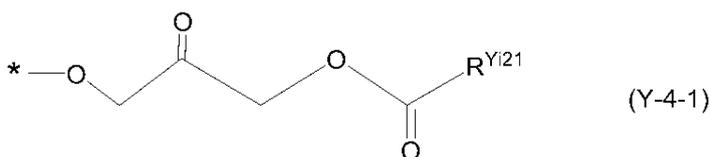
【0071】

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

より具体的には、一般式(Y-4-1)は一般式(Y-4-11)が好ましい。

【0072】

【化15】



【0073】

10

20

30

40

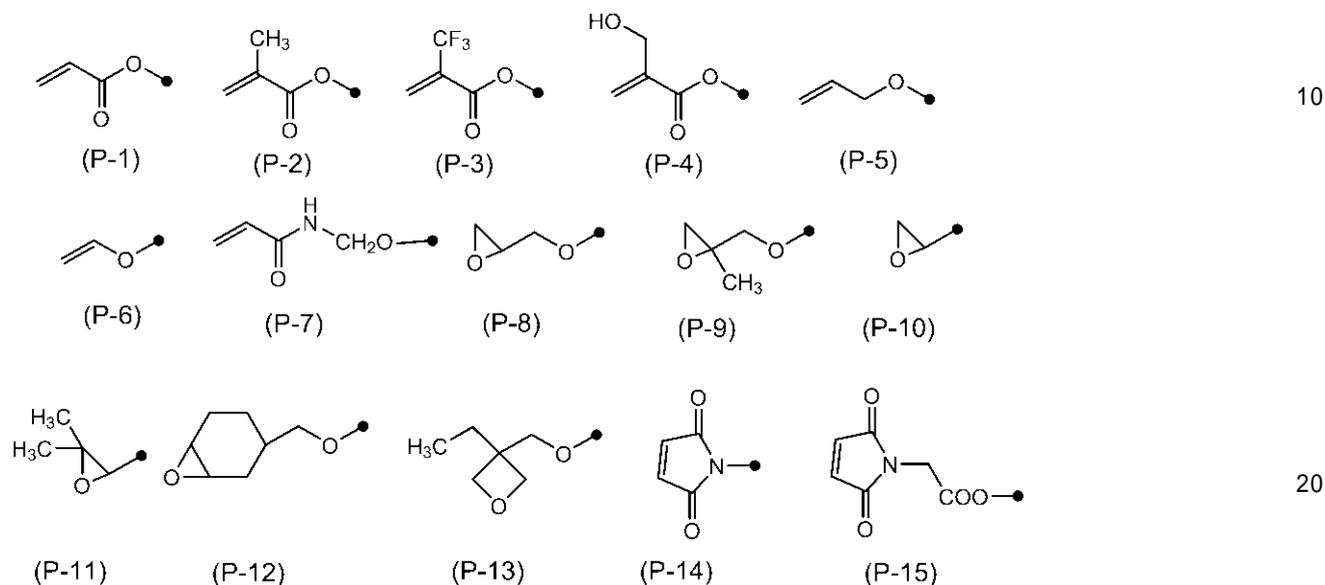
50

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

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

【0074】

【化16】



【0075】

(式中、右端の黒点は結合手を表す。)

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

【0076】

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

【0077】

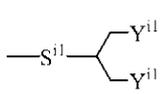
一般式(K-1)の好ましい例としては以下の式(K-1A-1)~(K-1A-4)及び式(K-1B-1)~(K-1B-6)が挙げられるが、液晶組成物への溶解性の点から、式(K-1A-1)~(K-1A-3)が好ましく、配向性の点からは、式(K-1B-2)~(K-1B-4)が好ましく、特に好ましくは式(K-1A-1)、(K-1B-2)及び(K-1B-4)が挙げられる。

【0078】

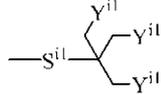
40

50

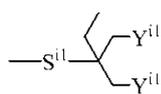
【化 1 7】



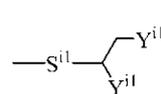
(K-1A-1)



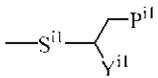
(K-1A-2)



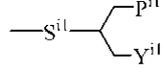
(K-1A-3)



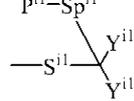
(K-1A-4)



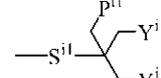
(K-1B-1)



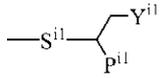
(K-1B-2)



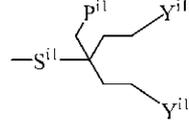
(K-1B-3)



(K-1B-4)



(K-1B-5)



(K-1B-6)

【 0 0 7 9】

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

また、一般式(K-1)は、一般式(K-1-1)、(K-1-2)、(K-1-3a)、(K-1-3b)、(K-1-4a)、(K-1-4b)(K-1-Y2)、(K-1-Y3)及び(K-1-Y4)から選ばれる基を表すことが好ましい。

【 0 0 8 0】

10

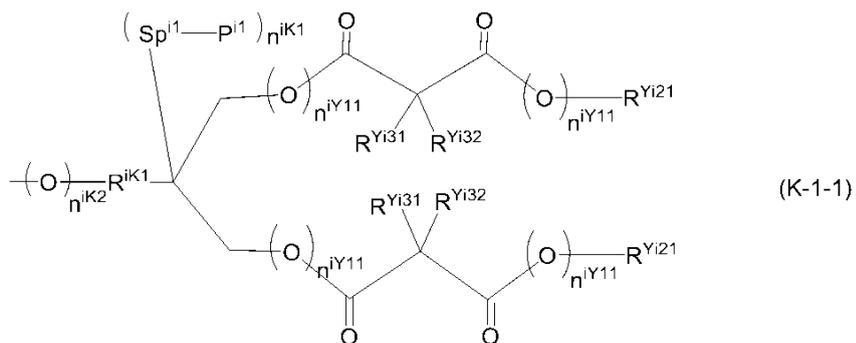
20

30

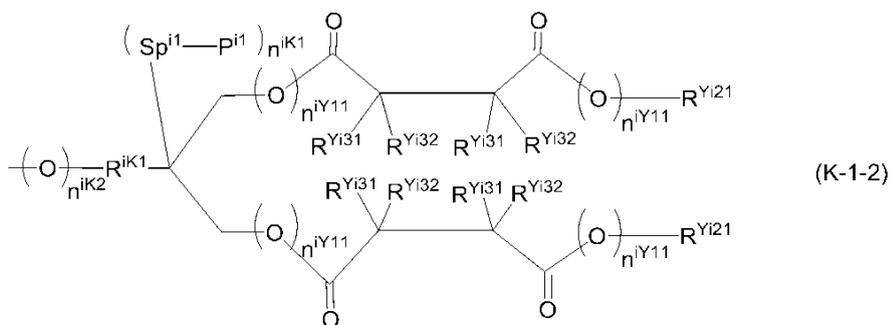
40

50

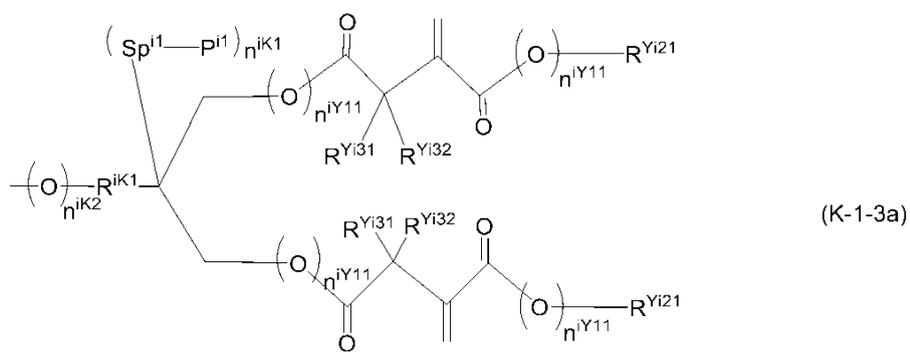
【化 1 8】



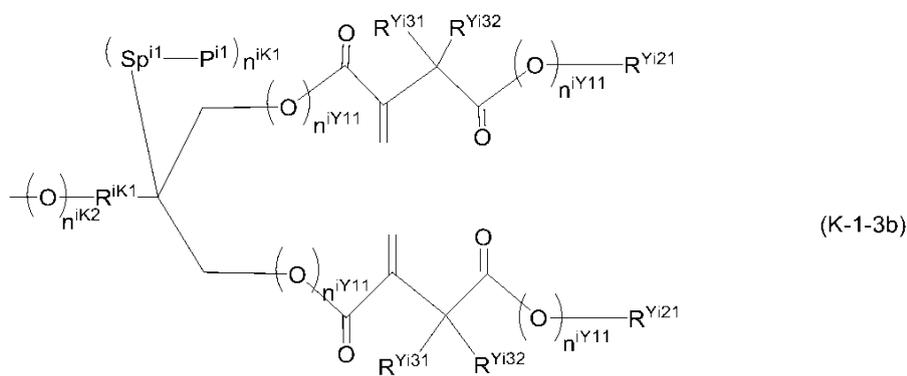
10



20



30

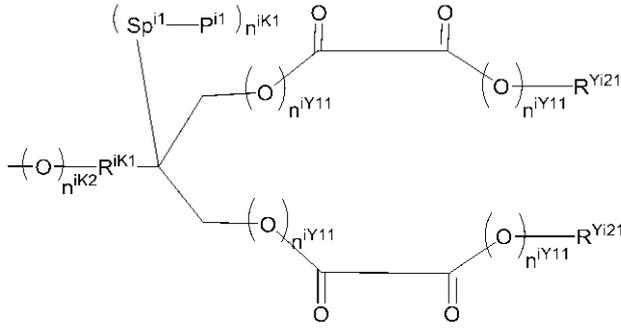


40

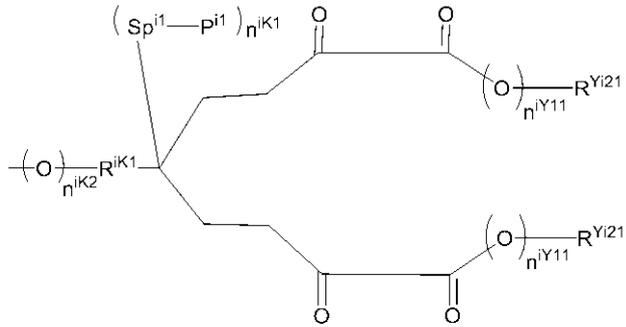
【 0 0 8 1】

50

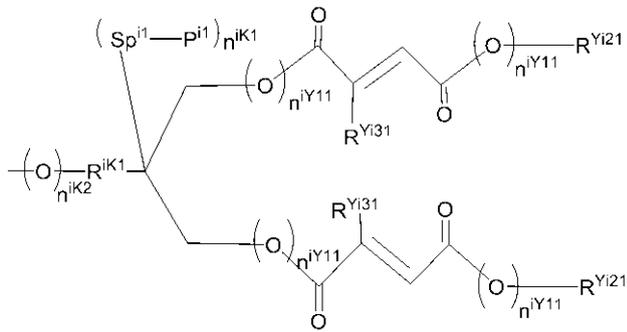
【化 1 9】



10



20



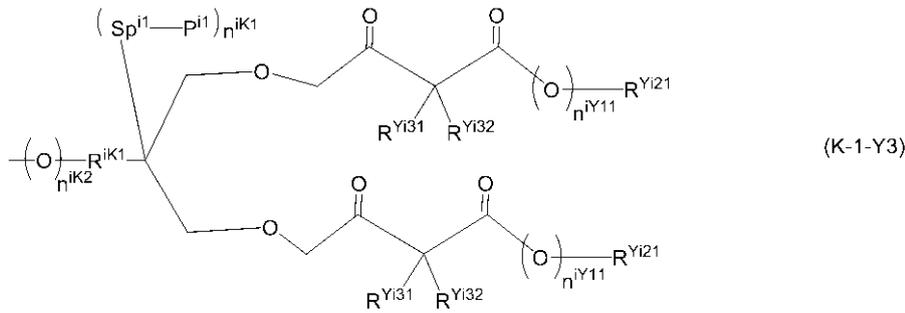
30

【 0 0 8 2 】

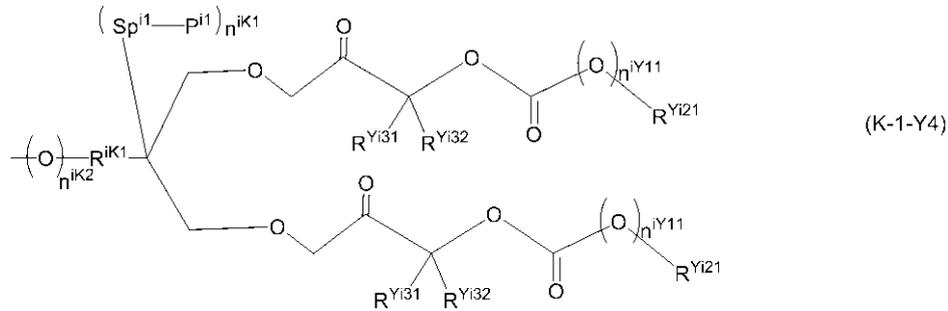
40

50

【化 2 0】



10



20

【 0 0 8 3】

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

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

30

【 0 0 8 4】

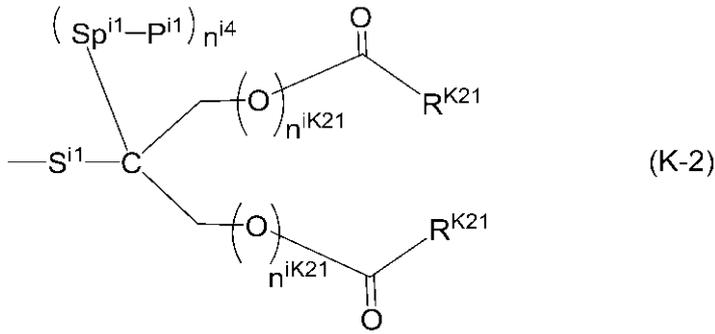
また、 K^{i1} は、一般式(K-2)~(K-5)を表すことが好ましい。

【 0 0 8 5】

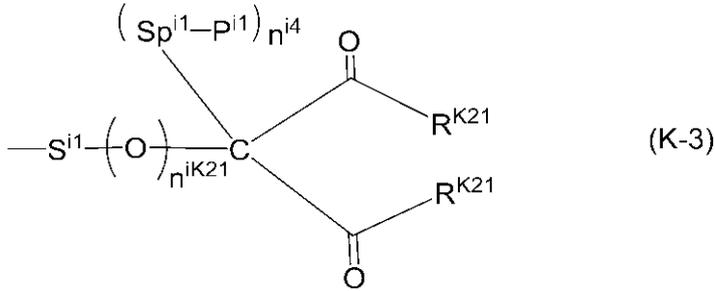
40

50

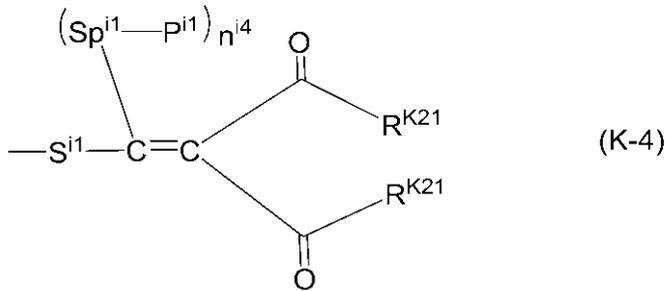
【化 2 1】



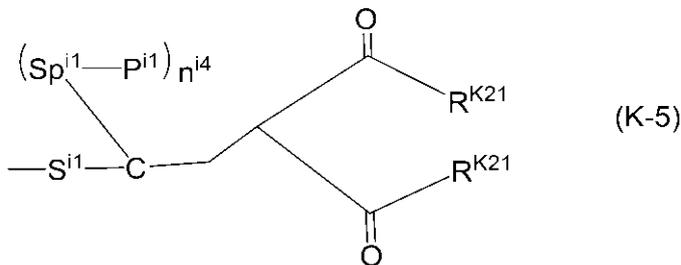
10



20



30



【 0 0 8 6 】

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

40

R^{K21} は炭素原子数1~5の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表すことが好ましく、炭素原子数1~3の直鎖アルキル基又はシアノ化アルキル基を表すことがより好ましい。また、これらのアルキル基中の少なくとも1個以上の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ で置換されていることが好ましい。 R^{K21} は具体的には、炭素原子数1~3のアルキル基、炭素原子数1~3のアルコキシ基、炭素原子数1~3のシアノ化アルキル基が好ましい。

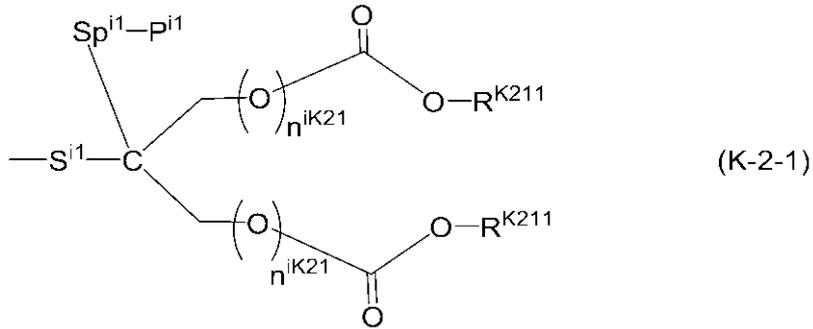
【 0 0 8 7 】

50

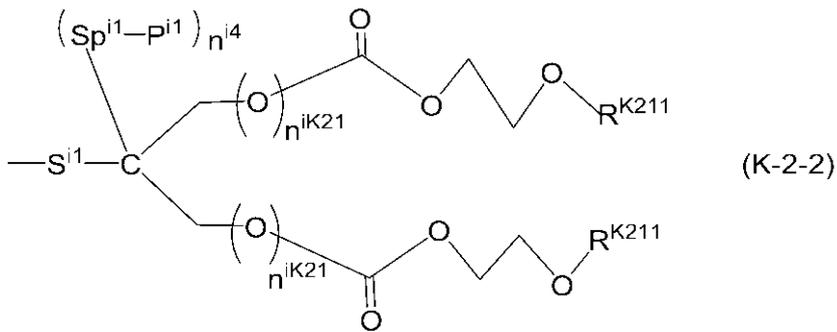
一般式 (K - 2) は、以下の一般式 (K - 2 - 1) ~ (K - 2 - 3) を表すことが好ましい。

【 0 0 8 8 】

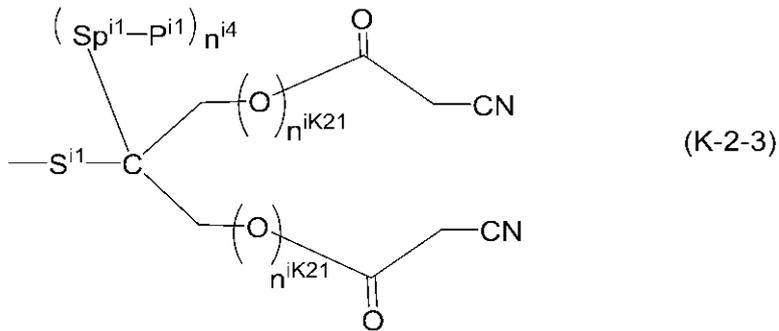
【 化 2 2 】



10



20



30

【 0 0 8 9 】

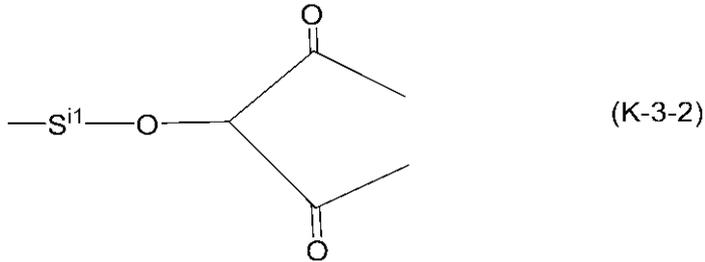
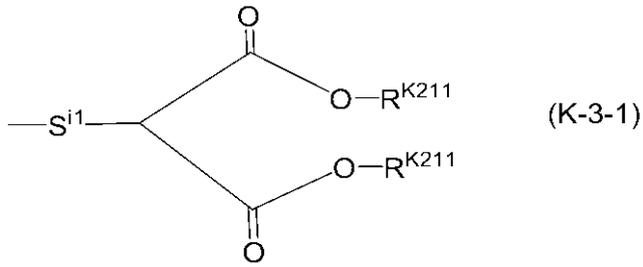
(式中、 S^{i1} 、 P^{i1} 、 $S^{p^{i1}}$ 、 n^{i4} 及び n^{iK21} は一般式 (K - 2) 中の S^{i1} 、 P^{i1} 、 $S^{p^{i1}}$ 、 n^{i4} 及び n^{iK21} とそれぞれ同じ意味を表し、 R^{K211} は炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。)

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

【 0 0 9 0 】

40

【化23】



10

【0091】

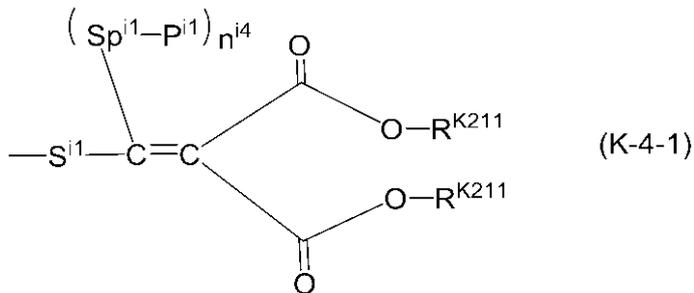
(式中、 S^{i1} は一般式 (K-3) 中の S^{i1} と同じ意味を表し、 R^{K211} は炭素原子数 1~3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。)

20

一般式 (K-4) は、以下の一般式 (K-4-1) を表すことが好ましい。

【0092】

【化24】



30

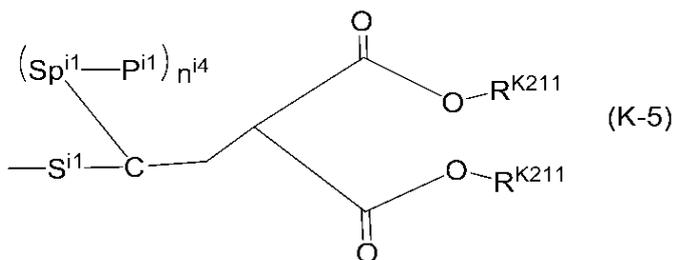
【0093】

(式中、 S^{i1} 、 P^{i1} 、 $S p^{i1}$ 及び n^{i4} は一般式 (K-4) 中の S^{i1} 、 P^{i1} 、 $S p^{i1}$ 及び n^{iK211} とそれぞれ同じ意味を表し、 R^{K211} は炭素原子数 1~3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。)

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

【0094】

【化25】



40

【0095】

(式中、 S^{i1} 、 P^{i1} 、 $S p^{i1}$ 及び n^{i4} は一般式 (K-4) 中の S^{i1} 、 P^{i1} 、 $S p^{i1}$

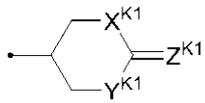
50

i^1 及び n^{iK21} とそれぞれ同じ意味を表し、 R^{K211} は炭素原子数 1 ~ 3 の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基又はシアノ化アルキル基を表す。)

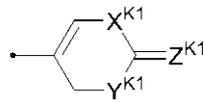
K^{i1} は、上記構造以外に、以下の一般式 (T-8) から (T-17) を表す。

【0096】

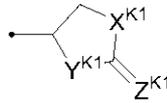
【化26】



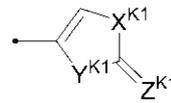
(T-8)



(T-9)

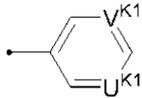


(T-10)

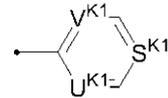


(T-11)

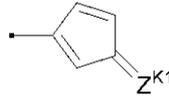
10



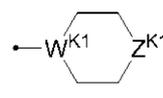
(T-12)



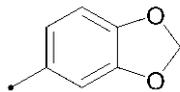
(T-13)



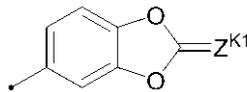
(T-14)



(T-15)



(T-16)



(T-17)

20

【0097】

(式中、黒点は結合手を表す。) で表される基を表し、

X^{K1} 及び Y^{K1} は、それぞれ独立して -CH₂-、酸素原子又は硫黄原子を表し、

Z^{K1} は、それぞれ独立して酸素原子又は硫黄原子を表し、

W^{K1} 、 U^{K1} 、 V^{K1} 及び S^{K1} は、それぞれ独立して、メチン基又は窒素原子を表し、

ここで一般式 (T-8) から (T-17) で表される基中の水素原子は -Spⁱ¹-Pⁱ³ で置換されていてもよく、

Pⁱ¹ は重合性基を表し、

Spⁱ¹ はスペーサー基又は単結合を表し、

Pⁱ¹、Spⁱ¹、Xⁱ¹、Rⁱ³ が複数存在する場合、それらは同一であっても異なっても良い。

【0098】

一般式 (T-8) から (T-17) の好ましい例としては、以下の (T-1-1) から (T-17-1) が挙げられる。中でも、配向性や反応性の点から、式 (T-1-1)、(T-1-3)、(T-1-5)、(T-3-1)、(T-11-1)、(T-12-1)、(T-13-1)、(T-15-1) 及び (T-18-1) が好ましく、特に好ましくは式 (T-1-1)、(T-1-5)、(T-3-1)、(T-11-1)、及び (T-13-1) が挙げられる。

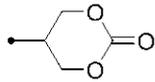
【0099】

30

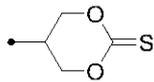
40

50

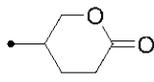
【化27】



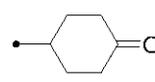
(T-1-1)



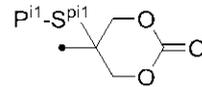
(T-1-2)



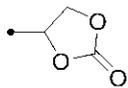
(T-1-3)



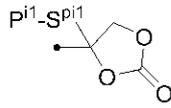
(T-1-4)



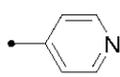
(T-1-5)



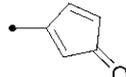
(T-3-1)



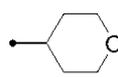
(T-3-3)



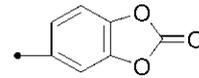
(T-13-1)



(T-14-1)



(T-15-1)



(T-17-1)

【0100】

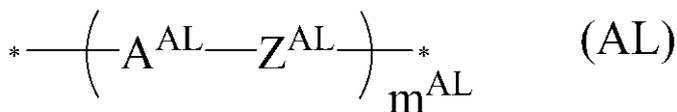
なお、上記した S^{i1} 、 P^{i1} 及び S^{pi1} の好ましい基は、一般式(K-1)中の S^{i1} 、 P^{i1} 及び S^{pi1} と同様である。

【0101】

本発明の自発配向剤は、配向性の観点から、分子の末端、好ましくは分子の主鎖の末端に、 K^{i1} で表される部分構造を有していることが好ましい。 K^{i1} で表される部分構造結合先の化学構造は、液晶組成物の機能を阻害しない範囲であれば特に制限されないが、配向性及び液晶組成物との相溶性の観点からメソゲン基を有していることが好ましい。メソゲン基は、例えば、一般式(AL)で表されることが好ましい。

【0102】

【化28】



【0103】

(上記式中、 Z^{AL} は、単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C=C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH_2-CH_2COO-$ 、 $-OCOCH_2-CH_2-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)-CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、又は炭素原子数2~20のアルキレン基を表し、このアルキレン基中の1個又は隣接しない2個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、 A^{AL} は、2価の環式基を表し、これらの環構造中の水素原子はハロゲン原子、重合性基($Pa^{al}-Sp^{al}-$)または1価の有機基で置換されていてもよく、 Z^{AL} 及び A^{AL} がそれぞれ複数存在する場合は、それぞれ互いに同一であっても異なってもよく、 m^{AL} は、1~5の整数を表し、上記式中の左端の黒点および右端の黒点は結合手を表す。)

上記一般式(AL)中、 Z^{AL} は、単結合または炭素原子数2~20のアルキレン基が好ましく、単結合または炭素原子数2~10のアルキレン基がより好ましい。上記アルキ

10

20

30

40

50

レン基中の1個又は隣接しない2個以上の -CH₂- は -O-、-COO- 又は -OCO- で置換されてもよい。さらに、棒状分子の直線性を目的とする場合は、環と環とを結ぶ原子の数は偶数個が好ましいため、当該連結基 ZAL の原子数は偶数個が好ましい。

【0104】

上記一般式 (AL) 中、環式基は、非置換または置換された、1,4-フェニレン基、1,4-シクロヘキシレン基、1,4-シクロヘキセニル基、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル基、1,3-ジオキサン-2,5-ジイル基、テトラヒドロチオピラン-2,5-ジイル基、チオフェン-2,5-ジイル基、1,4-ビスクロ(2,2,2)オクチレン基、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基、ピリジン-2,5-ジイル基、ピリミジン-2,5-ジイル基、ピラジン-2,5-ジイル基、チオフェン-2,5-ジイル基、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基、2,6-ナフチレン基、フェナントレン-2,7-ジイル基、9,10-ジヒドロフェナントレン-2,7-ジイル基、1,2,3,4,4a,9,10a-オクタヒドロフェナントレン-2,7-ジイル基、1,4-ナフチレン基、ベンゾ[1,2-b:4,5-b']ジチオフェン-2,6-ジイル基、ベンゾ[1,2-b:4,5-b']ジセレノフェン-2,6-ジイル基、[1]ベンゾチエノ[3,2-b]チオフェン-2,7-ジイル基、[1]ベンゾセレノフェノ[3,2-b]セレノフェン-2,7-ジイル基及びフルオレン-2,7-ジイル基からなる群から選択される1種の構造を表すことが好ましく、非置換または置換された、1,4-フェニレン基、1,4-シクロヘキシレン基、2,6-ナフチレン基またはフェナントレン-2,7-ジイル基がより好ましく、非置換または置換された、1,4-フェニレン基または1,4-シクロヘキシレン基が好ましい。また、環式基の水素原子はハロゲン原子、重合性基 (Pal-Spal-) または1価の有機基で置換されてもよい。

【0105】

上記一般式 (AL) 中、一価の有機基とは、有機化合物が1価の基の形態になることによって、化学構造が構成された基であり、有機化合物から水素原子を1つ取り除いてなる原子団をいい、例えば、炭素原子数1~15のアルキル基、炭素原子数2~15のアルケニル基、炭素原子数1~14のアルコキシ基、炭素原子数2~15のアルケニルオキシ基などが挙げられ、炭素原子数1~15のアルキル基または炭素原子数1~14のアルコキシ基が好ましい。また、上記アルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、アルケニルオキシ基中の1個又は隣接しない2個以上の -CH₂- は -O-、-COO- 又は -OCO- で置換されてもよい。さらには、上記一価の有機基は、後述の配向誘導基としての役割を有しても良い。

【0106】

上記一般式 (AL) 中、mAL は、2~4の整数であることが好ましい。

【0107】

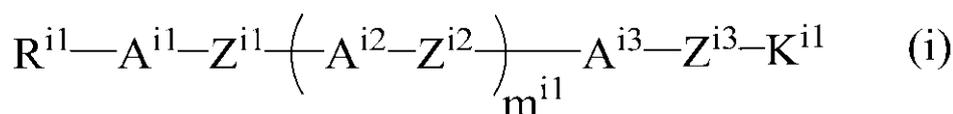
本発明の自発配向剤は、化合物中に重合性基を有していてもよい。重合性基を有する場合は、該重合性基を有する自発配向剤が重合することにより、基板表面に重合性化合物から形成された重合体が偏在し、配向性がより向上すると考えられる。重合性基を有さない場合は、Kⁱ¹部分が基板表面に吸着した状態で、液晶組成物中に相溶して存在する。

【0108】

本発明の垂直配向剤は、一般式 (i) で表される化合物であることがより好ましい。

【0109】

【化29】



【0110】

(式中、Kⁱ¹は炭素原子数3~40の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル

10

20

30

40

50

基又はシアノ化アルキル基を表し、これらのアルキル基中の少なくとも2個以上の第二級炭素原子は $-C(=X^{i1})-$ 及び/又は $-CH(-CN)-$ で置換されており、また、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-C(=CH_2)-$ 、 $-C(=CHR^{i3})-$ 、 $-C(=CR^{i3}_2)-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、また、これらのアルキル基中の水素原子は $P^{i1}-Sp^{i1}-$ で置換されてもよく、 X^{i1} は、酸素原子、硫黄原子、 NH 又は NR^{i3} を表し、 R^{i3} は炭素原子数1~20の直鎖又は分岐のアルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH=CH-$ 又は $-C-C-$ で置換されてもよく、

R^{i1} は炭素原子数1~40の直鎖又は分岐のアルキル基又はハロゲン化アルキル基を表し、これらの基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-O-$ 、 $-CH=CH-$ 又は $-C-C-$ で置換されてもよく、

A^{i1} 、 A^{i2} 及び A^{i3} はそれぞれ独立して2価の芳香族基、2価の環式脂肪族基、又は2価の複素環式化合物基を表し、 A^{i1} 中の水素原子は L^{i1} で置換されてもよく、 A^{i2} 及び A^{i3} 中の水素原子は L^{i1} 、 $P^{i1}-Sp^{i1}-$ 又は K^{i1} で置換されてもよく、

L^{i1} はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素原子数1~40の直鎖又は分岐のアルキル基、ハロゲン化アルキル基を表し、該アルキル基中の第二級炭素原子は酸素原子が直接隣接しないように $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、

P^{i1} は重合性基を表し、

Sp^{i1} はスペーサー基又は単結合を表し、

Z^{i1} 、 Z^{i2} 及び Z^{i3} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 又は炭素原子数2~20のアルキレン基を表し、このアルキレン基中の1個又は隣接しない2個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ で置換されてもよく、

m^{i1} は、0~3の整数を表し、一般式(i)中に R^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i2} 、 L^{i1} 、 K^{i1} 、 X^{i1} 、 P^{i1} 及び Sp^{i1} が複数存在する場合、それらは同一であっても異なっても良い。))

一般式(i)中の K^{i1} の好ましい基は、上記したとおりである。

【0111】

式(i)中、 Z^{i1} 、 Z^{i2} 及び Z^{i3} は、好ましくは、単結合、 $-CH=CH-$ 、 $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、炭素原子数1~40の直鎖状又は分岐状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の1個又は隣接しない2個以上の $-CH_2-$ が $-O-$ で置換された基を表し、より好ましくは、単結合、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH=CHCOO-$ 、 $-OCOCH=CH-$ 、 $-CH=C(CH_3)COO-$ 、 $-OCOC(CH_3)=CH-$ 、 $-CH_2-CH(CH_3)COO-$ 、 $-OCOCH(CH_3)CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、炭素原子数1~10の直鎖状又は分岐状のアルキレン基、又は該アルキレン基中の1個又は隣接しない2個以上の $-CH_2-$ が $-O-$ で置換された基を表し、更に好ましくは、単結合、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-OOCO-$ 、 $-OCH_2CH_2O-$ 、又は炭素原子数2のアルキレン基(エチレン基($-CH_2CH_2-$))若しくはエチレン基中の $-CH_2-$ の1個が $-O-$ で置換された基($-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$)、若しくはエチレン基中の $-CH_2-$ の1個が $-COO-$ 、 $-OCO-$ で置換された基($-CH-CHCOO-$

10

20

30

40

50

、 - O C O C H - C H -) である。

【 0 1 1 2 】

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

【 0 1 1 3 】

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

【 0 1 1 4 】

A^{i2} 及び A^{i3} はそれぞれ独立して、2 価の 6 員環芳香族基、2 価の 6 員環複素芳香族基、2 価の 6 員環脂肪族基、又は 2 価の 6 員環複素脂肪族基、2 価の 5 員環芳香族基、2 価の 5 員環複素芳香族基、2 価の 5 員環脂肪族基、又は 2 価の 5 員環複素脂肪族基が好ましく、具体的には、1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキシレン基、アントラセン - 2, 6 - ジイル基、フェナントレン - 2, 7 - ジイル基、ピリジン - 2, 5 - ジイル基、ピリミジン - 2, 5 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、シクロペンタン - 1, 3 - ジイル基、インダン - 2, 5 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基及び 1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル基から選択される環構造を表すことが好ましく、該環構造は無置換であるか、又は L^{i1} 、 P^{i1} - $S p^{i1}$ - 若しくは K^{i1} で置換されていることが好ましい。また、 A^{i3} は 1, 3 - フェニレン基、1, 3 - シクロヘキシレン基、ナフタレン 2, 5 - ジイル基から選択される環構造を表すことも好ましい。

【 0 1 1 5 】

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

10

20

30

40

50

ロヘキシル基がより好ましい。また、 A^{i3} は K^{i1} で置換されていることも好ましい。

【0116】

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

【0117】

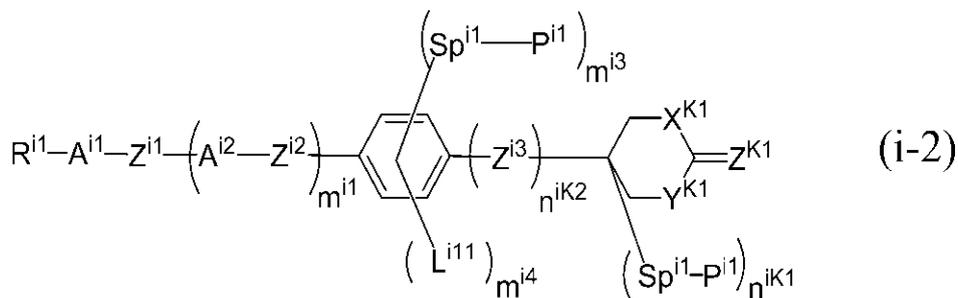
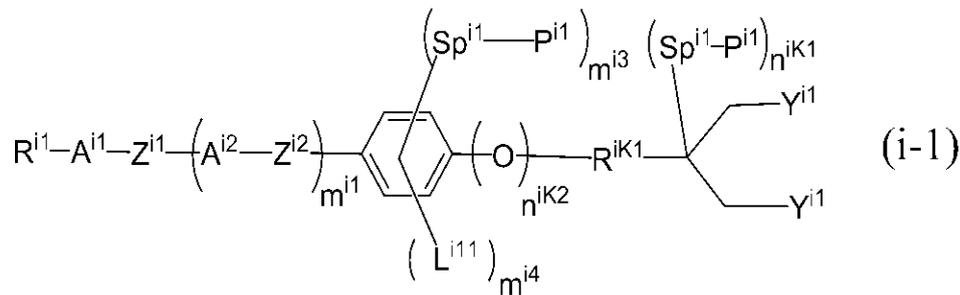
m^{i1} は、好ましくは0~3の整数を表し、更に好ましくは0~1の整数を表す。

【0118】

一般式(i)で表される化合物は、以下の一般式(i-1)又は一般式(i-2)で表される化合物であることが好ましい。

【0119】

【化30】



【0120】

(式中、 R^{i1} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i1} 、 Z^{i2} 、 Z^{i3} 、 m^{i1} 、 P^{i1} 及び Sp^{i1} はそれぞれ独立して一般式(i)中の R^{i1} 、 A^{i1} 、 A^{i2} 、 Z^{i1} 、 Z^{i2} 、 m^{i1} 、 P^{i1} 及び Sp^{i1} と同じ意味を表し、 Y^{i1} はそれぞれ独立して一般式(K-1)中の Y^{i1} と同じ意味を表し、 R^{iK1} 、 n^{iK1} 、 n^{iK2} はそれぞれ独立して一般式(K-1-1)中の R^{iK1} 、 n^{iK1} 、 n^{iK2} と同じ意味を表し、 X^{K1} 、 Y^{K1} 及び Z^{K1} は一般式(T-8)中の X^{K1} 、 Y^{K1} 及び Z^{K1} とそれぞれ同じ意味を表し、 L^{i11} は炭素原子数1~3のアルキル基を表し、 m^{i3} は0~3の整数を表し、 m^{i4} は0~3の整数を表すが、 $m^{i3}+m^{i4}$ は0~4を表す。)

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

【0121】

10

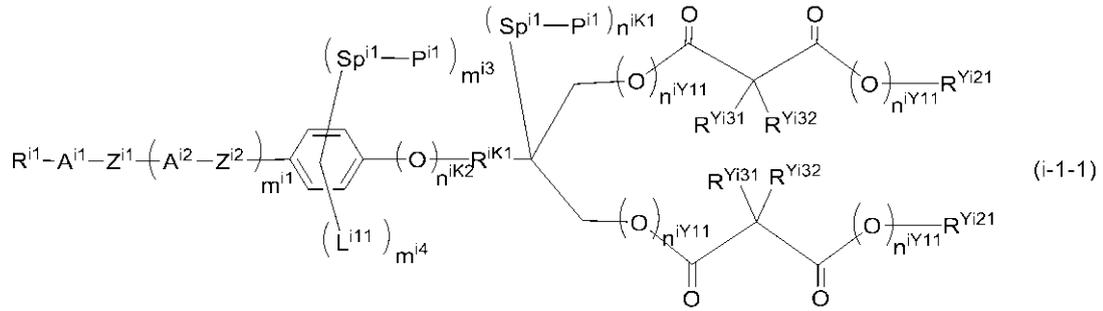
20

30

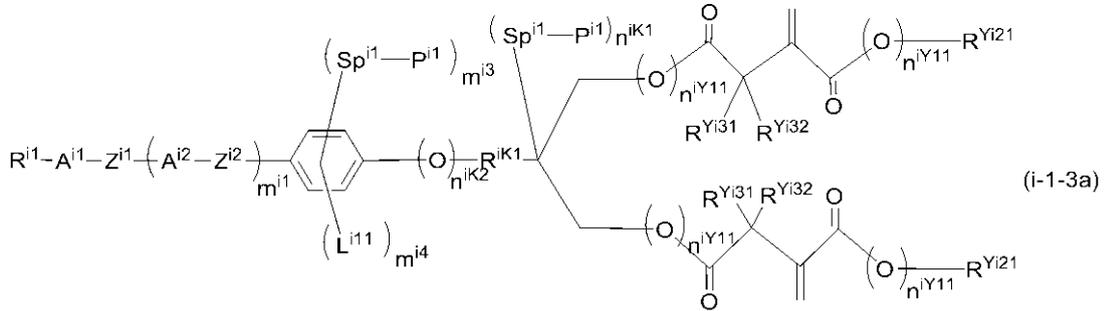
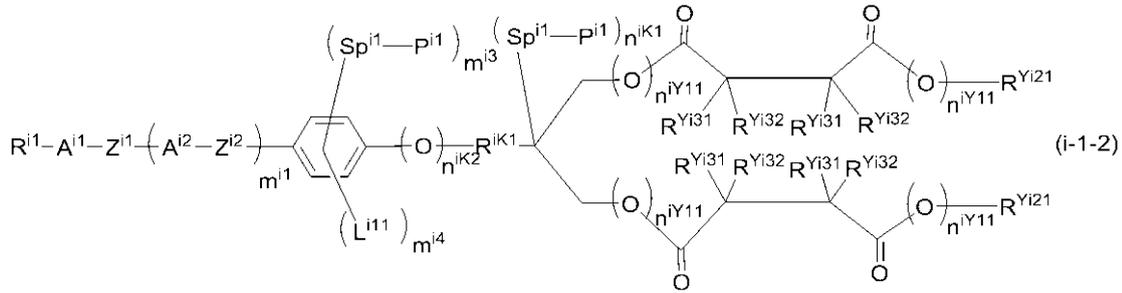
40

50

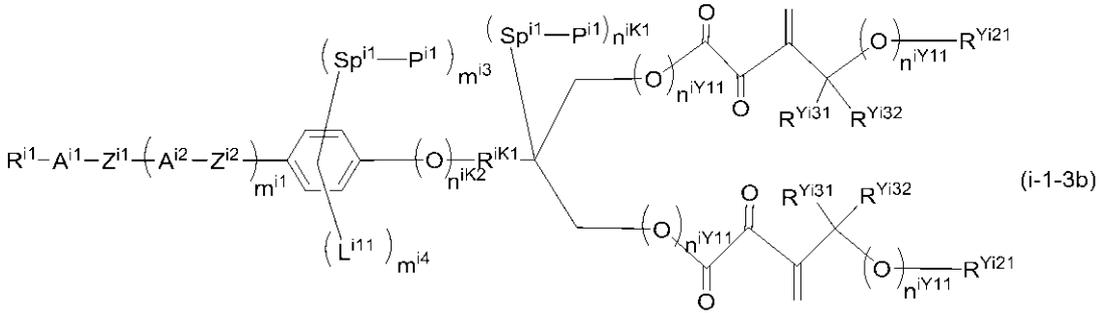
【化 3 1】



10



20



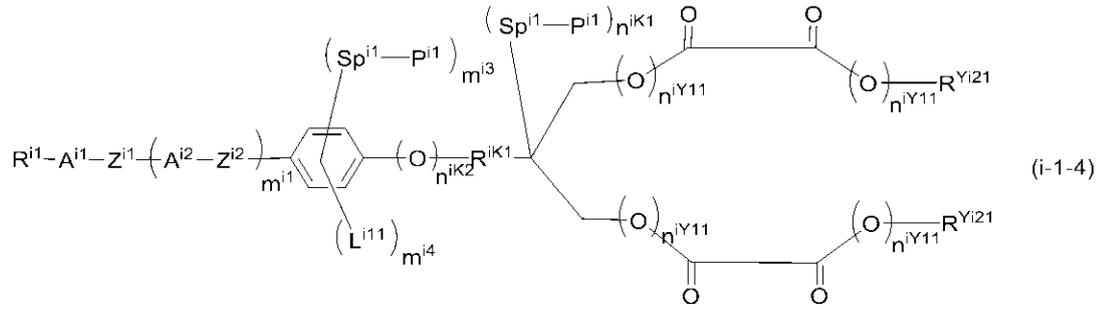
30

【 0 1 2 2】

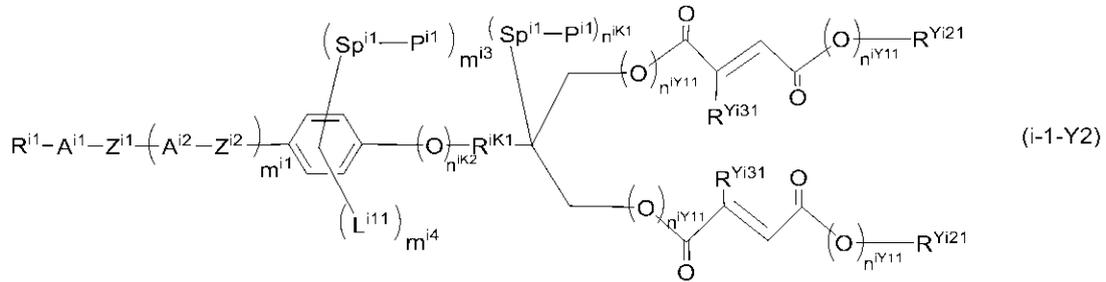
40

50

【化32】

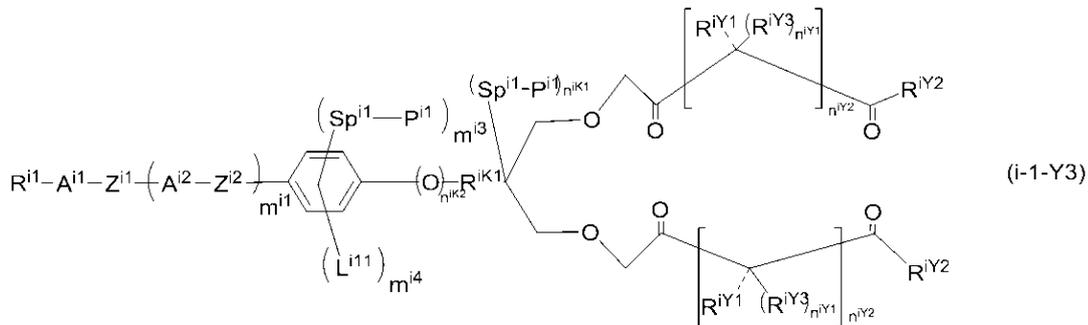


10

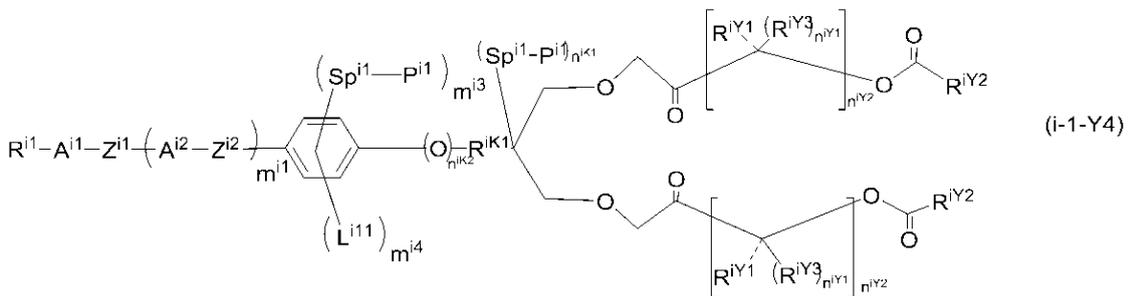


【0123】

【化33】



30



40

【0124】

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

なお、一般式(i-1)及び一般式(i-1-1)、(i-1-2)、(i-1-3)中の各符号の好ましい基は、上記一般式(i)、一般式(K-1)及び一般式(K-1-

50

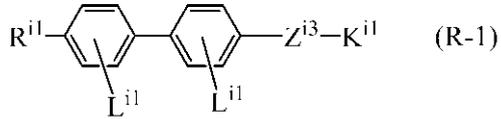
1) ~ (K - 1 - 3) 中の好ましい基と同様である。

【0125】

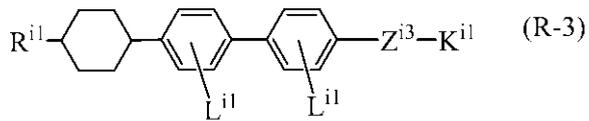
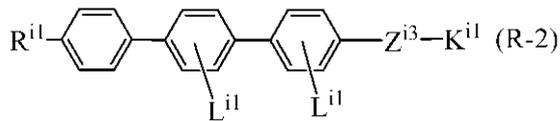
一般式(i)は、以下の一般式(R-1) ~ (R-6)を表すことが好ましい。

【0126】

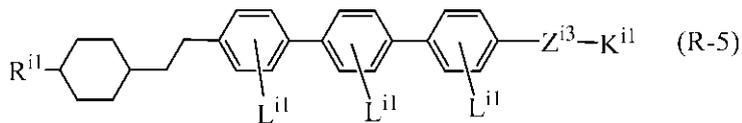
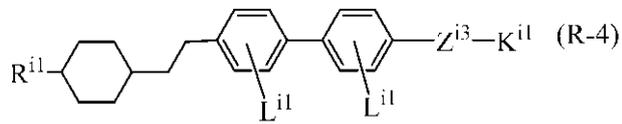
【化34】



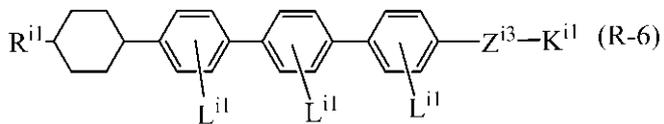
10



20



30



【0127】

(式中、 R^{i1} 、 K^{i1} 、 Z^{i3} 及び L^{i1} は一般式(i)中の R^{i1} 、 K^{i1} 及び L^{i1} とそれぞれ同じ意味を表す。)

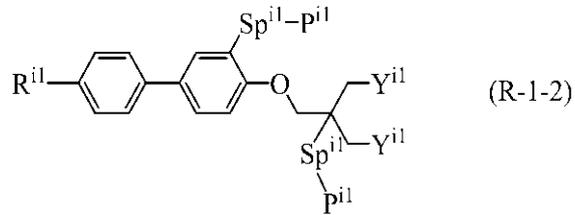
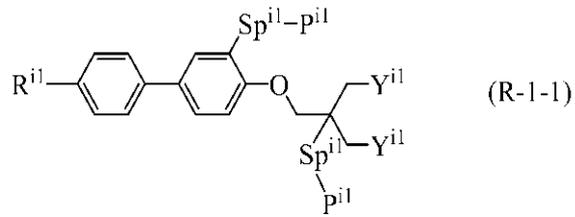
40

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

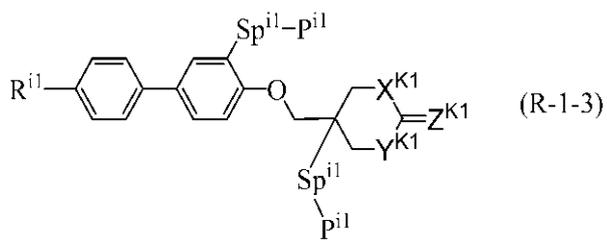
【0128】

50

【化 3 5】



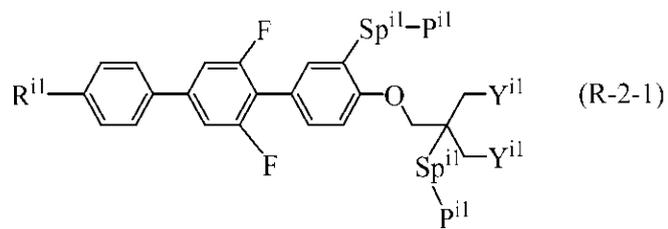
10



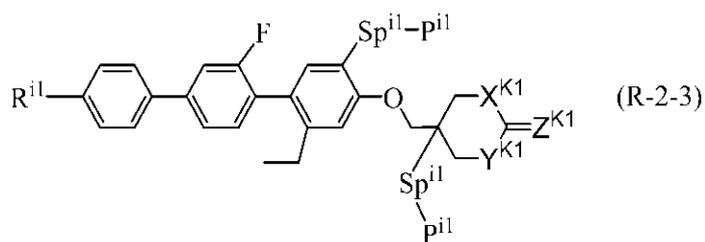
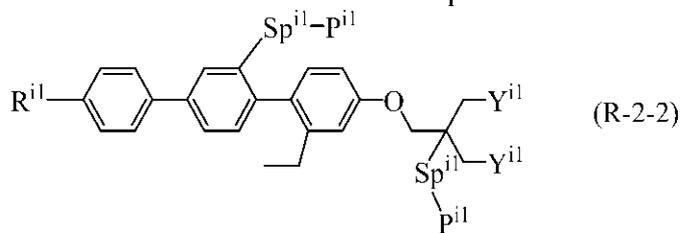
20

【 0 1 2 9】

【化 3 6】



30

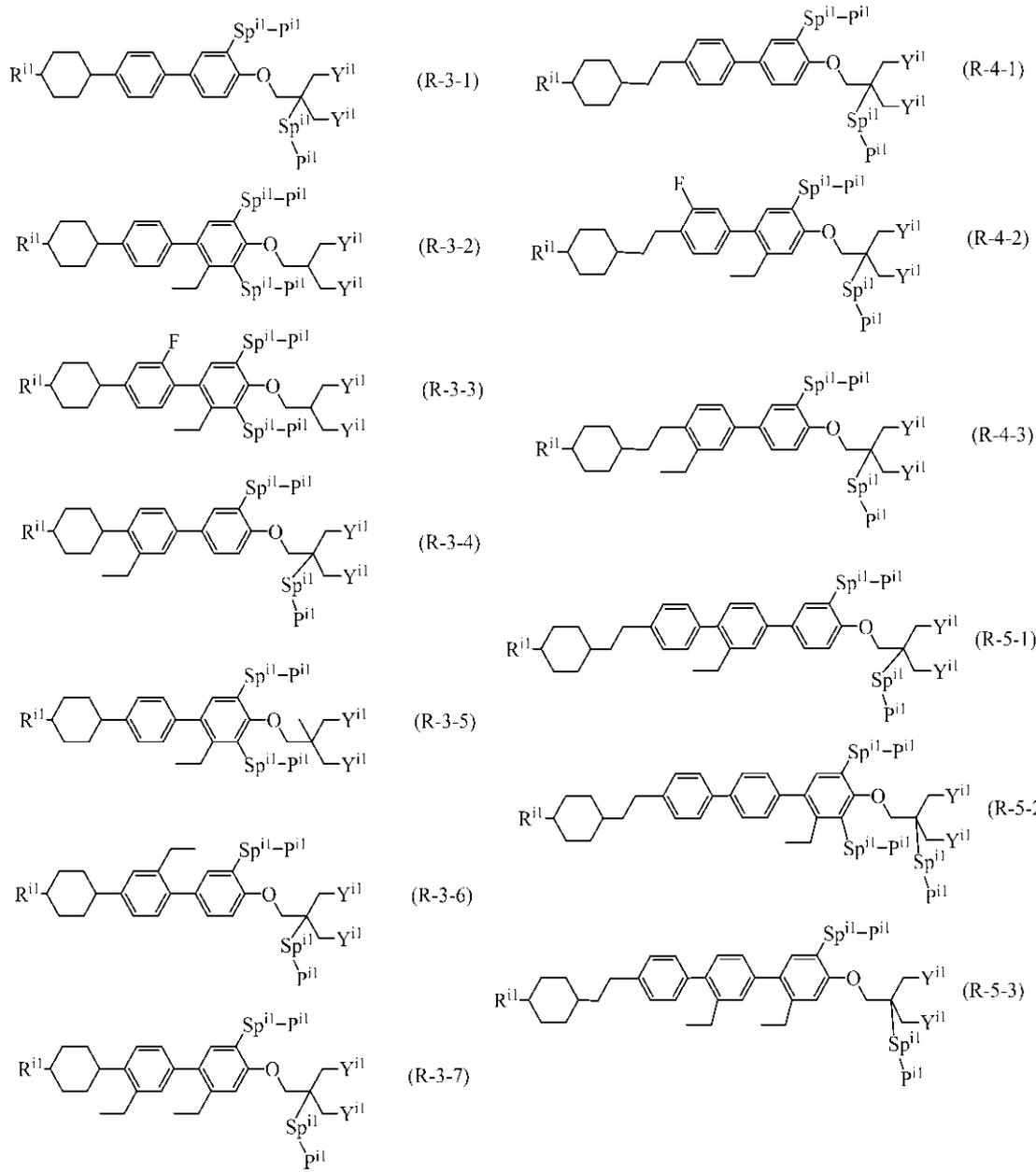


40

【 0 1 3 0】

50

【化 3 7】



10

20

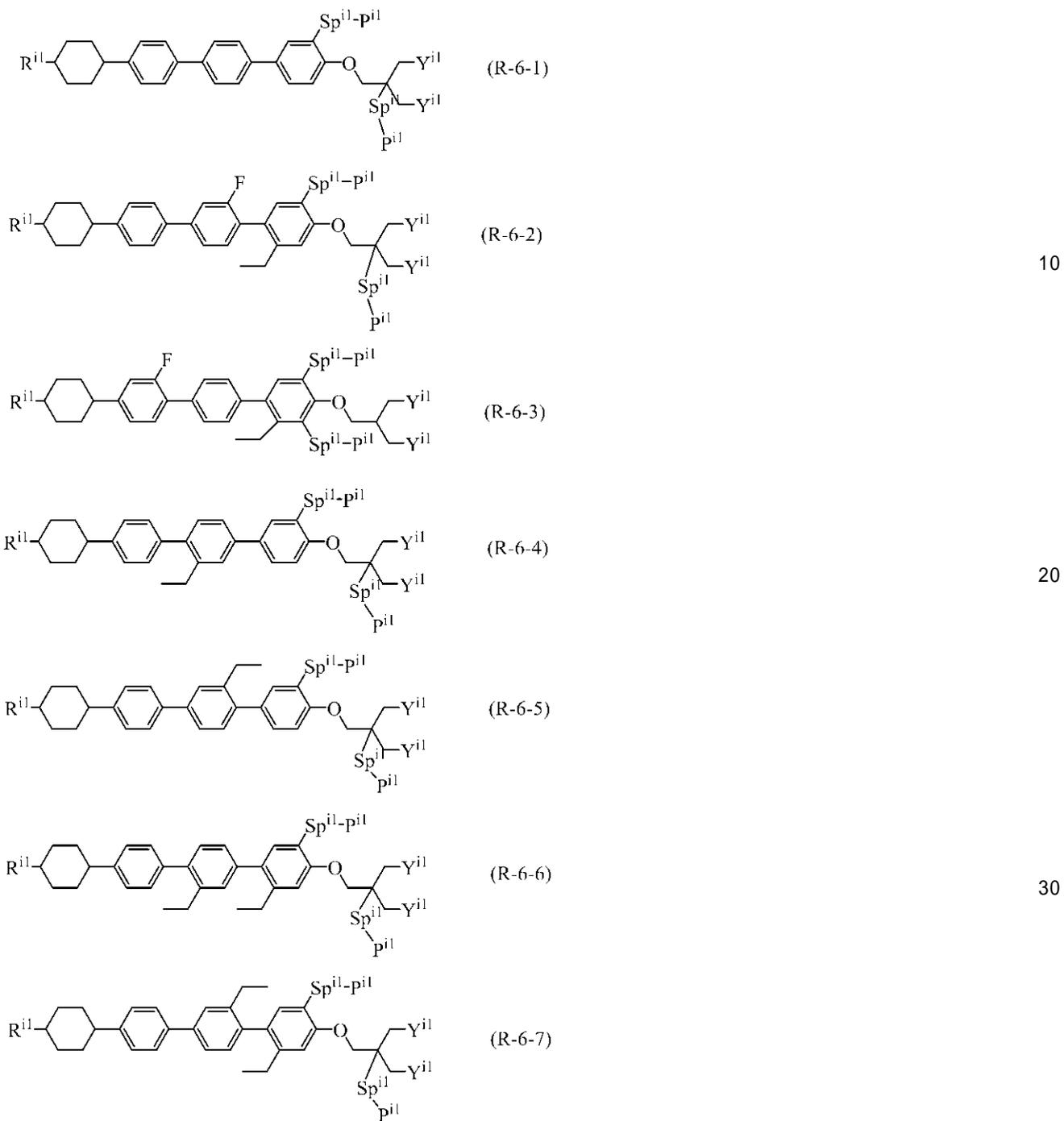
30

【 0 1 3 1】

40

50

【化 3 8】

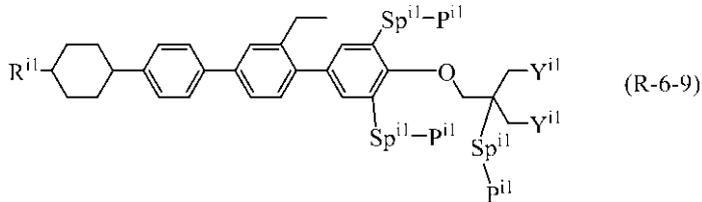
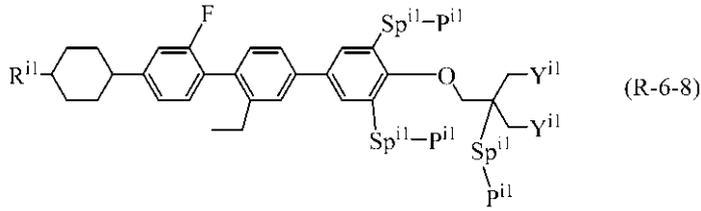


【 0 1 3 2】

40

50

【化39】



10

【0133】

(式中、 R^{i1} 、 P^{i1} 、 S^{i1} 、 X^{K1} 、 Y^{K1} 、 Z^{K1} 及び Y^{i1} はそれぞれ独立して一般式(i)、一般式(K-1)及び一般式(T-8)中の R^{i1} 、 P^{i1} 、 S^{i1} 、 X^{K1} 、 Y^{K1} 、 Z^{K1} 及び Y^{i1} と同じ意味を表す。)

K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤の含有量は、複合組成物全体に対して、好ましくは0.01~50質量%であるが、その下限値は、液晶分子を好適に配向させられる観点から、液晶組成物全量を基準として、好ましくは、0.01質量%以上、0.1質量%以上、0.5質量%以上、0.7質量%以上、又は1質量%以上である。 K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤の含有量の上限値は、応答特性に優れる観点から、複合組成物全体に対して、好ましくは、50質量%以下、30質量%以下、10質量%以下であり、7質量%以下、5質量%以下、4質量%以下、又は3質量%以下である。

20

【0134】

本発明は、自発配向剤として、 K^{i1} で表される部分構造を有する化合物以外の公知の自発配向剤を含有しても良い。

(液晶組成物)

本発明の液晶組成物は、液晶分子4(液晶化合物)を1種又は2種以上含有する。この液晶組成物は、負の誘電率異方性()を有する。

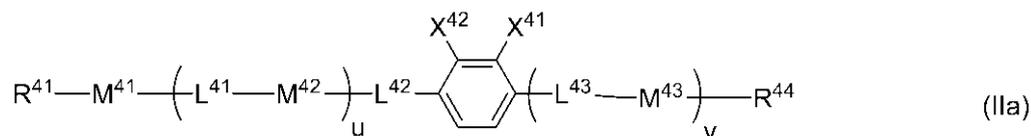
30

【0135】

より具体的には、本発明の液晶組成物には、負の誘電異方性を有する化合物として下記一般式(IIa)で表される化合物を1種又は2種以上含有することが好ましい。

【0136】

【化40】



40

【0137】

(式中 R^{41} 及び R^{44} はお互い独立して炭素原子数1から10のアルキル基又は炭素原子数2から10のアルケニル基を表し、これらの基中に存在する1個のメチレン基又は隣接していない2個以上のメチレン基は-O-又は-S-に置換されていても良く、またこれらの基中に存在する1個又は2個以上の水素原子はフッ素原子又は塩素原子に置換されても良く、

M^{41} 、 M^{42} 及び M^{43} はお互い独立して、

(a) 1,4-シクロヘキシレン基(この基中に存在する1個の-CH₂-又は隣接していない2個以上の-CH₂-は-O-に置き換えられてもよい。)及び

50

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

(c) ナフタレン-2,6-ジイル基、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基又はデカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基(ナフタレン-2,6-ジイル基又は1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基中に存在する1個の-CH=又は隣接していない2個以上の-CH=は-N=に置き換えられてもよい。)

(d) 1,4-シクロヘキセニレン基

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基(a)、基(b)、基(c)及び基(d)はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良く、

L^{41} 、 L^{42} 及び L^{43} はお互い独立して単結合、-COO-、-OCO-、-CH₂CH₂-、-(CH₂)₄-、-OCH₂-、-CH₂O-、-OCF₂-、-CF₂O-又は-C-C-を表し、 M^{42} 、 M^{43} L^{41} 及び/又は L^{43} が複数存在する場合は、それらは同一でも良く異なっても良く、

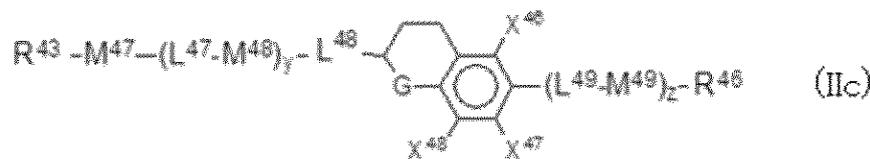
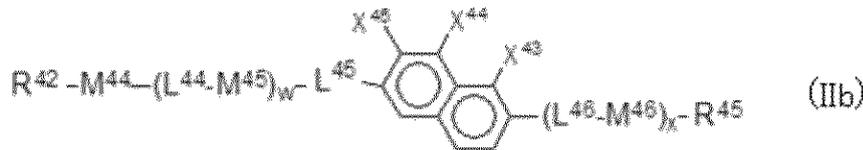
X^{41} 及び X^{42} はフッ素原子、またはシアノ基を表し、

u及びvはお互い独立して、0、1又は2を表すが、u+vは2以下である。)

負の誘電異方性を有する化合物としては、一般式(IIa)で表される化合物以外の液晶化合物を含有していてもよい。例えば、1種類又は2種類以上の一般式(IIa)で表される化合物と共に、下記一般式(IIb)及び一般式(IIc)から選択される少なくとも1種又は2種以上の化合物を任意に組み合わせて構成することができる。一般式(IIa)、一般式(IIb)及び一般式(IIc)で表される化合物は誘電的に負の化合物(誘電率異方性の符号が負で、その絶対値が2より大きい)に該当する。

【0138】

【化41】



【0139】

(式中 R^{42} 、 R^{43} 、 R^{45} 及び、 R^{46} はお互い独立して炭素原子数1から10のアルキル基又は炭素原子数2から10のアルケニル基を表し、これらの基中に存在する1個のメチレン基又は隣接していない2個以上のメチレン基は-O-又は-S-に置換されていても良く、またこれらの基中に存在する1個又は2個以上の水素原子はフッ素原子又は塩素原子に置換されても良く、

M^{44} 、 M^{45} 、 M^{46} 、 M^{47} 、 M^{48} 及び M^{49} はお互い独立して、

(a) 1,4-シクロヘキシレン基(この基中に存在する1個の-CH₂-又は隣接していない2個以上の-CH₂-は-O-に置き換えられてもよい。)及び

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

(c) ナフタレン-2,6-ジイル基、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基又はデカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基(ナフタレン-2,6-ジイル基又は1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基中に存在する1個の-CH=又は隣接していない2個以上の-CH=は-N=に置き換えられてもよい。)

(d) 1,4-シクロヘキセニレン基

からなる群より選ばれる基を表し、上記の基 (a)、基 (b)、基 (c) 及び基 (d) はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良く、

L^{44} 、 L^{45} 、 L^{46} 、 L^{47} 、 L^{48} 及び L^{49} はお互い独立して単結合、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 又は $-C=C-$ を表し、 M^{45} 、 M^{46} 、 M^{48} 、 M^{49} 、 L^{44} 、 L^{46} 、 L^{47} 及び L^{49} が複数存在する場合は、それらは同一でも良く異なっても良く、

X^{43} 及び X^{46} は水素原子又はフッ素原子を表し、 X^{44} 、 X^{45} 、 X^{47} 及び X^{48} はフッ素原子を表し、 G はメチレン基又は $-O-$ を表し、

w 、 x 、 y 及び z はお互い独立して、 0 、 1 又は 2 を表すが、 $w+x$ 及び $y+z$ は 2 以下である。) 10

本発明に係る液晶組成物に含まれる非重合性液晶化合物の総量に対しての式 (I I a) で表される液晶化合物の好ましい含有量の下限値は 30 質量%であり、上限値は 95 質量%である。より好ましい含有量の下限値は 45 %であり、上限値は 80 質量%である。

【0140】

本発明に係る液晶組成物に含まれる非重合性液晶化合物の総量に対しての式 (N - 2) で表される液晶化合物の好ましい含有量は、 0 質量%である。ただし、透明性などの本願発明の目的を阻害しない限り、該含有量の下限値は、 1 質量%であり、 10 質量%であり、 20 質量%であってもよい。該含有量の上限値は、 35 質量%であり、 25 質量%であり、 20 質量%であってもよい。 20

【0141】

本発明に係る液晶組成物に含まれる非重合性液晶化合物の組成物の総量に対しての式 (N - 3) で表される液晶化合物の好ましい含有量は、 0 質量%である。ただし、透明性などの本願発明の目的を阻害しない限り、該含有量の下限値は、 1 %であり、 10 質量%であり、 20 質量%であってもよい。該含有量の上限値は、 35 質量%であり、 25 質量%であり、 20 質量%であってもよい。

【0142】

本発明に係る液晶組成物の粘度を低く保ち、応答速度が速い組成物が必要な場合は上記の下限値が低く上限値が低いことが好ましい。さらに、本発明に係る液晶組成物の T_{NI} を高く保ち、温度安定性の良い組成物が必要な場合は上記の下限値が低く上限値が低いことが好ましい。また、駆動電圧を低く保つために誘電率異方性を大きくしたいときは、上記の下限値を高く上限値が高いことが好ましい。 30

【0143】

上記一般式 (I I a)、一般式 (I I b) 及び一般式 (I I c) で表される化合物において、 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 、 R^{44} 、 R^{45} 及び R^{46} はお互い独立して炭素原子数 1 から 10 のアルキル基又は炭素原子数 2 から 10 のアルケニル基、炭素数 $1 \sim 15$ の直鎖状アルキル基又は炭素数 $2 \sim 15$ のアルケニル基 (これらの基中に存在する 1 個のメチレン基又は隣接していない 2 個以上のメチレン基は $-O-$ 又は $-S-$ に置換されているもの、またこれらの基中に存在する 1 個又は 2 個以上の水素原子はフッ素原子又は塩素原子に置換されているものも含む。) が好ましく、炭素数 $1 \sim 10$ の直鎖状アルキル基、炭素数 $1 \sim 10$ の直鎖状アルコキシ基又は炭素数 $2 \sim 10$ アルケニル基がより好ましく、炭素数 $1 \sim 8$ の直鎖状アルキル基又は炭素数 $1 \sim 8$ のアルコキシ基が特に好ましい。 M^{41} 、 M^{42} 、 M^{43} 、 M^{44} 、 M^{45} 、 M^{46} 、 M^{47} 、 M^{48} 及び M^{49} はお互い独立して、トランス $-1,4-$ シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 個のメチレン基又は隣接していない 2 個以上のメチレン基は $-O-$ 又は $-S-$ に置き換えられているものも含む。)、 $1,4-$ フェニレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH=$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置き換えられているものも含む)、 $1,4-$ シクロヘキセニレン基、 $1,4-$ ピシクロ [$2.2.2$] オクチレン基、ピペリジン $-2,5-$ ジイル基、ナフタレン $-2,6-$ ジイル基、 $1,2,3,4-$ テトラヒドロナフタレン $-2,6-$ ジイル基及びデカヒドロナフタレン $-2,6-$ ジイル基で表す基 (各々の基に含まれる水素原子がそれ 40 50

ぞれシアノ基、フッ素原子、トリフルオロメチル基、トリフルオロメトキシ基又は塩素原子で置換されているものも含む。)が好ましく、トランス-1,4-シクロヘキシレン基、1,4-フェニレン基、3-フルオロ-1,4-フェニレン基又は2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン基がより好ましく、トランス-1,4-シクロヘキシレン基又は1,4-フェニレン基が更に好ましく、トランス-1,4-シクロヘキシレン基が特に好ましい。L⁴¹、L⁴²、L⁴³、L⁴⁴、L⁴⁵、L⁴⁶、L⁴⁷、L⁴⁸及びL⁴⁹はお互い独立して単結合、-CH₂CH₂-、-(CH₂)₄-、-OCO-、-COO-、-OCH₂-、-CH₂O-、-OCF₂-、-CF₂O-又は-C-C-が好ましく、単結合、-CH₂CH₂-、-OCH₂-又は-CH₂O-がより好ましい。X⁴¹、X⁴²、X⁴³、X⁴⁴、X⁴⁵、X⁴⁶及びX⁴⁷はお互い独立して水素原子又はフッ素原子を表し、Gはメチレン基又は-O-を表し、u、v、w、x、y及びzはお互い独立して、0、1又は2を表すが、u+v、w+x及びy+zは2以下で表す。

10

【0144】

上記の選択枝の組み合わせにより形成される構造のうち、-CH=CH-CH=CH-、-C-C-C-C-及び-CH=CH-C-C-は化学的な安定性から好ましくない。またこれら構造中の水素原子がフッ素原子に置き換わったものも同様に好ましくない。また酸素同士が結合する構造、硫黄原子同士が結合する構造及び硫黄原子と酸素原子が結合する構造となることも同様に好ましくない。また窒素原子同士が結合する構造、窒素原子と酸素原子が結合する構造及び窒素原子と硫黄原子が結合する構造も同様に好ましくない。

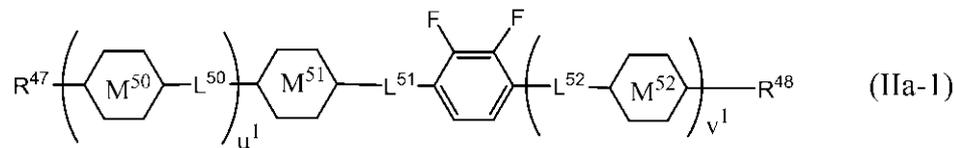
20

【0145】

一般式(IIa)で表される化合物において、具体的には以下の一般式(IIa-1)で示される構造を表すことが好ましい。

【0146】

【化42】



【0147】

(式中、R⁴⁷及びR⁴⁸はお互い独立して炭素原子数1~8のアルキル基、炭素原子数1~8のアルコキシル基又は炭素原子数2~8のアルケニル基を表し、L⁵⁰、L⁵¹及びL⁵²はそれぞれ独立して単結合、-CH₂CH₂-、-(CH₂)₄-、-OCH₂-、-CH₂O-、-OCF₂-、-CF₂O-又は-C-C-を表し、M⁵⁰、M⁵¹及びM⁵²はそれぞれ独立して1,4-フェニレン基又はトランス-1,4-シクロヘキシレン基、2,5-テトラヒドロピラニル基を表し、該1,4-フェニレン基又はトランス-1,4-シクロヘキシレン基はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良く、

30

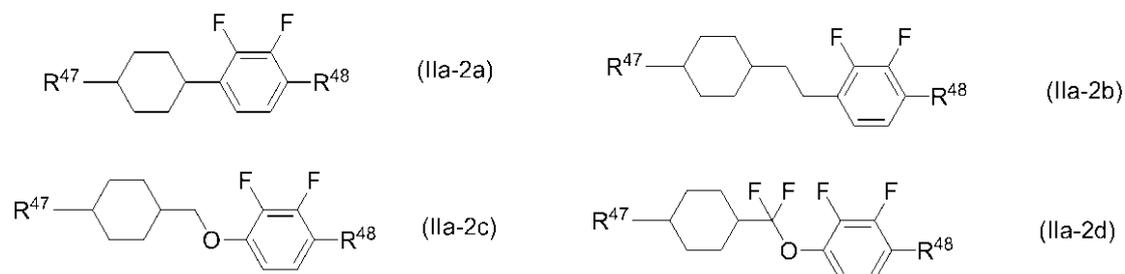
u¹及びv¹はそれぞれ独立して0又は1を表す。)

更に具体的には以下の一般式(IIa-2a)~一般式(IIa-3p)

40

【0148】

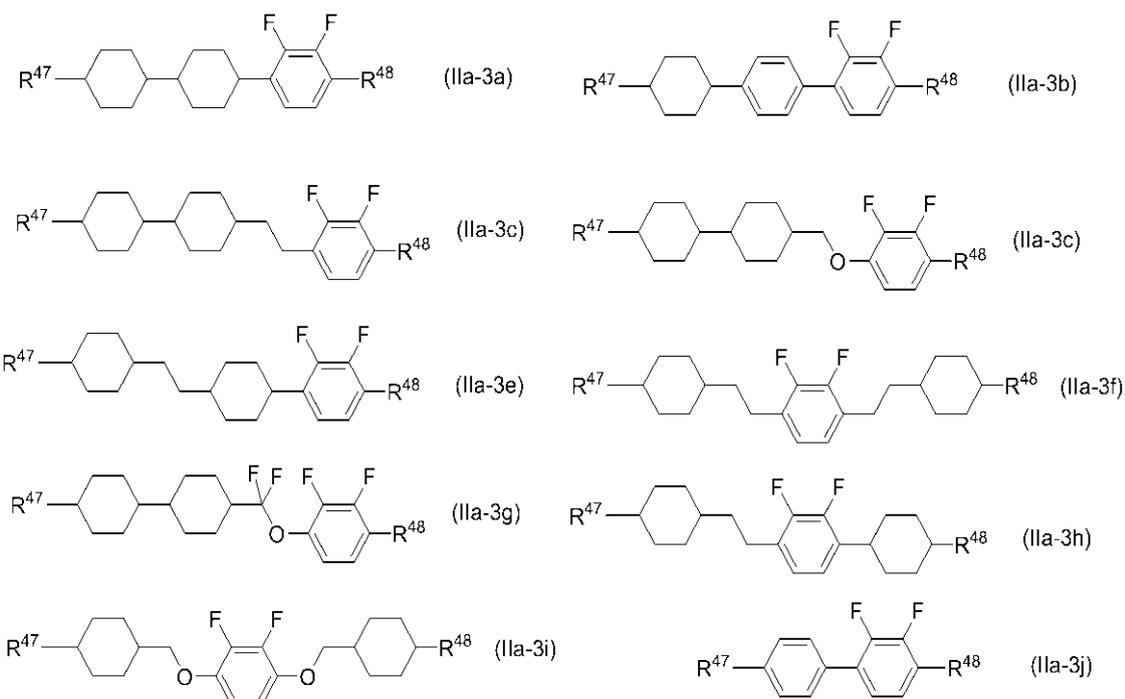
【化43】



50

【 0 1 4 9 】

【 化 4 4 】

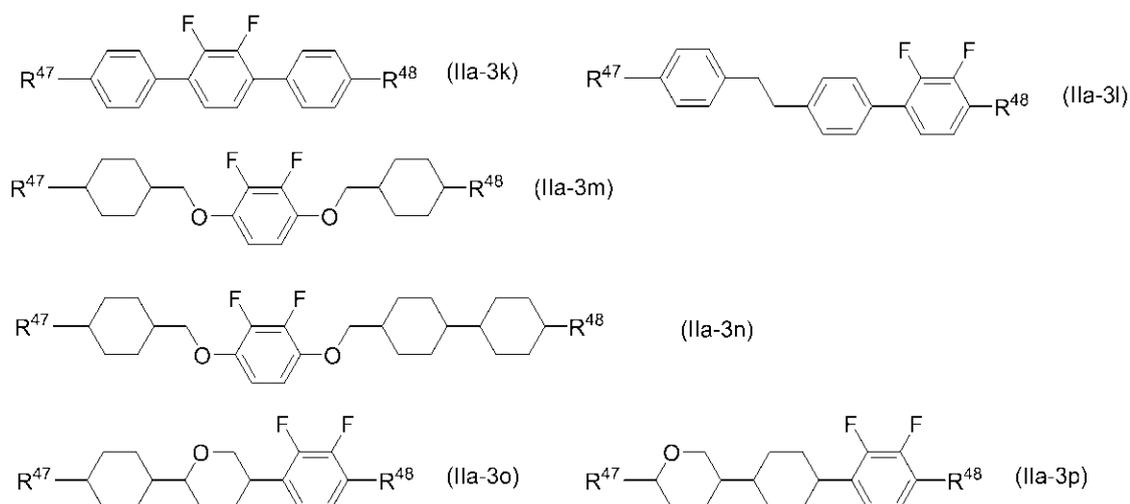


10

20

【 0 1 5 0 】

【 化 4 5 】



30

【 0 1 5 1 】

(式中、 R^{47} 及び R^{48} はそれぞれ独立して炭素原子数1～8のアルキル基、炭素原子数1～8のアルコキシル基又は炭素原子数2～8のアルケニル基を表す。)で表される構造が好ましく、 R^{47} 及び R^{48} がそれぞれ独立して炭素原子数1～8のアルキル基又は炭素原子数1～8のアルコキシル基が更に好ましい。

40

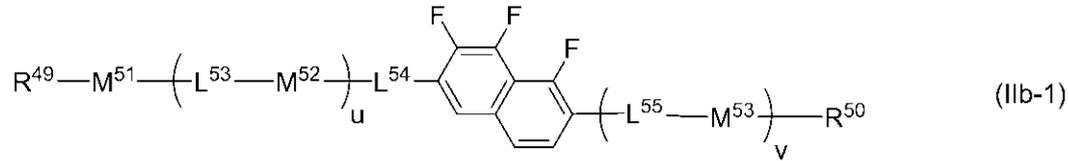
【 0 1 5 2 】

一般式(IIb)で表される化合物において、具体的には以下の一般式(IIb-1)で示される構造を表すことが好ましい。

【 0 1 5 3 】

50

【化 4 6】



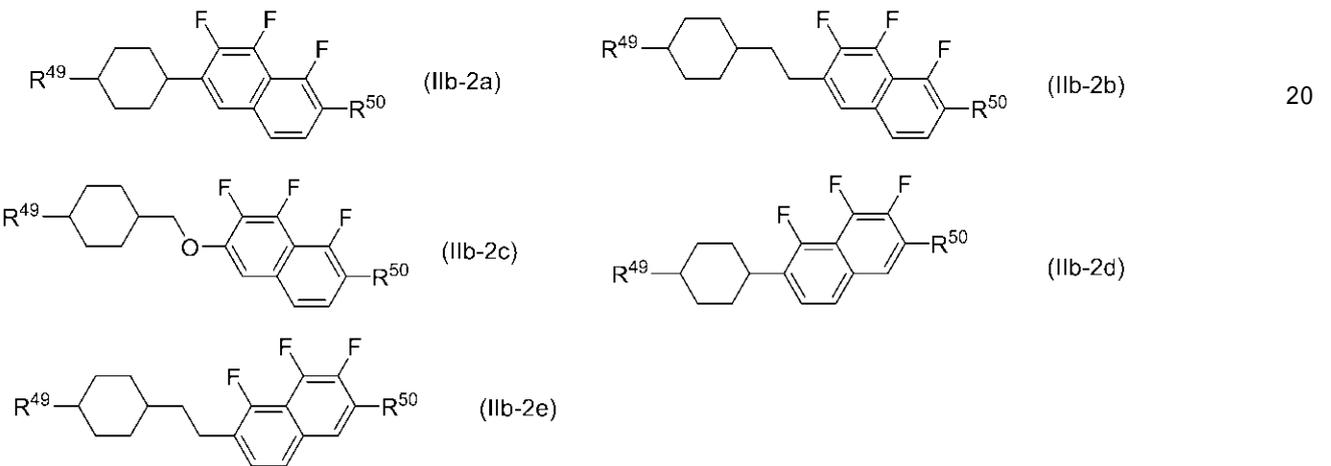
【 0 1 5 4】

(式中、 R^{49} 及び R^{50} はお互い独立して炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 8 のアルコキシル基又は炭素原子数 2 ~ 8 のアルケニル基を表し、 L^{52} 、 L^{53} 及び L^{54} はそれぞれ独立して単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 又は $-\text{C}=\text{C}-$ を表し、 M^{51} 、 M^{52} 及び M^{53} は 1, 4 - フェニレン基又はトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基を表し、 w_1 及び x_1 は独立して 0、1 又は 2 を表すが、 $w_1 + x_1$ は 2 以下を表す。)

更に具体的には以下の一般式 (IIb-2a) ~ (IIb-3f)

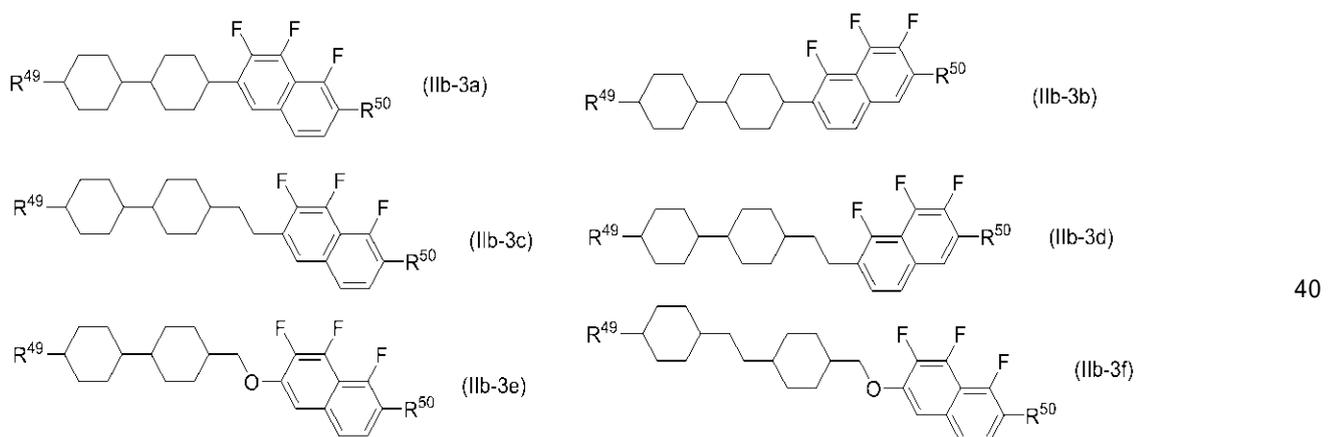
【 0 1 5 5】

【化 4 7】



【 0 1 5 6】

【化 4 8】



【 0 1 5 7】

(式中、 R^{49} 及び R^{50} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 8 のアルコキシル基又は炭素原子数 2 ~ 8 のアルケニル基を表す。) で表される構造が好ましい。

【 0 1 5 8】

10

20

30

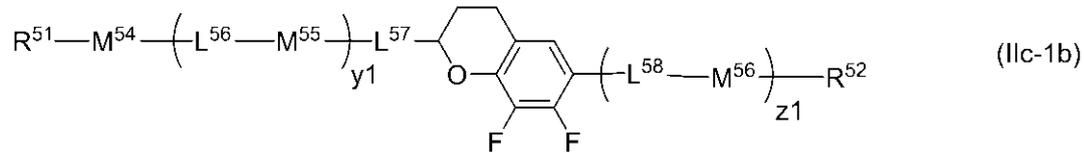
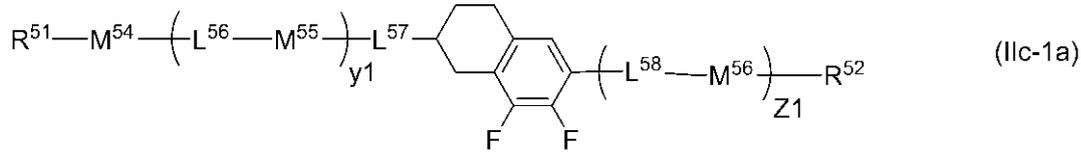
40

50

一般式 (I I c) で表される化合物において、具体的には以下の一般式 (I I c - 1 a) 及び一般式 (I I c - 1 b) で示される構造を表すことが好ましい。

【 0 1 5 9 】

【 化 4 9 】



10

【 0 1 6 0 】

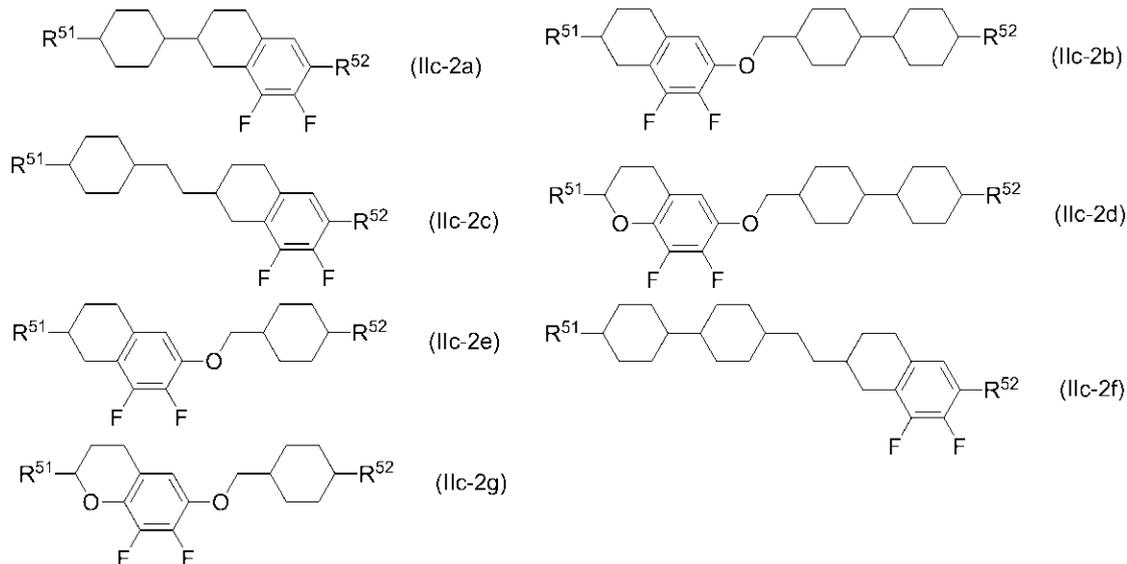
(式中、 R^{51} 及び R^{52} はお互い独立して炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 8 のアルコキシル基又は炭素原子数 2 ~ 8 のアルケニル基を表し、 L^{56} 、 L^{57} 及び L^{58} はそれぞれ独立して単結合、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 又は $-\text{C}=\text{C}-$ を表し、 M^{54} 、 M^{55} 及び M^{56} は 1, 4 - フェニレン基又はトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基を表し、 y_1 及び z_1 は独立して 0、1 又は 2 を表すが、 $y_1 + z_1$ は 2 以下を表す。)

20

更に具体的には以下の一般式 (I I c - 2 a) ~ (I I c - 2 g)

【 0 1 6 1 】

【 化 5 0 】



30

40

【 0 1 6 2 】

(式中、 R^{51} 及び R^{52} はお互い独立して炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、炭素原子数 1 ~ 8 のアルコキシル基又は炭素原子数 2 ~ 8 のアルケニル基を表す。)

本発明の液晶組成物は、一般式 (I I I a)、一般式 (I I I b) 及び一般式 (I I I c) で表される化合物からなる群から選ばれる化合物又は一般式 (I V a)、一般式 (I V b) 及び一般式 (I V c) で表される化合物からなる群から選ばれる化合物を少なくとも 1 種を含有することが好ましいが、2 種 ~ 10 種含有することが好ましく、2 種 ~ 8 種含有することが特に好ましく、含有率の下限値が 5 質量%であることが好ましく、10 質量%であることがより好ましく、20 質量%であることがより好ましく、上限値が 80 質量%であることが好ましく、70 質量%であることが好ましく、60 質量%であることが

50

好ましく、50質量%であることが好ましい。

【0163】

本願発明の液晶組成物において、 n は0.08~0.25の範囲であることが好ましい。

(他の液晶性化合物)

本発明の液晶組成物には、液晶化合物として、負の誘電異方性を有する液晶化合物以外の液晶化合物を1種又は2種以上含有していることが好ましい。このような液晶化合物としては特に限定はないが、例えば一般式(L)で表される液晶化合物を1種類又は2種類以上含有することが好ましい。

【0164】

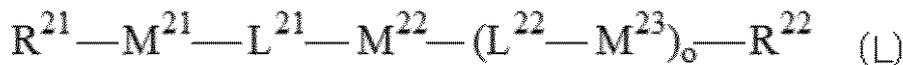
一般式(L)で表される液晶化合物は誘電的にほぼ中性の化合物(誘電率異方性の値が-2~2)に該当する。

【0165】

一般式(L)で表される化合物を以下に示す。

【0166】

【化51】



【0167】

(式中、 R^{21} 及び R^{22} はお互い独立して炭素原子数1から10のアルキル基又は炭素原子数2から10のアルケニル基を表し、これらの基中に存在する1個のメチレン基又は隣接していない2個以上のメチレン基は-O-又は-S-に置換されても良く、またこれらの基中に存在する1個又は2個以上の水素原子はフッ素原子又は塩素原子に置換されても良く、

M^{21} 、 M^{22} 及び M^{23} はお互い独立して

(a) トランス-1,4-シクロヘキシレン基(この基中に存在する1個のメチレン基又は隣接していない2個以上のメチレン基は-O-又は-S-に置き換えられてもよい)、

(b) 1,4-フェニレン基(この基中に存在する1個の-CH=又は隣接していない2個以上の-CH=は窒素原子に置き換えられてもよい)、2-フルオロ-1,4-フェニレン基、3-フルオロ-1,4-フェニレン基、3,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン基及び

(c) 1,4-シクロヘキセニレン基、1,4-ピシクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン-2,5-ジイル基、ナフタレン-2,6-ジイル基、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基及び1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基からなる群より選ばれる基を表し、上記の基(a)、基(b)及び基(c)はそれぞれ独立してシアノ基、フッ素原子又は塩素原子で置換されていても良く、

o は0、1又は2を表し、

L^{21} 及び L^{22} はお互い独立して単結合、-CH₂CH₂-、-(CH₂)₄-、-OCH₂-、-CH₂O-、-OCF₂-、-CF₂O-、-CH=CH-、-CH=N-N=CH-又は-C=C-を表し、 L^{22} が複数存在する場合は、それらは同一でも良く異なっても良く、 M^{23} が複数存在する場合は、それらは同一でも良く異なっても良い。)

一般式(L)で表される化合物において、 R^{21} 及び R^{22} はお互い独立して炭素原子数1から10のアルキル基又は炭素原子数2から10のアルケニル基(これらの基中に存在する1個のメチレン基又は隣接していない2個以上のメチレン基は-O-又は-S-に置換されたもの、またこれらの基中に存在する1個又は2個以上の水素原子はフッ素原子又は塩素原子に置換されたものも含む。)が好ましく、炭素原子数1から5のアルキル基、炭素原子数1から5のアルコキシ基、炭素原子数2から5のアルケニル基又は炭素原子数

10

20

30

40

50

3 から 6 のアルケニルオキシ基がより好ましく、炭素原子数 1 から 5 のアルキル基又は炭素原子数 1 から 5 のアルコキシ基が特に好ましい。

【 0 1 6 8 】

信頼性を重視する場合には R^{L1} 及び R^{L2} はともにアルキル基であることが好ましく、化合物の揮発性を低減させることを重視する場合にはアルコキシ基であることが好ましく、粘性の低下を重視する場合には少なくとも一方はアルケニル基であることが好ましい。

【 0 1 6 9 】

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

【 0 1 7 0 】

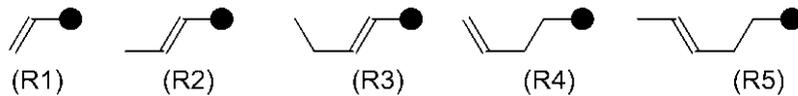
R^{21} 及び R^{22} は、それが結合する環構造がフェニル基（芳香族）である場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び炭素原子数 4 ~ 5 のアルケニル基が好ましく、それが結合する環構造がシクロヘキサン、ピラン及びジオキサソンの飽和した環構造の場合には、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましい。ネマチック相を安定化させるためには炭素原子及び存在する場合酸素原子の合計が 5 以下であることが好ましく、直鎖状であることが好ましい。

【 0 1 7 1 】

アルケニル基としては、式 (R1) から式 (R5) のいずれかで表される基から選ばれることが好ましい。（各式中の黒点は環構造中の炭素原子を表す。）

【 0 1 7 2 】

【 化 5 2 】



【 0 1 7 3 】

M^{21} 、 M^{22} 及び M^{23} はお互い独立してトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基（この基中に存在する 1 個の CH_2 基又は隣接していない 2 個の CH_2 基が酸素原子に置換されているものを含む）、1, 4 - フェニレン基（この基中に存在する 1 個又は 2 個以上の CH 基は窒素原子に置換されているものを含む）、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキセニレン基、1, 4 - ビシクロ [2 . 2 . 2] オクチレン基、ピペリジン - 1, 4 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基が好ましく、トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基又は 1, 4 - ビシクロ [2 . 2 . 2] オクチレン基がより好ましく、トランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基又は 1, 4 - フェニレン基が特に好ましい。 M^{21} 、 M^{22} 及び M^{23} は n を大きくすることが求められる場合には芳香族であることが好ましく、応答速度を改善するためには脂肪族であることが好ましく、それぞれ独立してトランス - 1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - フェニレン基、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン基、3, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキセニレン基、1, 4 - ビシクロ [2 . 2 . 2] オクチレン基、ピペリジン - 1, 4 - ジイル基、ナフタレン - 2, 6 - ジイル基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基又は 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基を表すことが好ましく、下記の構造を表すことがより好ましく、

【 0 1 7 4 】

10

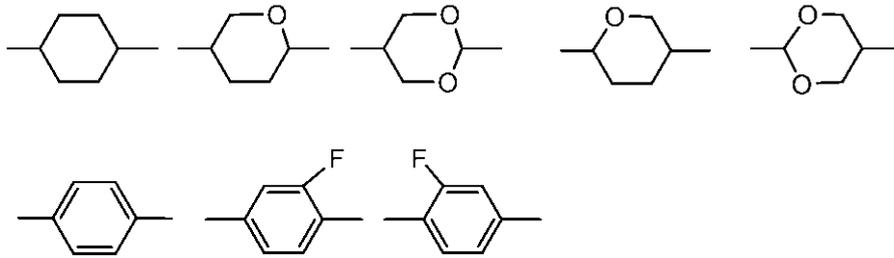
20

30

40

50

【化53】



【0175】

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

【0176】

oは0、1又は2が好ましく、0又は1がより好ましい。

【0177】

L²¹及びL²²はお互い独立して単結合、-CH₂CH₂-、-(CH₂)₄-、-OCH₂-、-CH₂O-、-OCF₂-、-CF₂O-、-CH=CH-、-CH=N-N=CH-又は-C≡C-が好ましく、単結合、-CH₂CH₂-、-(CH₂)₄-、-OCH₂-又は-CH₂O-がより好ましく、単結合又は-CH₂CH₂-が更に好ましい。

【0178】

上記の選択枝の組み合わせにより形成される構造のうち、-CH=CH-CH=CH-、-C≡C-C≡C-及び-CH=CH-C≡C-は化学的な安定性から好ましくない。またこれら構造中の水素原子がフッ素原子に置き換わったものも同様に好ましくない。また酸素同士が結合する構造、硫黄原子同士が結合する構造及び硫黄原子と酸素原子が結合する構造となることも同様に好ましくない。また窒素原子同士が結合する構造、窒素原子と酸素原子が結合する構造及び窒素原子と硫黄原子が結合する構造も同様に好ましくない。

【0179】

本発明の液晶組成物において、一般式(L)で表される液晶化合物の含有量は、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率、プロセス適合性、滴下痕、焼き付き、誘電率異方性などの求められる性能に応じて適宜調整する必要がある。

【0180】

本発明の液晶組成物に含まれる非重合性液晶化合物の総量に対しての、式(L)で表される化合物の、好ましい含有量の下限値は1質量%であり、上限値は85質量%である。より好ましい含有量の下限値は3質量%であり、上限値は65質量%である。

【0181】

該組成物の粘度を低く保ち、応答速度が速い組成物が必要な場合は上記の下限値が高く上限値が高いことが好ましい。さらに、本発明に係る組成物のT_{NI}を高く保ち、温度安定性の良い組成物が必要な場合は上記の下限値が高く上限値が高いことが好ましい。また、駆動電圧を低く保つために誘電率異方性を大きくしたいときは、上記の下限値を低く上限値が低いことが好ましい。

【0182】

更に詳述すると、一般式(L)は具体的な構造として以下の一般式(L-a)から一般式(L-q)からなる群で表される化合物が好ましい。

【0183】

10

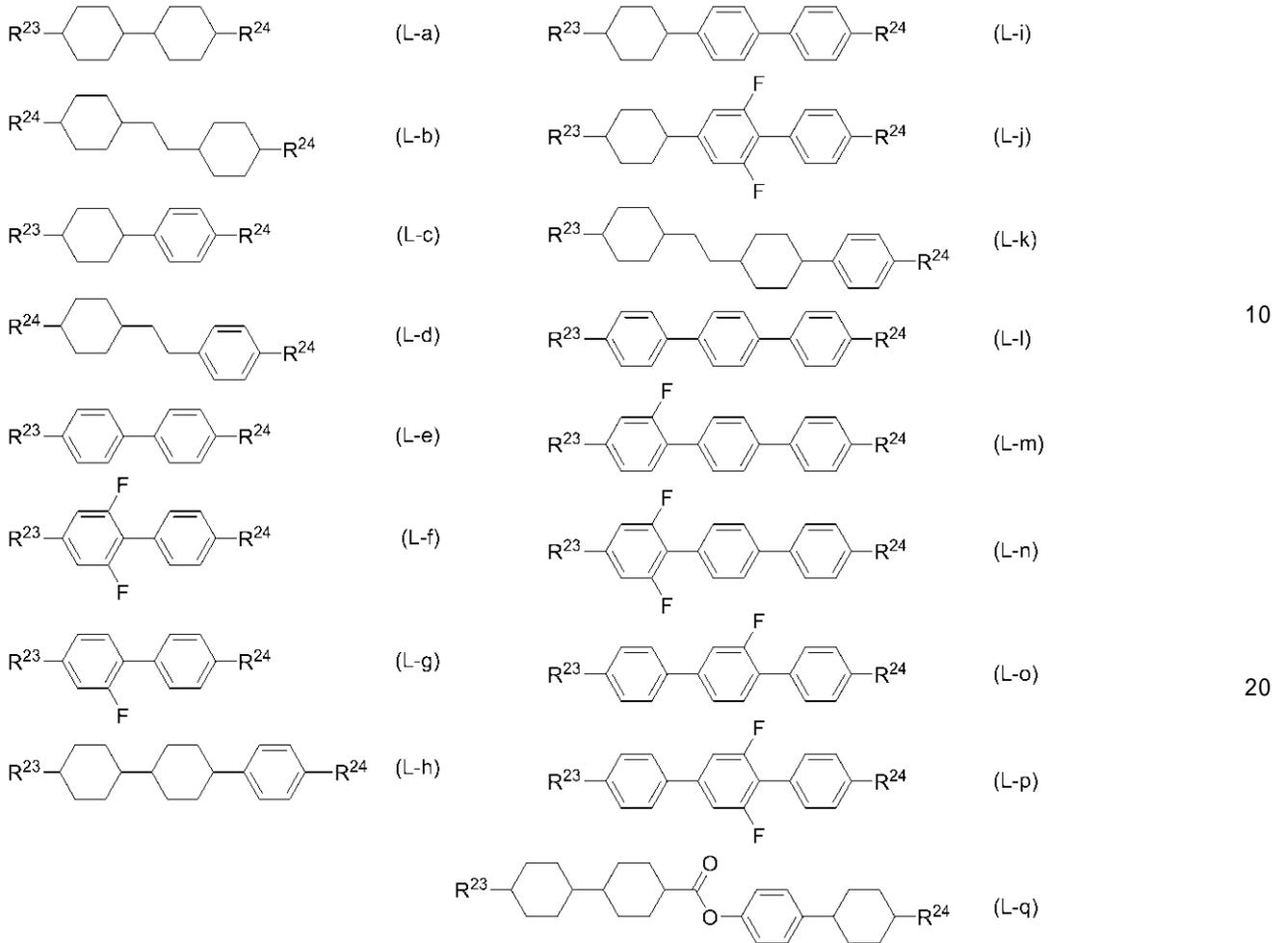
20

30

40

50

【化 5 4】



【0184】

(式中、 R^{23} 及び R^{24} はそれぞれ独立的に炭素数 1 から 10 のアルキル基、炭素数 1 から 10 のアルコキシ基、炭素数 2 から 10 のアルケニル基又は炭素数 3 から 10 のアルケニルオキシ基を表す。)

R^{23} 及び R^{24} はそれぞれ独立的に炭素数 1 から 10 のアルキル基、炭素数 1 から 10 のアルコキシ基又は炭素数 2 から 10 のアルケニル基がより好ましく、炭素数 1 から 5 のアルキル基又は炭素数 1 から 10 のアルコキシ基が更に好ましい。

【0185】

一般式 (L-a) から一般式 (L-q) で表される化合物中、一般式 (L-a)、一般式 (L-b)、一般式 (L-c)、一般式 (L-e)、一般式 (L-h)、一般式 (L-i)、一般式 (L-m)、一般式 (L-o) 又は一般式 (L-q) で表される化合物が好ましく、一般式 (L-a)、一般式 (L-c)、一般式 (L-e)、一般式 (L-h) 又は一般式 (L-i) で表される化合物が更に好ましい。

【0186】

本発明では一般式 (L) で表される化合物を少なくとも 1 種を含有することが好ましく、1 種 ~ 10 種含有することが好ましく、2 種 ~ 8 種含有することが特に好ましい。

【0187】

本発明に係る液晶組成物は、分子内に過酸 (-CO-OO-) 構造等の酸素原子同士が結合した構造を持つ化合物を含有しないことが好ましい。

【0188】

組成物の信頼性及び長期安定性を重視する場合にはカルボニル基を有する化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して 5 質量% 以下とすることが好ましく、3 質量% 以下とすることがより好ましく、1 質量% 以下とすることが更に好ましく、実質的に含有しないこ

30

40

50

とが最も好ましい。

【0189】

UV照射による安定性を重視する場合、塩素原子が置換している化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して15質量%以下とすることが好ましく、10質量%以下とすることが好ましく、8質量%以下とすることが好ましく、5質量%以下とすることがより好ましく、3質量%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

【0190】

分子内の環構造がすべて6員環である化合物の含有量を多くすることが好ましく、分子内の環構造がすべて6員環である化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して80質量%以上とすることが好ましく、90質量%以上とすることがより好ましく、95質量%以上とすることが更に好ましく、実質的に分子内の環構造がすべて6員環である化合物のみで組成物を構成することが最も好ましい。

10

【0191】

組成物の酸化による劣化を抑えるためには、環構造としてシクロヘキセニレン基を有する化合物の含有量を少なくすることが好ましく、シクロヘキセニレン基を有する化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して10質量%以下とすることが好ましく、8質量%以下とすることが好ましく、質量5%以下とすることがより好ましく、3質量%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

【0192】

粘度の改善及びT_{NI}の改善を重視する場合には、水素原子がハロゲンに置換されていてもよい2-メチルベンゼン-1,4-ジイル基を分子内に持つ化合物の含有量を少なくすることが好ましく、前記2-メチルベンゼン-1,4-ジイル基を分子内に持つ化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して10%以下とすることが好ましく、8%以下とすることが好ましく、5%以下とすることがより好ましく、3%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

20

【0193】

本願において実質的に含有しないとは、意図せずに含有する物を除いて含有しないという意味である。

【0194】

本発明の液晶組成物に含有される液晶化合物が、側鎖としてアルケニル基を有する場合、前記アルケニル基がシクロヘキサに結合している場合には当該アルケニル基の炭素原子数は2~5であることが好ましく、前記アルケニル基がベンゼンに結合している場合には当該アルケニル基の炭素原子数は4~5であることが好ましく、前記アルケニル基の不飽和結合とベンゼンは直接結合していないことが好ましい。

30

【0195】

本発明の液晶組成物は、実用的な電気光学特性、及び、液晶素子にした場合の密着性を損なわない範囲で、酸化防止剤、光安定剤、重合禁止剤、連鎖移動剤等の公知の種々の添加剤を含有していても良い。また、液晶素子に色を付与する、あるいは、色を制御するために用いる色素及び顔料、各種機能を付与するために用いるキラル化合物、粒子径が1μm未満の粒子等を含有しても良い。

40

【0196】

本発明に係る液晶組成物、すなわち液晶層において重合体5を除く成分の総量に対しての、一般式(IIa)、一般式(IIb)、一般式(IIc)及び一般式(L)で表される化合物の合計の、好ましい含有量の下限値は50質量%であり、60質量%以上であり、70%以上であり、上限値は100質量%であり、98質量%であり、95質量%であり、90質量%である。

【0197】

本発明に係る液晶組成物に含まれる非重合性液晶化合物の総量に対しての、一般式(IIa)及び一般式(L)で表される化合物の合計の、好ましい含有量の下限値は50質量%であり、60質量%以上であり、70%以上であり、上限値は100質量%であり、9

50

8 質量%であり、95 質量%であり、90 質量%である。

(重合体)

本発明の重合体は、重合性化合物の重合により形成されたポリマーネットワーク構造を有している。より具体的には、重合性化合物として、メソゲン性骨格を有する重合性化合物を用いることが好ましい。

【0198】

重合性化合物は、電圧無印加時の液晶組成物の配向を制御するために有効な化合物であり、メソゲン性骨格を有する重合性化合物であればよく、前記化合物単独では、液晶性を示さなくてもよい。

【0199】

例えば、Handbook of Liquid Crystals (D. Demus, J. W. Goodby, G. W. Gray, H. W. Spiess, V. Villi 編集、Wiley-VCH社発行、1998年)、季刊化学総説No. 22、液晶の化学(日本化学会編、1994年)、あるいは、特開平7-294735号公報、特開平8-3111号公報、特開平8-29618号公報、特開平11-80090号公報、特開平11-116538号公報、特開平11-148079号公報、等に記載されているような、1,4-フェニレン基1,4-シクロヘキレン基等の構造が複数繋がったメソゲンと呼ばれる剛直な部位と、ビニル基、アクリル基、(メタ)アクリル基といった重合性官能基を2つ以上有する棒状重合性液晶化合物、あるいは特開2004-2373号公報、特開2004-99446号公報に記載されているようなマレイミド基を有する2つ以上の重合性基を有する棒状重合性液晶化合物が挙げられる。中でも、2つ以上の重合性基を有する棒状液晶化合物が、ポリマーネットワークを形成する液晶素子の電圧無印加時の液晶組成物の配向を制御しやすく好ましい。

【0200】

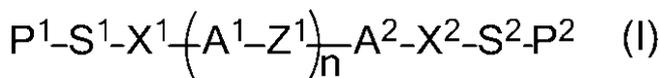
本発明の重合体(但し、自発配向剤が重合性基を有する場合は自発配向剤を除く)を形成する重合性化合物の割合は、複合液晶組成物全体に対して、1質量%から30質量%の範囲であることが好ましい。より好ましくは、重合性化合物の割合の上限は、複合液晶組成物全体に対して20質量%であることが好ましく、15質量%であることが好ましく、10質量%であることが好ましく、9質量%であることが好ましい。また、より好ましくは、重合性化合物の割合の下限は、複合液晶組成物全体に対して1.5質量%であることが好ましく、3質量%であることが好ましく、4質量%であることが好ましく、5質量%であることが好ましく、6質量%であることが好ましい。

【0201】

本発明のメソゲン性骨格を有する重合性化合物として、以下の一般式(I)で表される化合物を1種または2種以上含有することが好ましい。

【0202】

【化55】



【0203】

(式中、P¹、P²は各々独立して重合性基を表し、S¹、S²は各々独立してスペーサー基又は単結合を表し、X¹、X²は、S¹又はS²への結合手を左端の結合として表記する場合において、各々独立して、-O-、-S-、-OCH₂-、-CO-、-COO-、-OCO-、-CO-S-、-S-CO-、-O-CO-O-、-CO-NH-、-NH-CO-、-SCH₂-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CF₂S-、-SCF₂-、-CH=CH-COO-、-CH=CH-OCO-、-COO-CH=CH-、-OCO-CH=CH-、-COO-CH₂CH₂-、-OCO-CH₂CH₂-、-COO-CH₂-、-OCO-

10

20

30

40

50

CH₂ -、 - CH = CH -、 - N = N -、 - CH = N - N = CH -、 - CF = CF -、 - C C - 又は単結合を表し(ただし、P¹ - S¹ - X¹ - 及び P² - S² - X² - で表される基中には - O - O - を含まない。)、

Z¹ は、 - O -、 - S -、 - OCH₂ -、 - CH₂O -、 - CO -、 - COO -、 - OCO -、 - CO - S -、 - S - CO -、 - O - CO - O -、 - CO - NH -、 - NH - CO -、 - SCH₂ -、 - CH₂S -、 - CF₂O -、 - OCF₂ -、 - CF₂S -、 - SCF₂ -、 - CH = CH - COO -、 - CH = CH - OCO -、 - COO - CH = CH -、 - OCO - CH = CH -、 - COO - R^{Z1} -、 - OCO - R^{Z1} -、 - R^{Z1} - COO -、 - R^{Z1} - OCO -、 - COO - CH₂ -、 - OCO - CH₂ -、 - CH₂ - COO -、 - CH₂ - OCO -、 - CH = CH -、 - CH₂CH₂ -、 - N = N -、 - CH = N - N = CH -、 - CF = CF -、 - C C - 又は単結合を表し(ただし、- R^{Z1} - は、炭素原子数 2 ~ 6 のアルキレン基を表す。)、Z¹ が複数存在する場合それらは各々同一であっても異なっても良く、

10

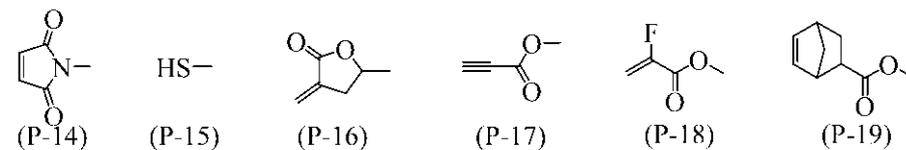
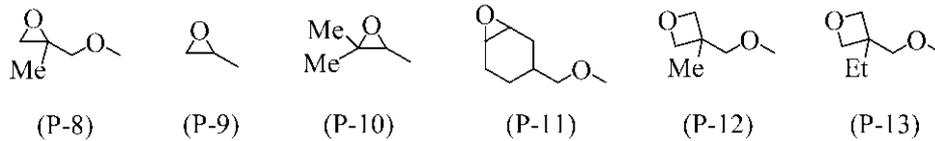
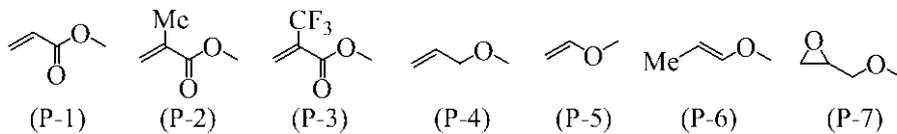
A¹、A² は各々独立して、2 価の芳香環、脂環、複素環及び縮合環から選択される基を表し、A¹ が複数存在する場合それらは各々同一であっても異なっても良く、n は各々独立して 1 ~ 9 の整数を表す。)

ここで、前記一般式 (I) 中、P¹、P² で表される重合性基は、下記式 (P - 1) ~ 式 (P - 20)

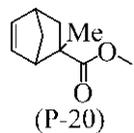
【 0 2 0 4 】

【 化 5 6 】

20



30



【 0 2 0 5 】

40

が好ましく、これらの重合性基のうち、重合性および保存安定性を高める観点から、式 (P - 1)、式 (P - 2)、式 (P - 7)、式 (P - 1 2)、又は式 (P - 1 3) が好ましく、式 (P - 1)、式 (P - 2)、式 (P - 7) がより好ましい。

【 0 2 0 6 】

前記一般式 (I) 中、S¹、S² は各々独立してスペーサー基又は単結合を表し、スペーサー基は、炭素原子数 1 ~ 1 8 のアルキレン基を表し(該アルキレン基は 1 つ以上のハロゲン原子、CN 基、炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、または前述の重合性基を有する炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基により置換されていても良く、この基中に存在する 1 つの CH₂ 基又は隣接していない 2 つ以上の CH₂ 基はそれぞれ相互に独立して、酸素原子が相互に直接結合しない形で、 - O -、 - S -、 - NH -、 - N (CH₃) -、 - CO -、 - C

50

H(OH)-、CH(COOH)、-COO-、-OCO-、-OCOO-、-SCO-、-COS-又は-C-C-により置き換えられていても良い。これらのスペーサー基のうち、液晶性を発現するの観点から、炭素原子数2~8の直鎖アルキレン基、フッ素原子で置換された炭素数2~6のアルキレン基、アルキレン基の一部が-O-で置き換えられた炭素原子数4~14のアルキレン基が好ましい。

【0207】

前記一般式(I)中、 X^1 、 X^2 で表される基は、各々独立して単結合、-O-、-S-、-CO-、-COO-、-OCO-から選択される基が好ましい。

【0208】

ただし、前記一般式(I)中、 $P^1-S^1-X^1$ 及び $P^2-S^2-X^2$ で表される基中には-O-O-結合を含まない。

10

【0209】

前記一般式(I)中、 Z^1 で表される基は、 Z^1 が複数存在する場合それらは各々同一であっても異なっても良く、-OCH₂-、-CH₂O-、-CO-、-COO-、-OCO-、-O-CO-O-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CH=CH-COO-、-CH=CH-OCO-、-COO-CH=CH-、-OCO-CH=CH-、-COO-(CH₂CH₂)_m-、-OCO-(CH₂CH₂)_m-、-(CH₂CH₂)_m-COO-、-(CH₂CH₂)_m-OCO-、-COO-CH₂-、-OCO-CH₂-、-CH₂-COO-、-CH₂-OCO-、-CH=CH-、-CH₂CH₂-、-C-C-又は単結合から選択される基が好ましいが、駆動電圧を低下させるためにはmは1~3が好ましく、液晶性を発現させるためには Z^1 のうち少なくとも一つは、-OCH₂-、-CH₂O-、-COO-、-OCO-、-O-CO-O-、-CF₂O-、-OCF₂-、-COO-CH₂CH₂-、-OCO-CH₂CH₂-、-CH₂CH₂-COO-、-CH₂CH₂-OCO-又は単結合から選択される基であることが好ましい。

20

【0210】

前記一般式(I)中、 A^1 、 A^2 は各々独立して、2価の芳香環、脂環、複素環及び縮合環から選択される基を表し、具体的には下記(a)~(c)から選択される基が好ましい。なお、 A^1 が複数存在する場合それらは各々同一であっても異なっても良い。

(a) トランス-1,4-シクロヘキシレン基(この基中に存在する1つのメチレン基又は隣接していない2つ以上のメチレン基は-O-又は-S-に置き換えられてもよい。)

30

(b) フェニレン基(この基中に存在する1個の-CH=又は隣接していない2個以上の-CH=は窒素原子に置き換えられてもよい。)

(c) シクロヘキセニレン基、ピシクロ(2.2.2)オクチレン基、ピペリジン基、ナフタレン基、デカヒドロナフタレン基及びテトラヒドロナフタレン基

(上記の基(a)、基(b)及び基(c)の基中に存在する1つ又は2つ以上の水素原子は、それぞれ独立してフッ素原子、塩素原子、炭素原子数1~8のアルキル基、炭素原子数1~8のハロゲン化アルキル基、炭素原子数1~8のハロゲン化アルコキシ基、又は炭素原子数1~8のアルコキシ基に置換されていても良い。)

前記一般式(I)中、nは1~9の整数を表すが、nは1~5が好ましく、nは1~4がより好ましく、nは1~3が特に好ましい。

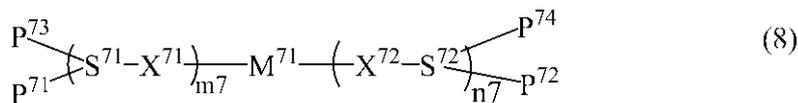
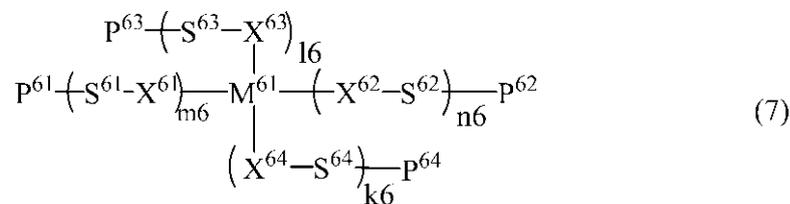
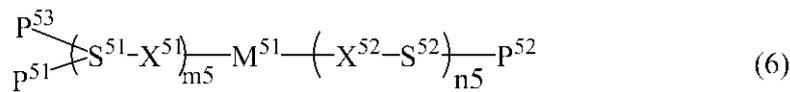
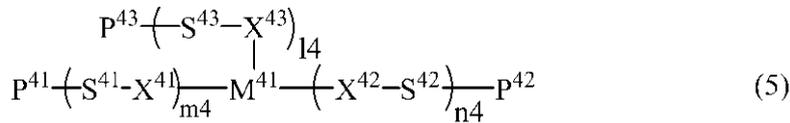
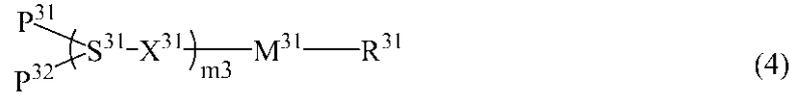
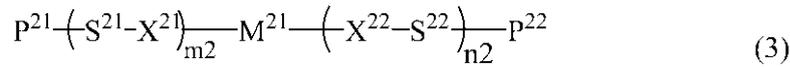
40

【0211】

一般式(I)以外の他のメソゲン性骨格を有する重合性化合物としては、下記一般式(2)、(4)~(8)で表される化合物が挙げられる。また、一般式(I)のより具体的な式化合物として、一般式(3)で表される化合物があげられる。

【0212】

【化 5 7】



【0 2 1 3】

上記式(2)~(8)中、P¹¹~P⁷⁴は、前記式(P-1)~式(P-20)から選択される重合性基を表すが、これらの重合性基のうち、重合性および保存安定性を高める観点から、式(P-1)、式(P-2)、式(P-7)、式(P-12)、又は式(P-13)が好ましく、式(P-1)、式(P-7)、式(P-12)がより好ましい。

【0 2 1 4】

X¹¹~X⁷²は各々独立して-O-、-S-、-OCH₂-、-CH₂O-、-CO-、-COO-、-OCO-、-CO-S-、-S-CO-、-O-CO-O-、-CO-NH-、-NH-CO-、-SCH₂-、-CH₂S-、-CF₂O-、-OCF₂-、-CF₂S-、-SCF₂-、-CH=CH-COO-、-CH=CH-OCO-、-COO-CH=CH-、-OCO-CH=CH-、-COO-CH₂CH₂-、-OCO-CH₂CH₂-、-CH₂CH₂-COO-、-CH₂CH₂-OCO-、-COO-CH₂-、-OCO-CH₂-、-CH₂-COO-、-CH₂-OCO-、-CH=CH-、-N=N-、-CH=N-N=CH-、-CF=CF-、-C=C-又は単結合を表すが、X¹¹~X⁷²が複数存在する場合それらは各々同一であっても異なっても良く(ただし、各P-(S-X)-結合には-O-O-を含まない。)、特に単結合、-O-、-S-、-CO-、-COO-、-OCO-から選択される基が好ましい。

【0 2 1 5】

S¹¹~S⁷²は各々独立してスペーサー基又は単結合を表す。スペーサー基としては、炭素原子数1~18のアルキレン基(該アルキレン基は1つ以上のハロゲン原子、CN基

10

20

30

40

50

、炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、または前述の重合性基を有する炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基により置換されていても良く、この基中に存在する 1 つの CH₂ 基又は隣接していない 2 つ以上の CH₂ 基はそれぞれ相互に独立して、酸素原子が相互に直接結合しない形で、- O -、- S -、- NH -、- N (CH₃) -、- CO -、- CH (OH) -、CH (COOH)、- COO -、- OCO -、- OCOO -、- SCO -、- COS - 又は - C C - により置き換えられていても良い) であることが好ましい。S¹¹ ~ S⁷² が複数存在する場合それらは各々同一であっても異なっても良い。これらのスペーサー基のうち、液晶性を発現するの観点から、炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖アルキレン基、フッ素原子で置換された炭素数 2 ~ 6 のアルキレン基、アルキレン基の一部が - O - で置き換えられた炭素原子数 4 ~ 14 のアルキレン基が好ましい。

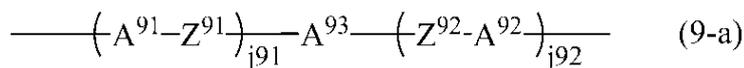
10

【 0 2 1 6 】

M¹¹、M²¹、M³¹、M⁵¹、M⁷¹ は、各々独立して、下記一般式 (9 - a) で表されるメソゲン基

【 0 2 1 7 】

【 化 5 8 】



【 0 2 1 8 】

(一般式 (9 - a) 中、A⁹¹、A⁹²、A⁹³ は各々独立して少なくとも環構造を 1 つ以上有する 2 価の基であり、前記 2 価の基は 1, 2 - シクロプロピレン基、1, 3 - シクロブチレン基、2, 5 - シクロペンチレン基、オクタヒドロ - 4, 7 - メタノ - 1 H - インデン - 1, 5 - ジイル基、オクタヒドロ - 4, 7 - メタノ - 1 H - インデン - 1, 6 - ジイル基、オクタヒドロ - 4, 7 - メタノ - 1 H - インデン - 2, 5 - ジイル基、トリシクロ [3 . 3 . 1 . 1^{3,7}] - 1, 3 - ジイル基、1, 4 - フェニレン基、1, 4 - シクロヘキシレン基、1, 4 - シクロヘキセニル基、テトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイル基、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル基、テトラヒドロチオピラン - 2, 5 - ジイル基、1, 4 - ビシクロ (2, 2, 2) オクチレン基、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基、ピリジン - 2, 5 - ジイル基、ピリミジン - 2, 5 - ジイル基、ピラジン - 2, 5 - ジイル基、チオフェン - 2, 5 - ジイル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル基、ナフチレン - 1, 4 - ジイル基、ナフチレン - 1, 5 - ジイル基、ナフチレン - 1, 6 - ジイル基、ナフチレン - 2, 6 - ジイル基、フェナントレン - 2, 7 - ジイル基、9, 10 - ジヒドロフェナントレン - 2, 7 - ジイル基、ベンゾチアゾール基、1, 2, 3, 4, 4a, 9, 10a - オクタヒドロフェナントレン - 2, 7 - ジイル基、ベンゾ [1, 2 - b : 4, 5 - b'] ジチオフェン - 2, 6 - ジイル基、ベンゾ [1, 2 - b : 4, 5 - b'] ジセレノフェン - 2, 6 - ジイル基、[1] ベンゾチエノ [3, 2 - b] チオフェン - 2, 7 - ジイル基、[1] ベンゾセレノフェノ [3, 2 - b] セレノフェン - 2, 7 - ジイル基、又はフルオレン - 2, 7 - ジイル基から選ばれる基を表すが、これらの基は無置換又は 1 つ以上の L¹ によって置換されても良いが、A⁹¹ 及び / 又は A⁹² が複数現れる場合は各々同一であっても異なっても良く、

20

30

40

Z⁹¹ 及び Z⁹² は各々独立して - O -、- S -、- OCH₂ -、- CH₂O -、- CH₂CH₂ -、- CO -、- COO -、- OCO -、- CO - S -、- S - CO -、- O - C O - O -、- CO - NH -、- NH - CO -、- SCH₂ -、- CH₂S -、- CF₂O -、- OCF₂ -、- CF₂S -、- SCF₂ -、- CH = CH - COO -、- CH = CH - OCO -、- COO - CH = CH -、- OCO - CH = CH -、- COO - CH₂CH₂ -、- OCO - CH₂CH₂ -、- CH₂CH₂ - COO -、- CH₂CH₂ - OCO -、- COO - CH₂ -、- OCO - CH₂ -、- CH₂ - COO -、- CH₂ - OCO -、- CH = CH -、- N = N -、- CH = N -、- N = CH -、- CH = N - N = CH -、- CF = CF -、- C C - 又は単結合を表すが、Z⁹¹ 及び / 又は Z⁹² が複数現れる場合は各々同一であっても異なっても良く、

50

j_{91} 及び j_{92} は、各々独立して 0 ~ 4 を表すが、 $j_{91} + j_{92}$ は 1 ~ 4 の整数を表し、

L^1 はフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ペンタフルオロスルフラニル基、ニトロ基、イソシアノ基、アミノ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、トリメチルシリル基、ジメチルシリル基、チオイソシアノ基、又は、1 個の $-CH_2-$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ が各々独立して $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-CO-NH-$ 、 $-NH-CO-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-CH=CH-OCO-$ 、 $-COO-CH=CH-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-N=N-$ 、 $-CR^1=N-N=CR^1-$ 、又は $-C-C-$ によって置換されても良い炭素原子数 1 から 20 の直鎖状、分岐状アルキル基を表すが、当該アルキル基中の任意の水素原子はフッ素原子に置換されても良い（なお、 R^1 は水素原子、又は、炭素原子数 1 から 20 のアルキル基を表すが、当該アルキル基は直鎖状であっても分岐状であっても良く、当該アルキル基中の任意の水素原子はフッ素原子に置換されても良く、当該アルキル基中の 1 個の $-CH_2-$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ は各々独立して $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-CO-NH-$ 、 $-NH-CO-$ 又は $-C-C-$ によって置換されても良い。）を表す。

10

【0219】

また、 M^{41} は、前記 A^{91} 、 A^{92} 、 A^{93} として例示した環構造を有する 3 価の有機基であり、 M^{61} は前記 A^{91} 、 A^{92} 、 A^{93} として例示した環構造を有する 4 価の有機基である。

20

【0220】

前記一般式 (2) ~ 一般式 (8) 中、 R^{11} 、 R^{31} はそれぞれ水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、シアノ基、又は、炭素原子数 1 から 20 のアルキル基を表すが、当該アルキル基は直鎖状であっても分岐状であっても良く、当該アルキル基中の任意の水素原子はフッ素原子に置換されても良く、当該アルキル基中の 1 個の $-CH_2-$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ は各々独立して $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-CO-NH-$ 、 $-NH-CO-$ 又は $-C-C-$ によって置換されても良く、

30

$m_1 \sim m_7$ 、 $n_2 \sim n_7$ 、 $l_4 \sim l_6$ 、 k_6 は各々独立して 0 から 5 の整数を表す。

【0221】

前記一般式 (2) ~ 一般式 (8) 中、 $S^{11} \sim S^{72}$ は各々独立してスペーサー基を又は単結合を表し、前記 $S^{11} \sim S^{72}$ で表されるスペーサー基は、炭素原子数 1 ~ 18 のアルキレン基を表し（該アルキレン基は 1 つ以上のハロゲン原子、CN 基、炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基、または重合性官能基を有する炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基により置換されていても良く、この基中に存在する 1 つの CH_2 基又は隣接していない 2 つ以上の CH_2 基はそれぞれ相互に独立して、酸素原子が相互に直接結合しない形で、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-NH-$ 、 $-N(CH_3)-$ 、 $-CO-$ 、 $-CH(OH)-$ 、 $CH(COOH)$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCOO-$ 、 $-SCO-$ 、 $-COS-$ 又は $-C-C-$ により置き換えられていても良い。これらのスペーサー基のうち、配向性の観点から、炭素原子数 2 ~ 8 の直鎖アルキレン基、フッ素原子で置換された炭素数 2 ~ 6 のアルキレン基、アルキレン基の一部が $-O-$ で置き換えられた炭素原子数 5 ~ 14 のアルキレン基が好ましい。また、 $S^{11} \sim S^{72}$ が複数存在する場合それらは各々同一であっても異なっても良い。

40

【0222】

前記一般式 (2) ~ 一般式 (8) 中、 $m_1 \sim m_7$ 、 $n_2 \sim n_7$ 、 $l_4 \sim l_6$ 、 k_6 は各々独立して 0 から 5 の整数を表し、 $m_1 \sim m_7$ 、 $n_2 \sim n_7$ 、 $l_4 \sim l_6$ 、 k_6 は各々独立して 0 または 1 が好ましい。

【0223】

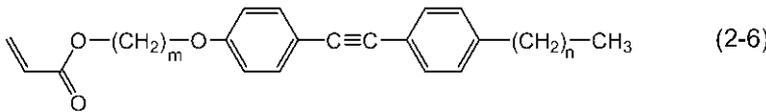
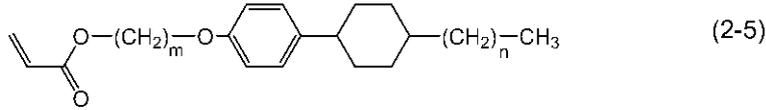
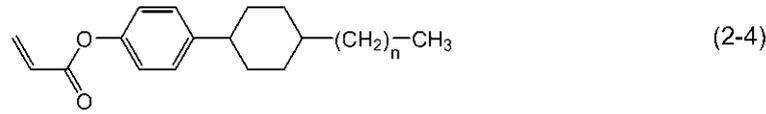
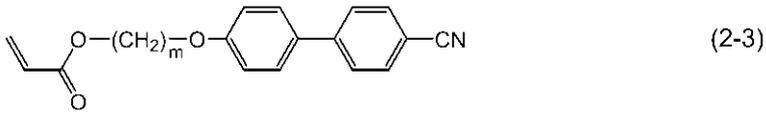
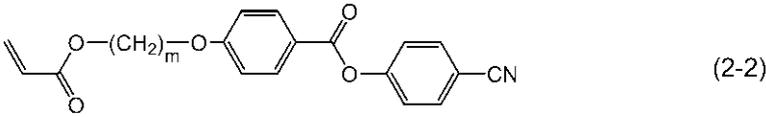
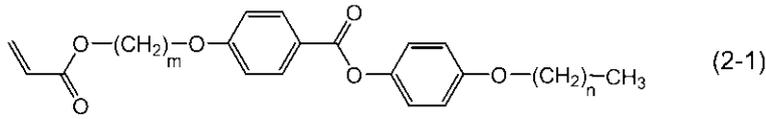
前記一般式 (2) で表される重合性化合物は、具体的には、下記の式 (2-1) から式

50

(2 - 3 0) で表される重合性化合物が好ましい。

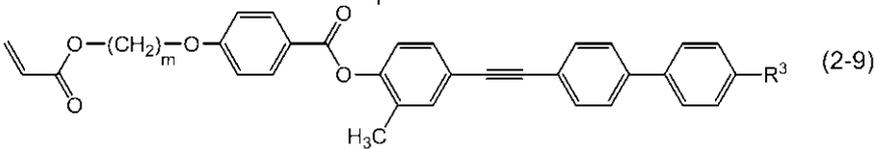
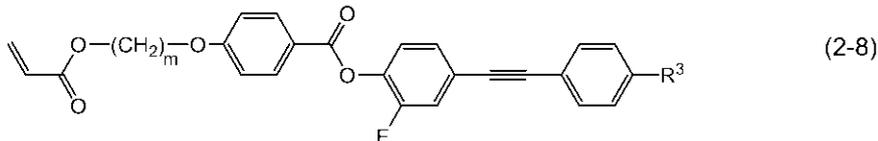
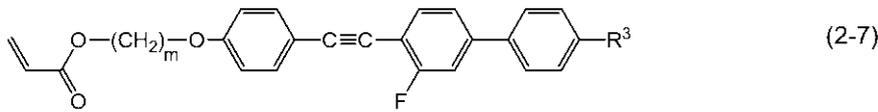
【 0 2 2 4 】

【 化 5 9 】



【 0 2 2 5 】

【 化 6 0 】



【 0 2 2 6 】

10

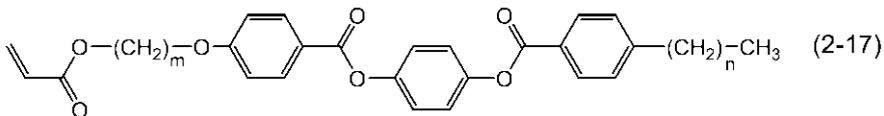
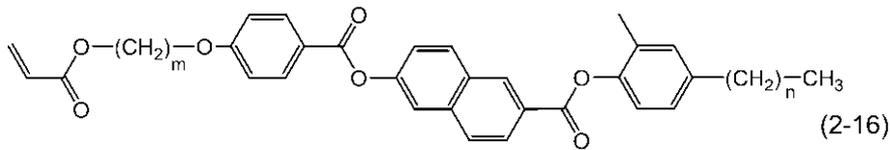
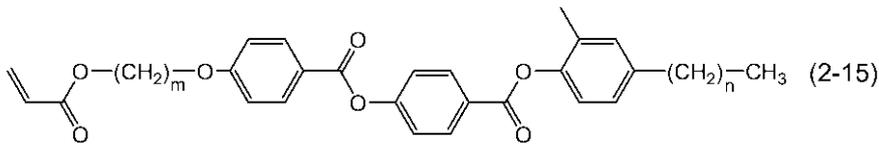
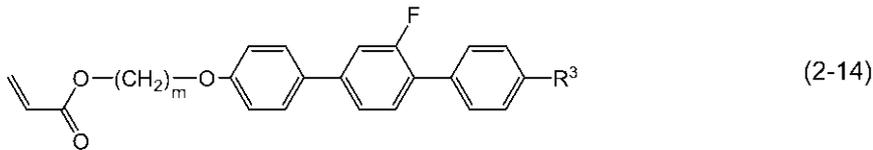
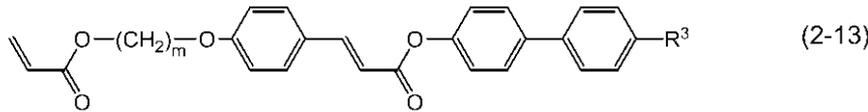
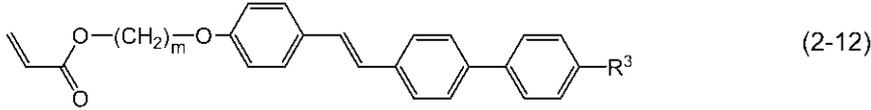
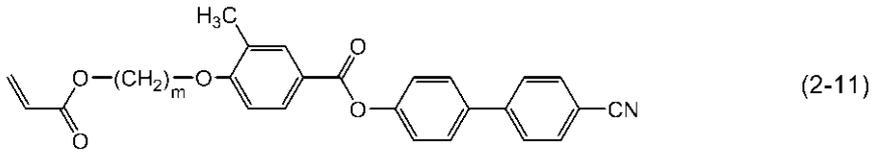
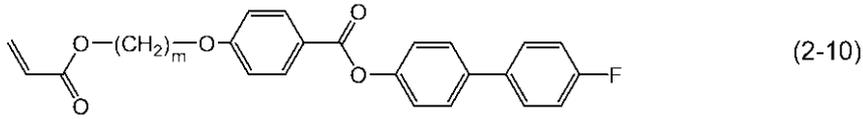
20

30

40

50

【化 6 1】



【 0 2 2 7 】

10

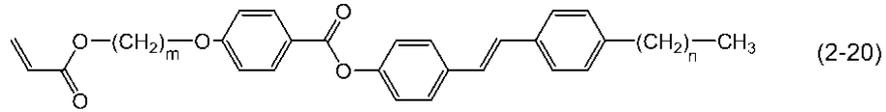
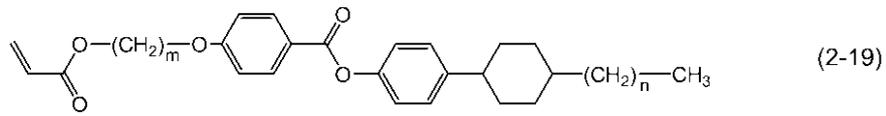
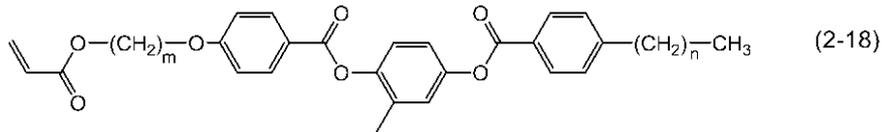
20

30

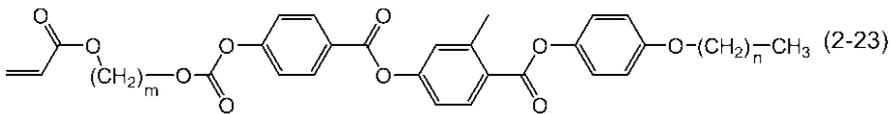
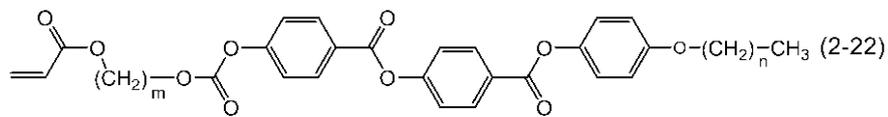
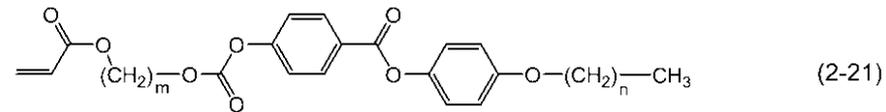
40

50

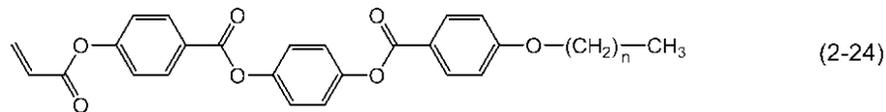
【化 6 2】



10



20



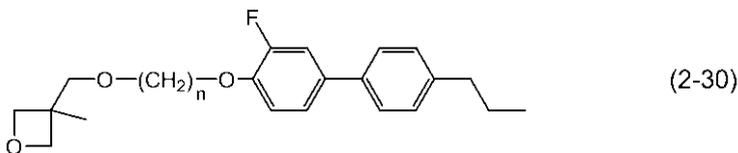
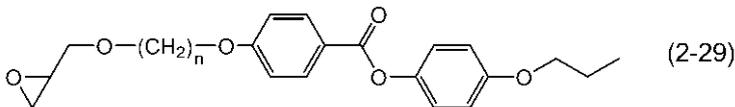
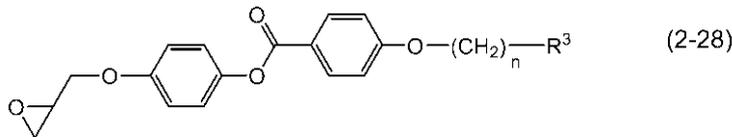
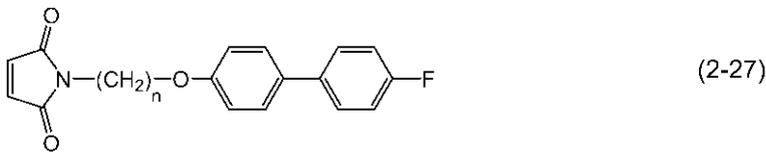
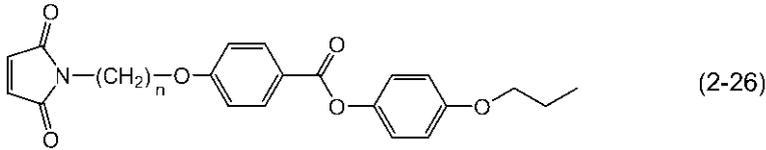
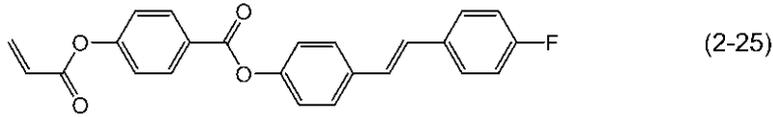
【 0 2 2 8】

30

40

50

【化 6 3】



【 0 2 2 9】

上記式(2-1)~式(2-30)において、 n 、 m は、各々独立して1~10の整数数を表し、 R^1 、 R^2 は、各々独立して水素原子、ハロゲン原子、炭素数1~6のアルキル基、炭素数1~6のアルコキシ基、シアノ基を示す。これらの基が炭素数1~6のアルキル基、あるいは炭素数1~6のアルコキシ基の場合、全部が未置換であるか、あるいは1つまたは2つ以上のハロゲン原子により置換されていてもよい。

【 0 2 3 0】

一般式(2)で表される重合性化合物を用いる場合、一般式(2)で表される重合性化合物の含有量は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、0質量%以上であることが好ましく、5質量%以上であることがより好ましく、ポリマーネットワークの強度を維持する観点から、65質量%以下であることが好ましく、40質量%以下であることが特に好ましい。なお、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量とは、重合体5を形成させる際に用いる複合組成物中に含有する重合性化合物のうち、重合性基を有する K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤を除いた重合性化合物の合計量を意味するものである。

【 0 2 3 1】

前記一般式(3)で表される重合性化合物としては、下記の式(3-1)から式(3-66)で表される重合性化合物が好ましい。

【 0 2 3 2】

10

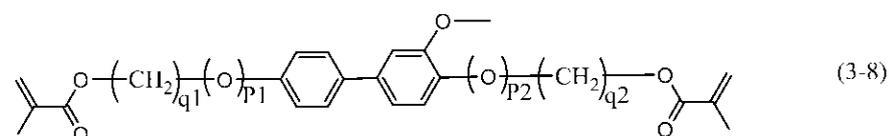
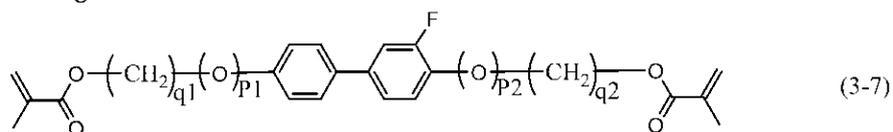
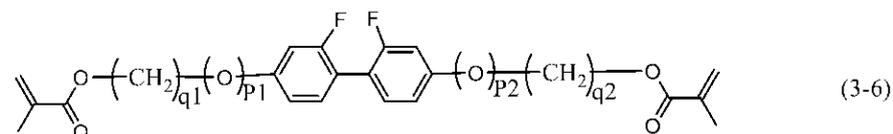
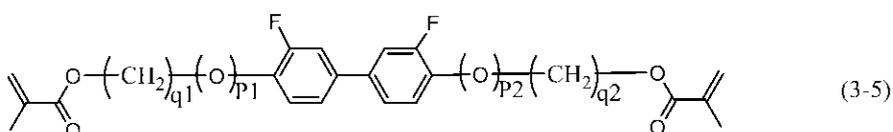
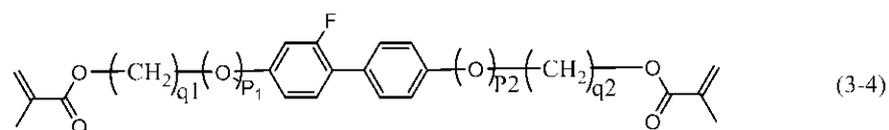
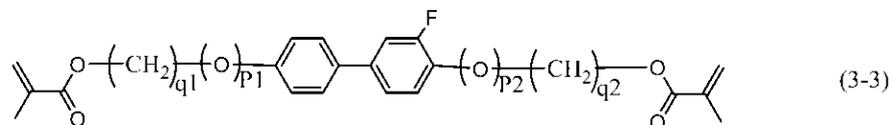
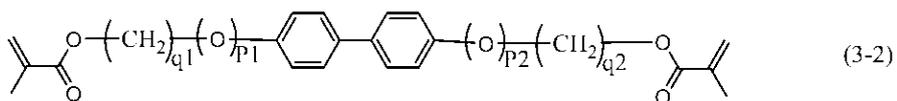
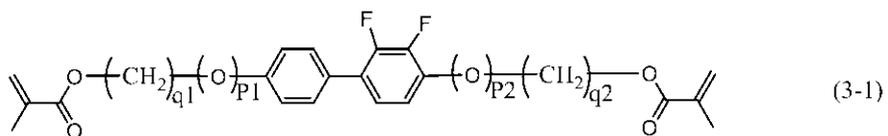
20

30

40

50

【化 6 4】



【 0 2 3 3 】

10

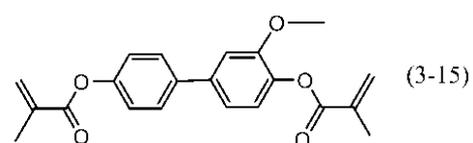
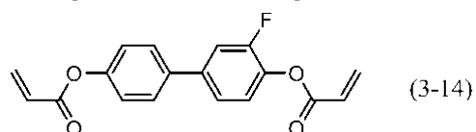
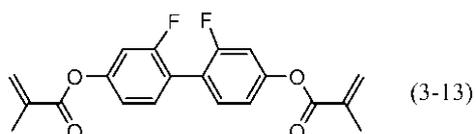
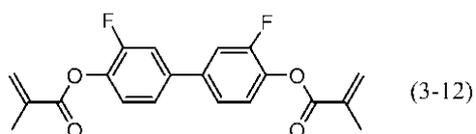
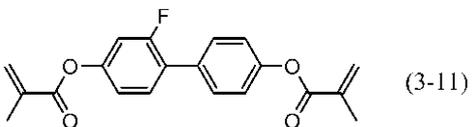
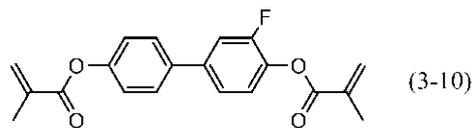
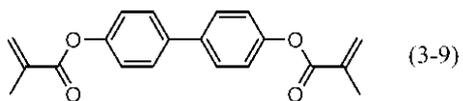
20

30

40

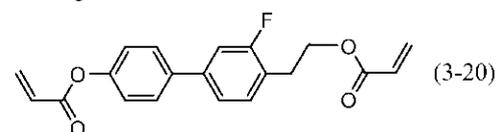
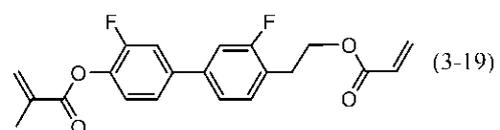
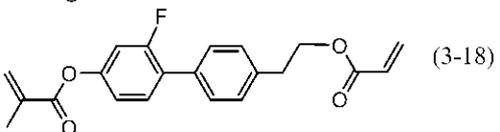
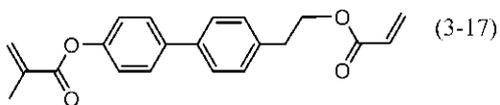
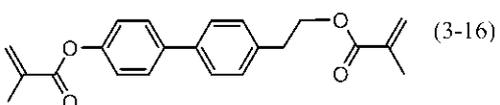
50

【化 6 5】



【 0 2 3 4】

【化 6 6】



【 0 2 3 5】

10

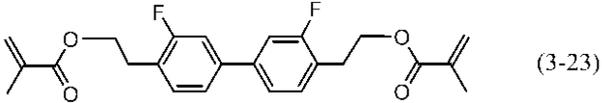
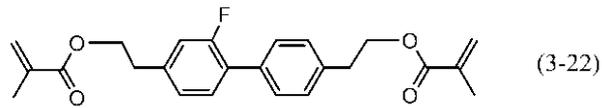
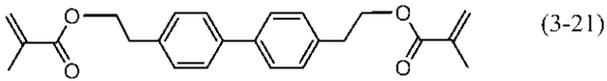
20

30

40

50

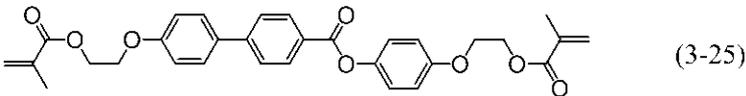
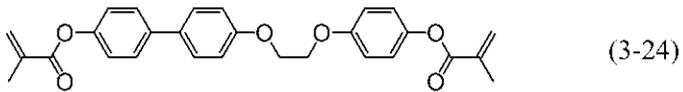
【化67】



10

【0236】

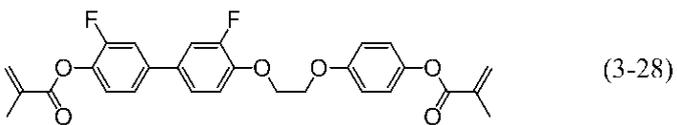
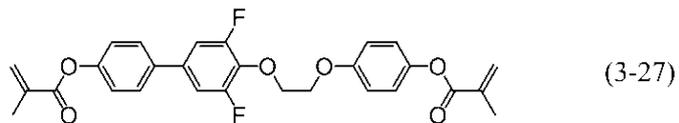
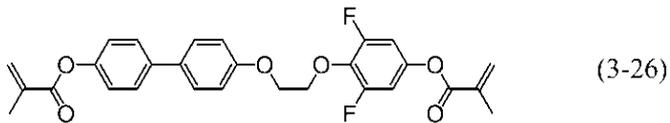
【化68】



20

【0237】

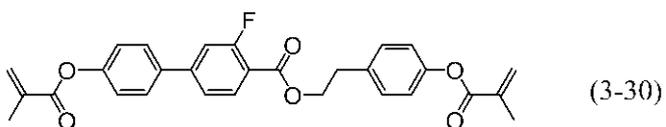
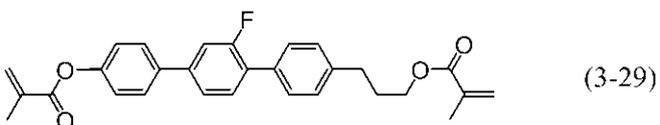
【化69】



30

【0238】

【化70】

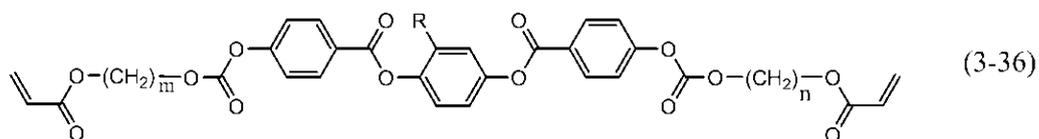
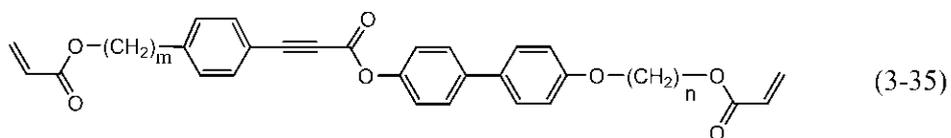
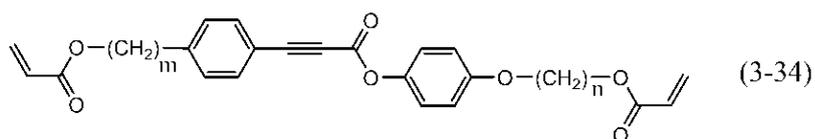
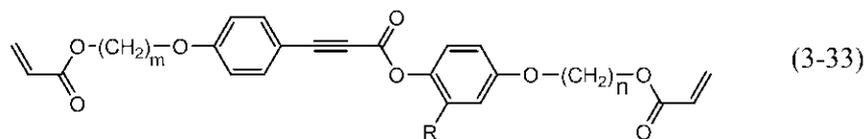
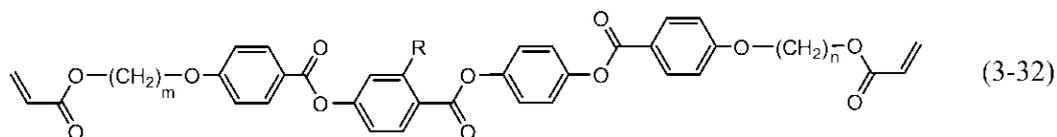
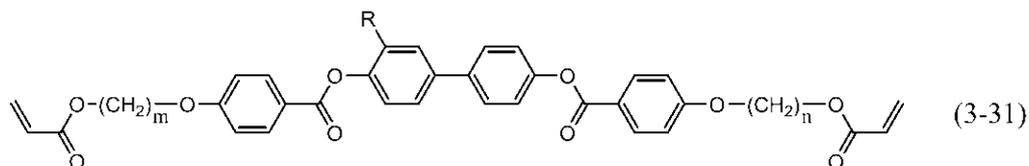


40

【0239】

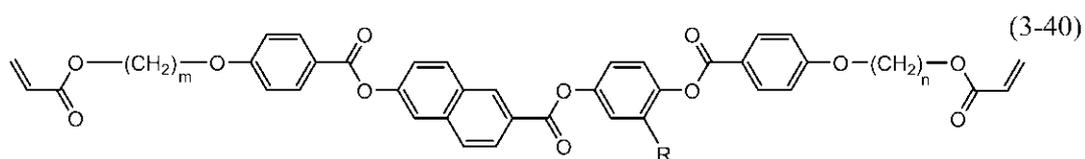
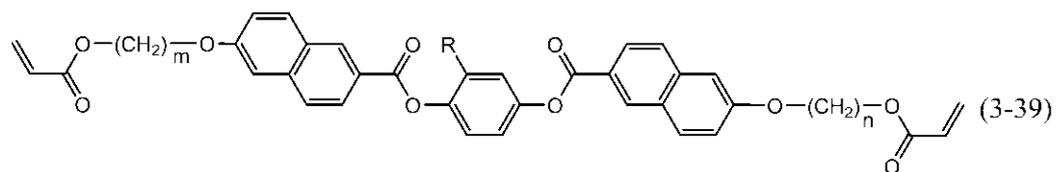
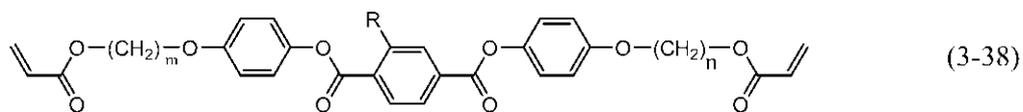
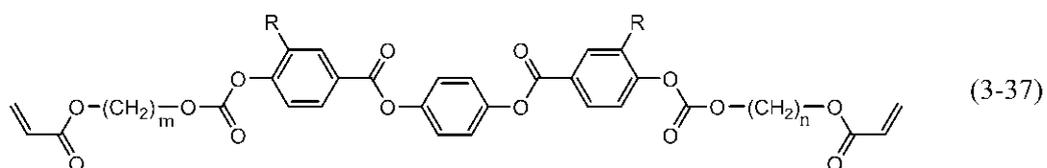
50

【化 7 1】



【 0 2 4 0】

【化 7 2】



【 0 2 4 1】

10

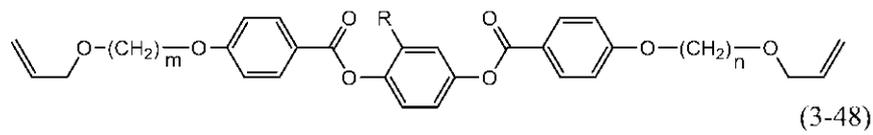
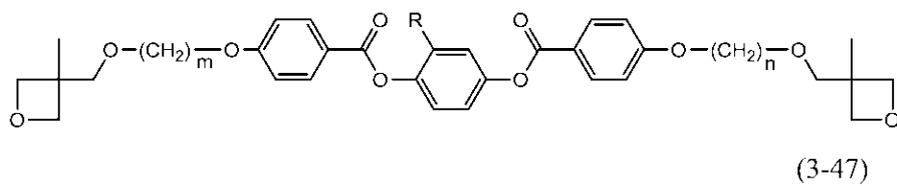
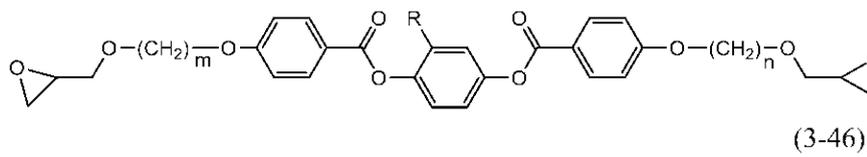
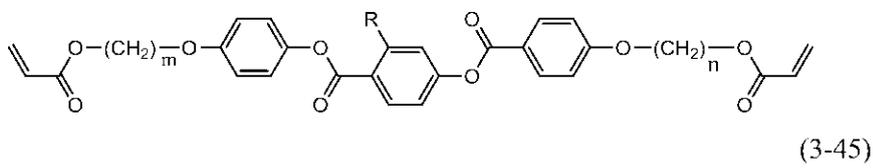
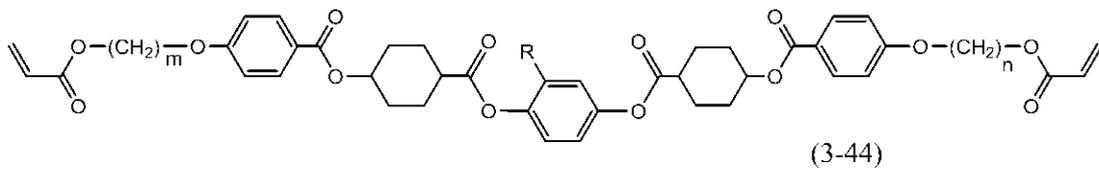
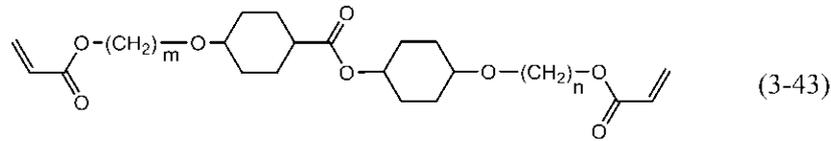
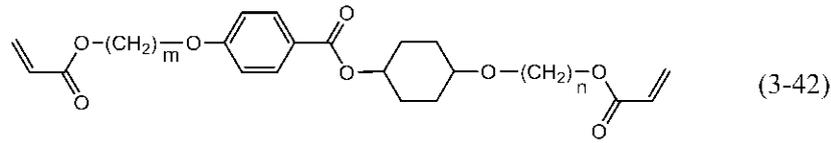
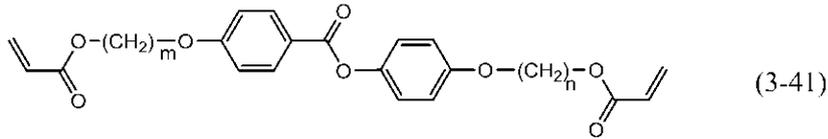
20

30

40

50

【化 7 3】



【 0 2 4 2】

10

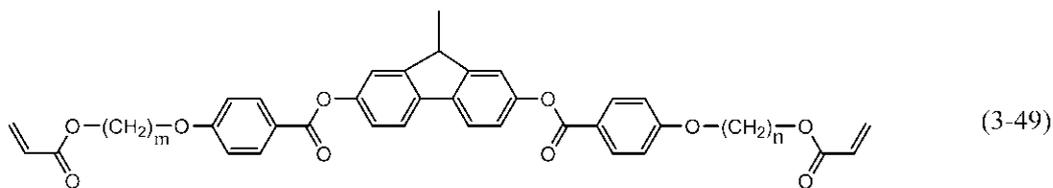
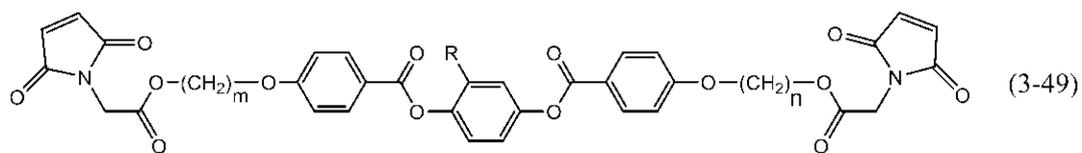
20

30

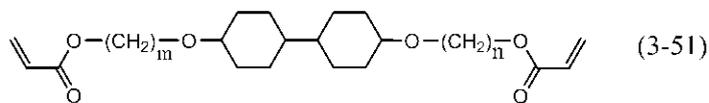
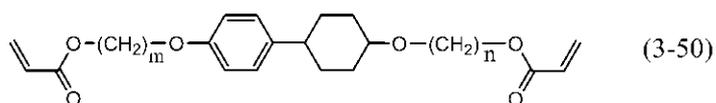
40

50

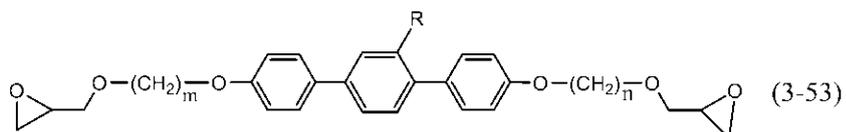
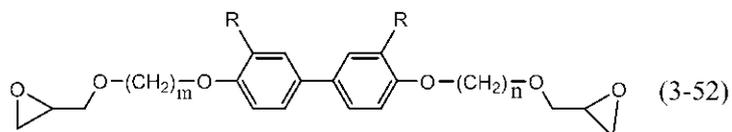
【化 7 4】



10



20



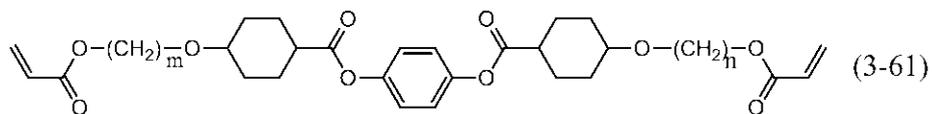
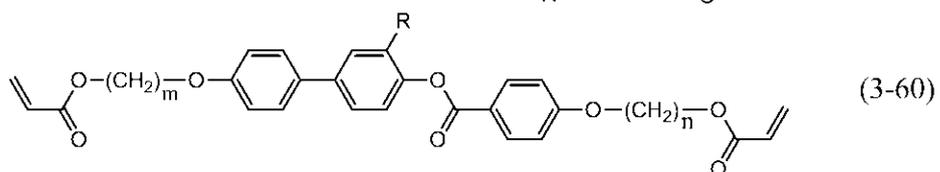
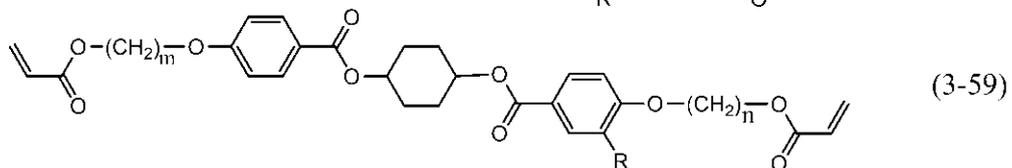
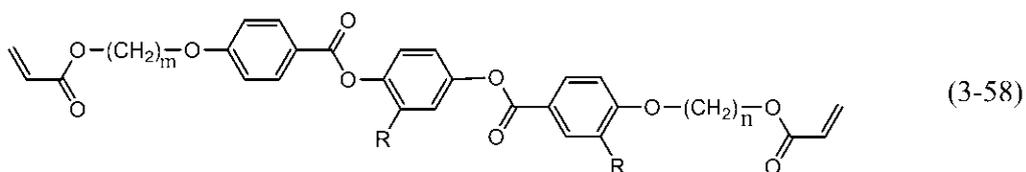
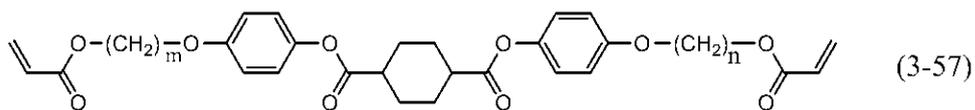
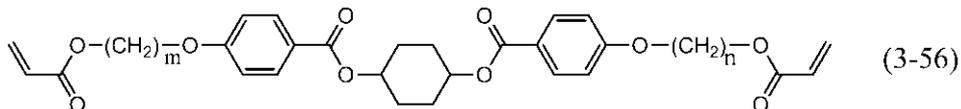
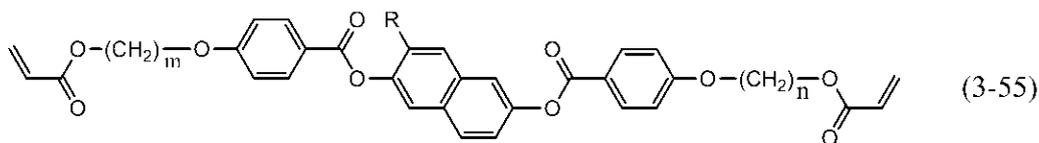
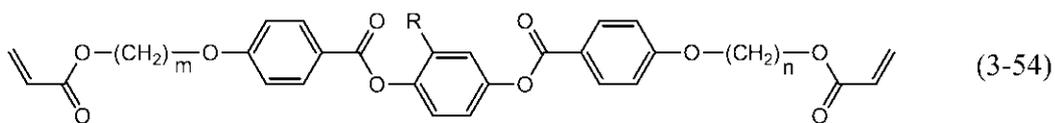
30

【 0 2 4 3】

40

50

【化 7 5】



【 0 2 4 4 】

10

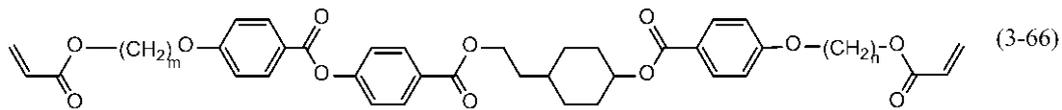
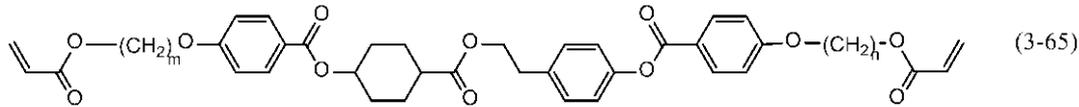
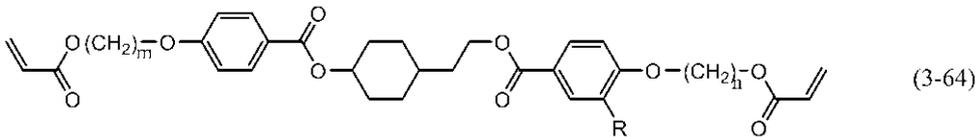
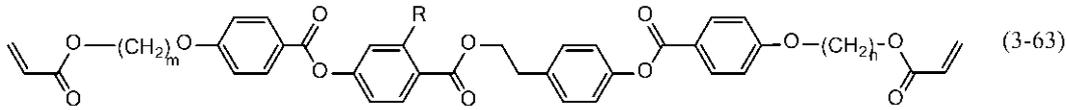
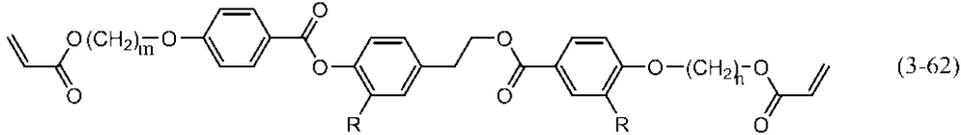
20

30

40

50

【化 7 6】



【 0 2 4 5】

上記式(3-1)~式(3-66)において、n、mは、各々独立して1~10の整数数を表し、p₁及びp₂は各々独立して0又は1を表し、q₁及びq₂は各々独立して1~10の整数数を表し、Rは、各々独立して水素原子、ハロゲン原子、炭素数1~6のアルキル基、炭素数1~6のアルコキシ基、シアノ基を示す。これらの基が炭素数1~6のアルキル基、あるいは炭素数1~6のアルコキシ基の場合、全部が未置換であるか、あるいは1つまたは2つ以上のハロゲン原子により置換されていてもよい。

【 0 2 4 6】

一般式(3)で表される重合性化合物の含有量は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、ネットワーク構造を維持する観点から、1質量%以上であることが好ましく、5質量%以上であることがより好ましく、10質量%異常であることが特に好ましい。また、低電圧化の観点から、90質量%以下であることが好ましく、75質量%以下であることがより好ましく、60質量%以下であることが特に好ましい。

【 0 2 4 7】

上記一般式(4)で表される化合物として具体的には、下記の式(4-1)から式(4-9)で表される化合物が、好ましい。

【 0 2 4 8】

10

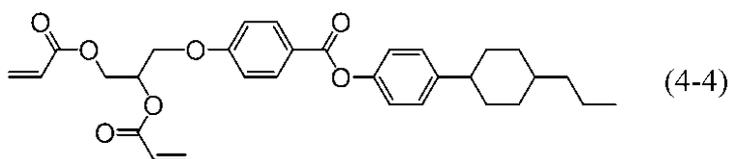
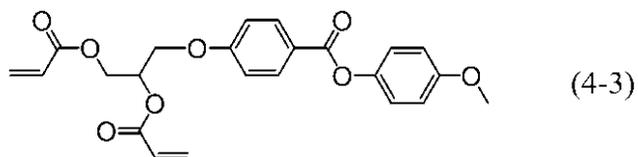
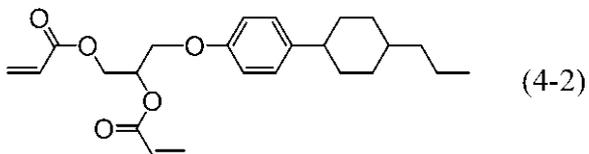
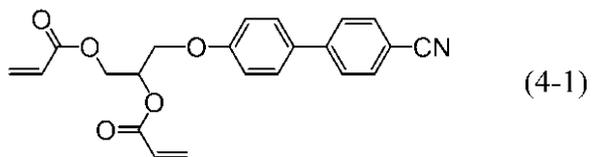
20

30

40

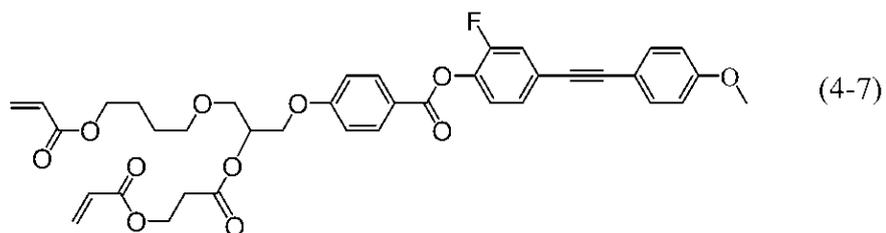
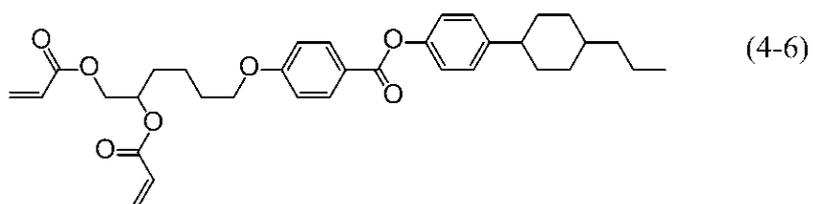
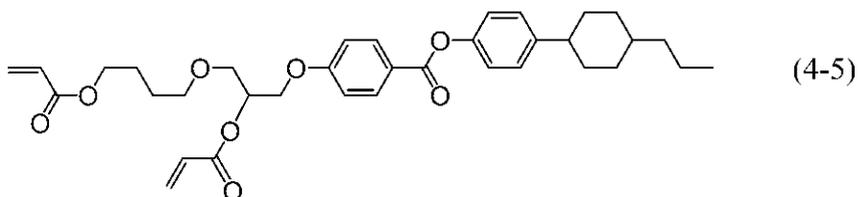
50

【化 7 7】



【 0 2 4 9】

【化 7 8】



【 0 2 5 0】

10

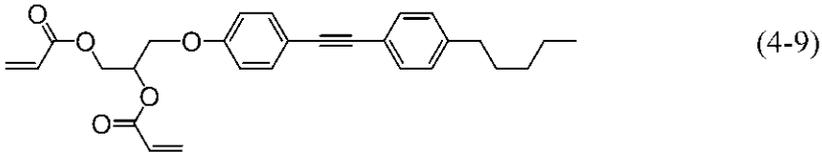
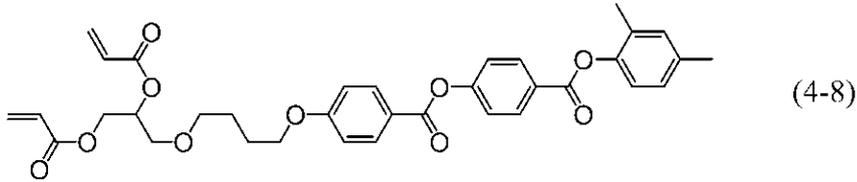
20

30

40

50

【化 7 9】



10

【0 2 5 1】

一般式(4)で表される重合性化合物は、ポリマーネットワーク形成に寄与するのみならず、ポリイミド配向膜不要とする自立配向剤として機能させることができる点から好ましい。前記重合性化合物を用いる場合、前記重合性化合物の含有量は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、垂直配向膜を使用せず、垂直配向性を示すモノマーとして利用する場合、0.2質量%以上であることが好ましく、0.5質量%以上であることがより好ましく、1.0質量%以上であることがさらに好ましく、2.0質量%以上であることが特に好ましい。また、良好な垂直配向性を維持する観点から、15質量%以下であることが好ましく、10質量%以下であることがより好ましく、8質量%以下であることが特に好ましい。

20

【0 2 5 2】

上記一般式(5)で表される化合物として具体的には、下記の式(5-1)から式(5-23)で表される化合物が好ましい。

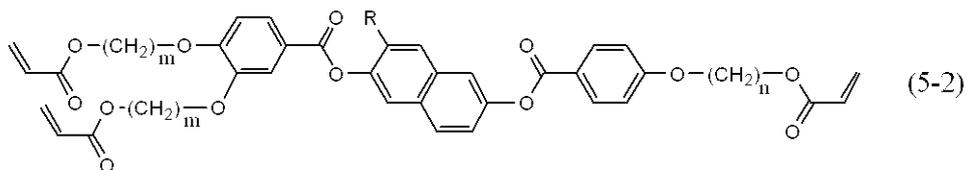
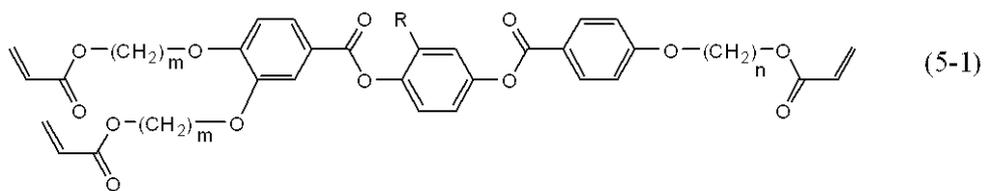
【0 2 5 3】

30

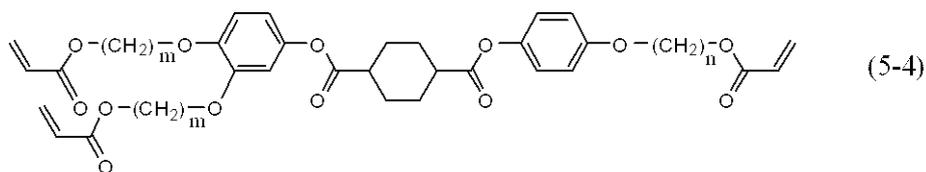
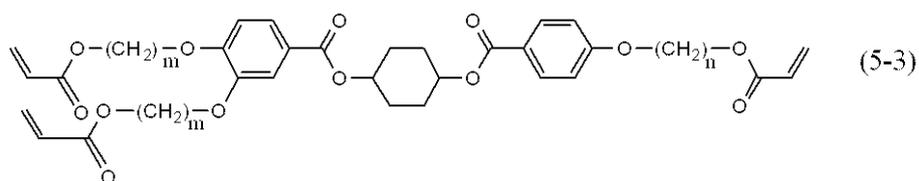
40

50

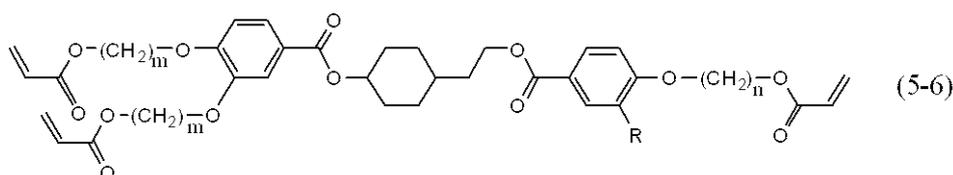
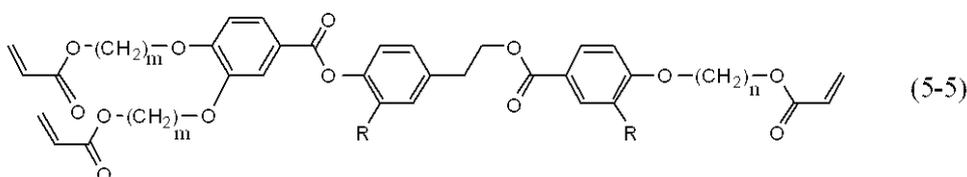
【化 8 0】



10



20



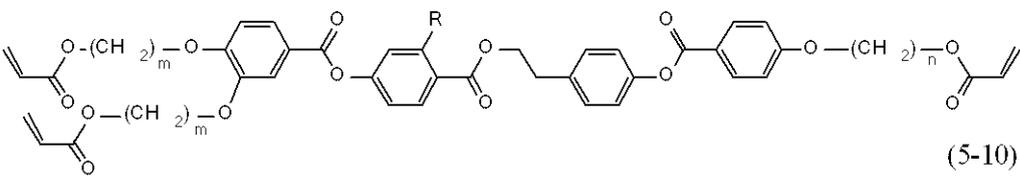
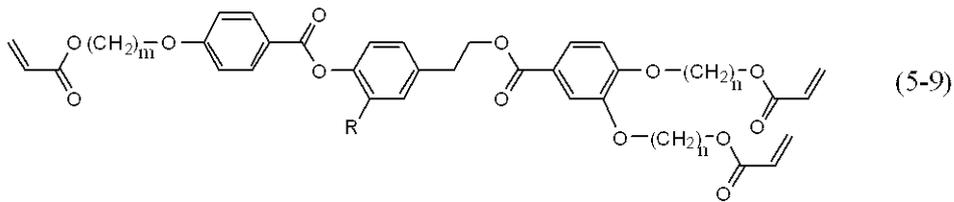
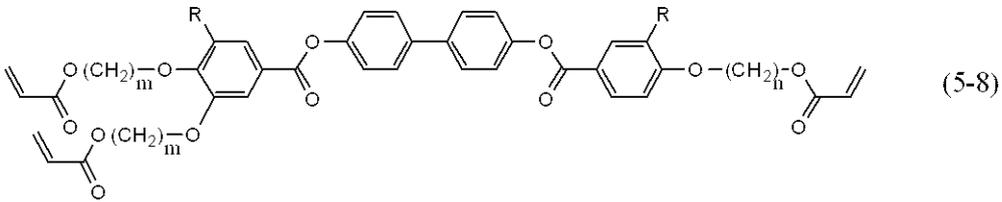
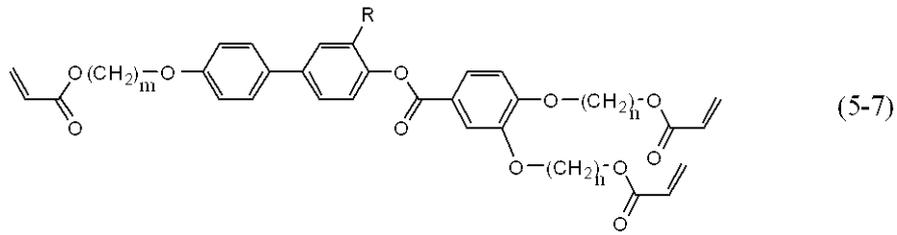
30

【 0 2 5 4】

40

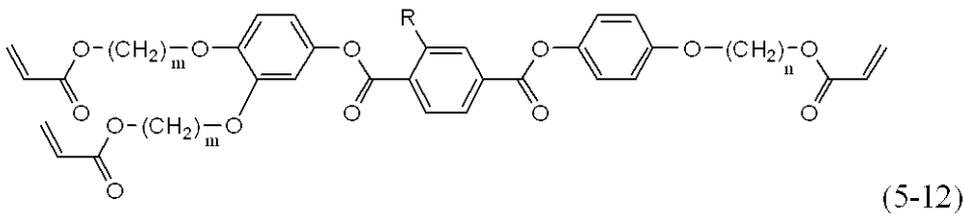
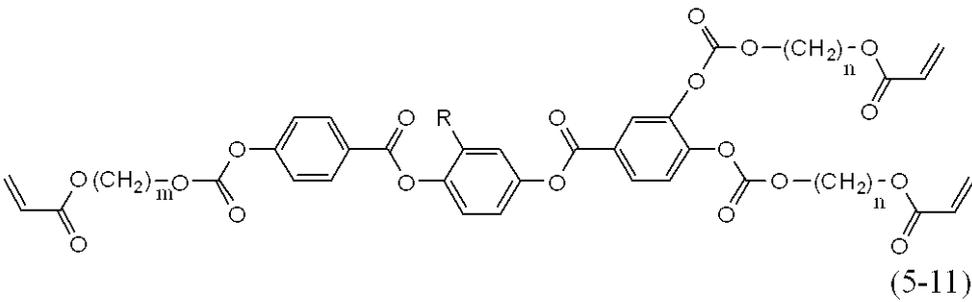
50

【化 8 1】



【 0 2 5 5】

【化 8 2】



【 0 2 5 6】

10

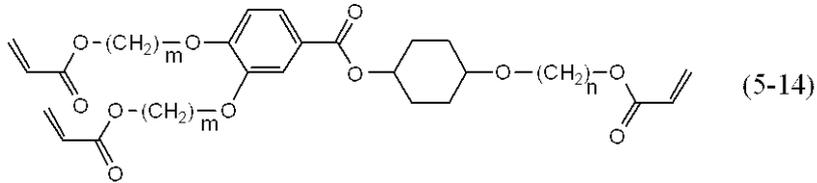
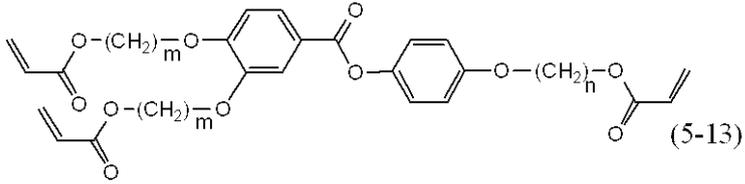
20

30

40

50

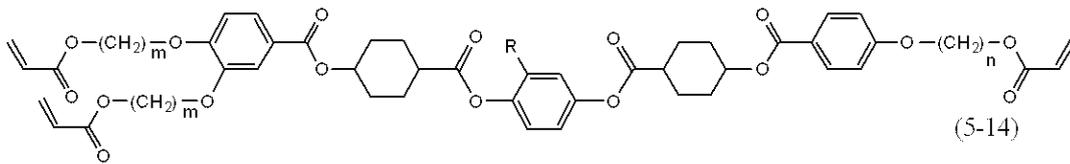
【化 8 3】



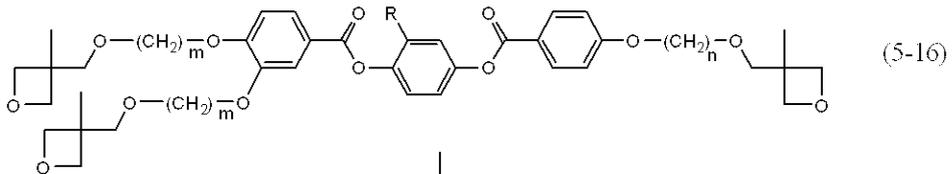
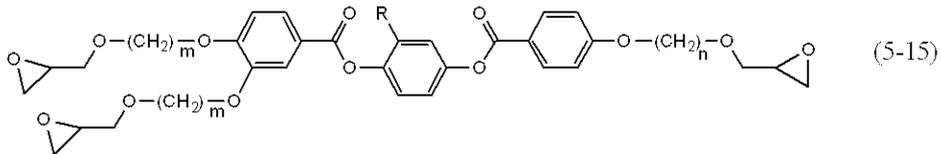
10

【 0 2 5 7】

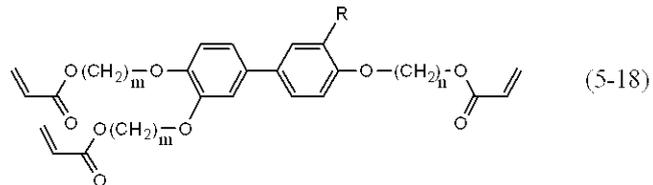
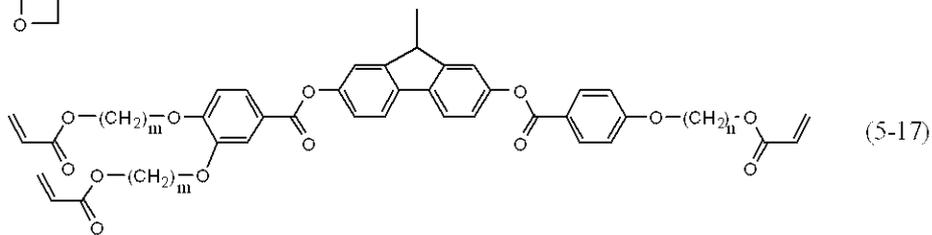
【化 8 4】



20



30

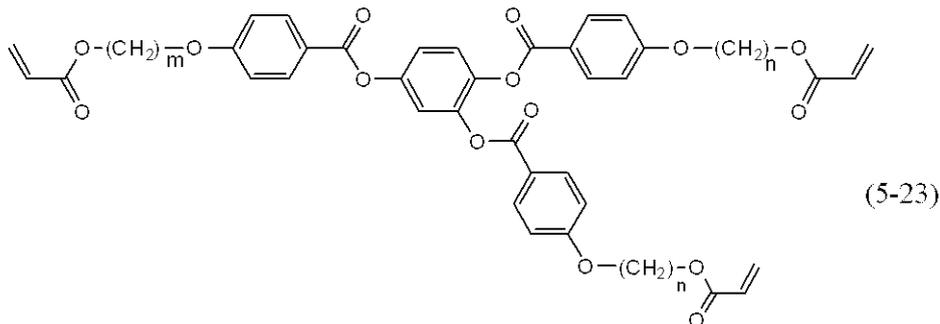
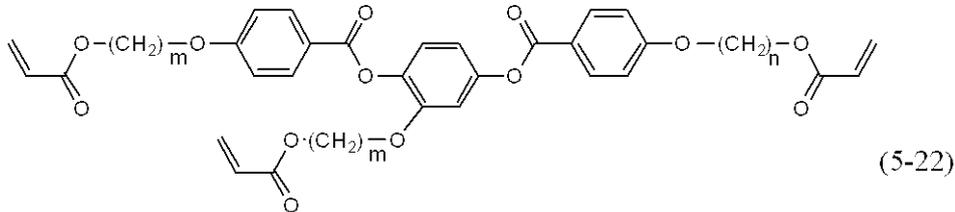
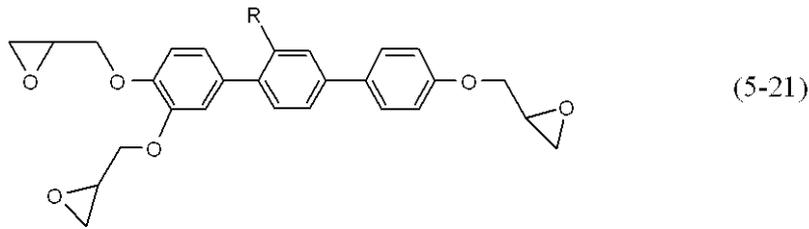
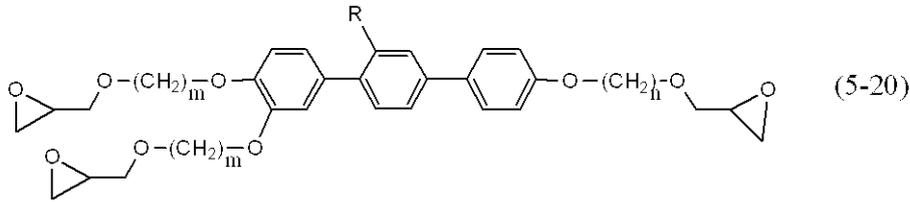
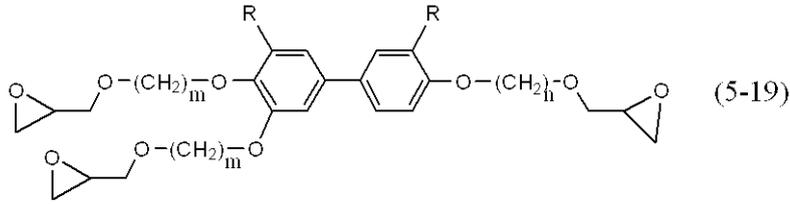


40

【 0 2 5 8】

50

【化 8 5】



【0259】

上記式(5-1)~式(5-23)において、n、mは、各々独立して1~10の整数数を表し、Rは、各々独立して水素原子、ハロゲン原子、炭素数1~6のアルキル基、炭素数1~6のアルコキシ基、シアノ基を示す。これらの基が炭素数1~6のアルキル基、あるいは炭素数1~6のアルコキシ基の場合、全部が未置換であるか、あるいは1つまたは2つ以上のハロゲン原子により置換されていてもよい。

【0260】

一般式(5)で表される重合性化合物を用いる場合、前記重合性化合物の含有量は、本発明のポリマーネットワーク型液晶素子用液晶組成物に用いる重合性化合物の合計量100質量%に対し、ネットワーク構造を強化する観点から、0質量%以上であることが好ましく、1質量%以上であることがより好ましく、5質量%異常であることが特に好ましい。また、低電圧化の観点から、50質量%以下であることが好ましく、30質量%以下であることがより好ましく、20質量%以下であることが特に好ましい。

10

20

30

40

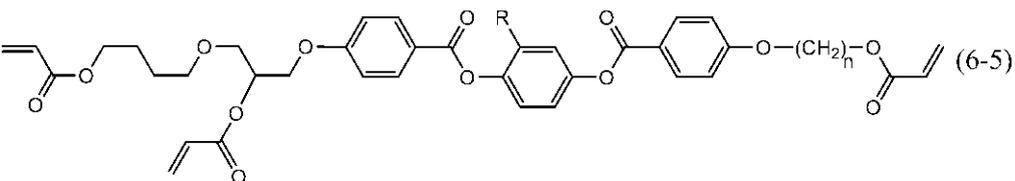
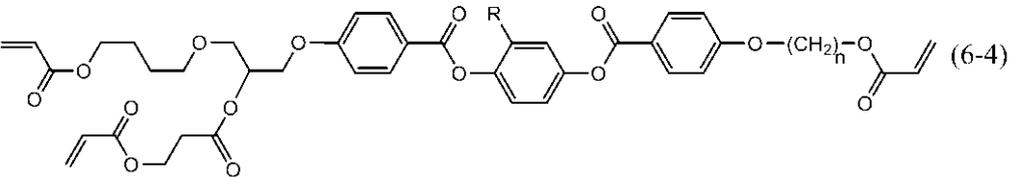
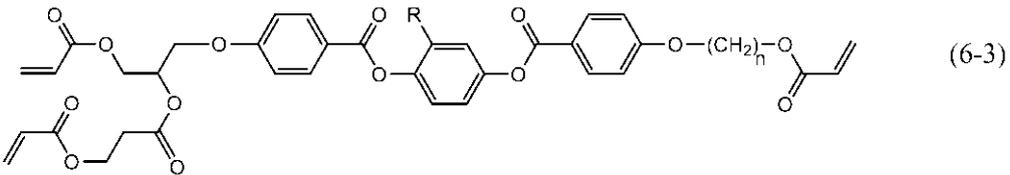
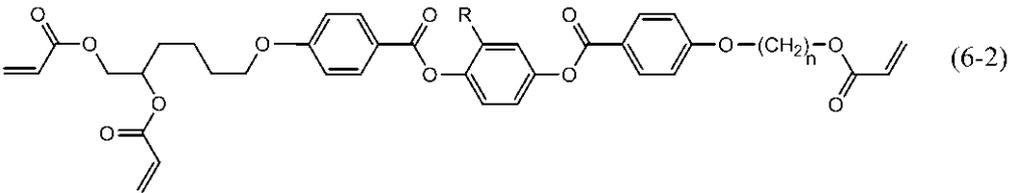
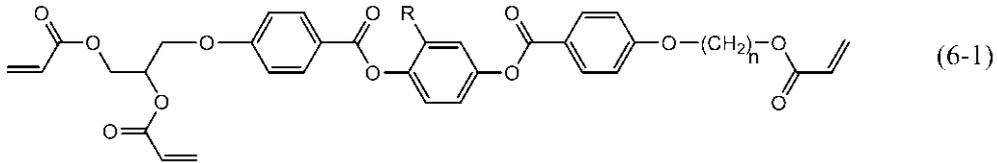
50

【 0 2 6 1 】

上記一般式(6)で表される化合物として具体的には、下記の式(6-1)から式(6-11)で表される化合物が好ましい。

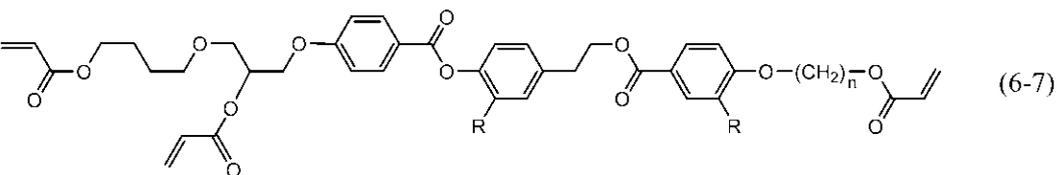
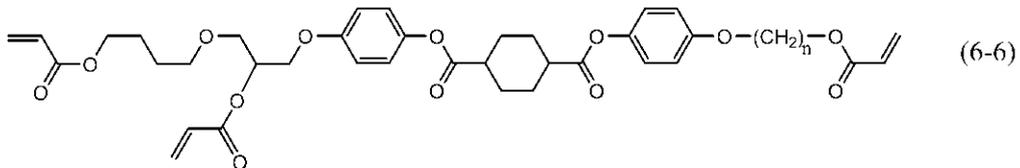
【 0 2 6 2 】

【化 8 6】



【 0 2 6 3 】

【化 8 7】



【 0 2 6 4 】

10

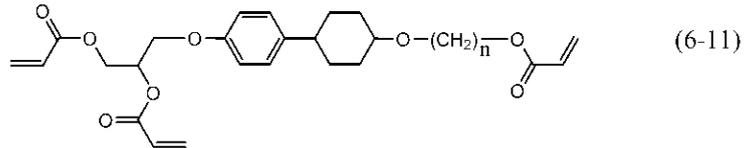
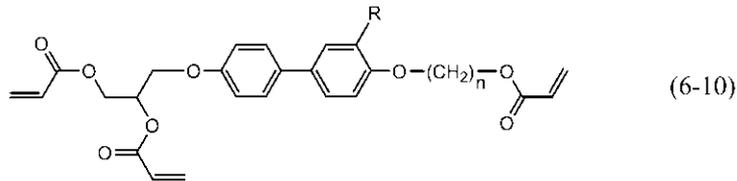
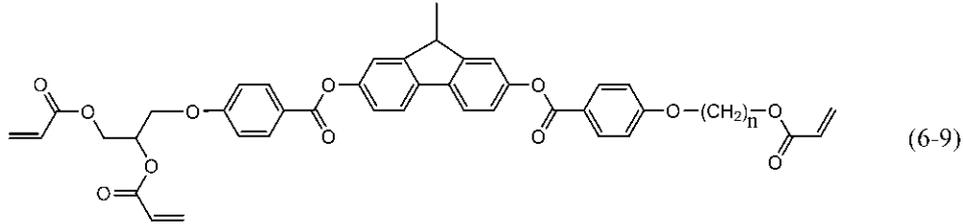
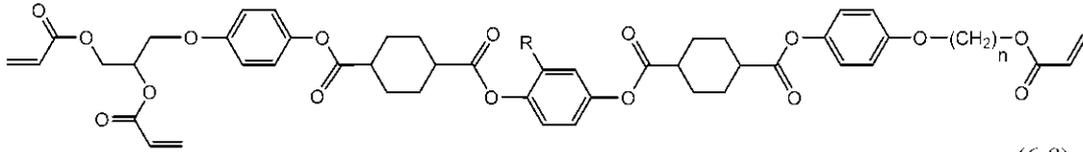
20

30

40

50

【化 8 8】



【0 2 6 5】

上記式(6-1)～式(6-11)において、 n は、各々独立して1～10の整数数を表し、 R は、各々独立して水素原子、ハロゲン原子、炭素数1～6のアルキル基、炭素数1～6のアルコキシ基、シアノ基を示す。これらの基が炭素数1～6のアルキル基、あるいは炭素数1～6のアルコキシ基の場合、全部が未置換であるか、あるいは1つまたは2つ以上のハロゲン原子により置換されていてもよい。

【0 2 6 6】

一般式(6)で表される重合性化合物を用いる場合、前記重合性化合物の含有量は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、ネットワーク構造を強化する観点から、0質量%以上であることが好ましく、1質量%以上であることがより好ましく、5質量%異常であることが特に好ましい。また、低電圧化の観点から、50質量%以下であることが好ましく、30質量%以下であることがより好ましく、20質量%以下であることが特に好ましい。

【0 2 6 7】

上記一般式(7)で表される化合物として具体的には、下記の式(7-1)から式(7-14)で表される化合物が好ましい。

【0 2 6 8】

10

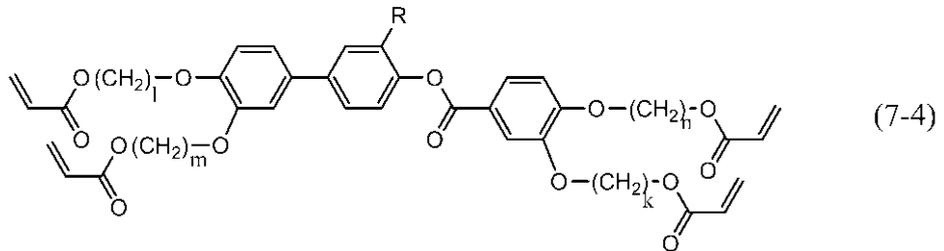
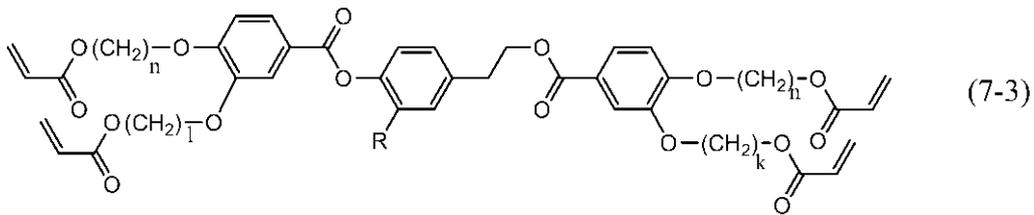
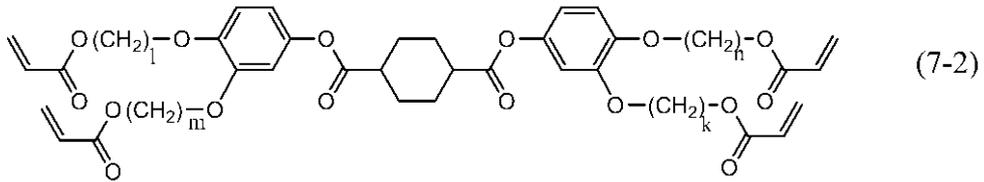
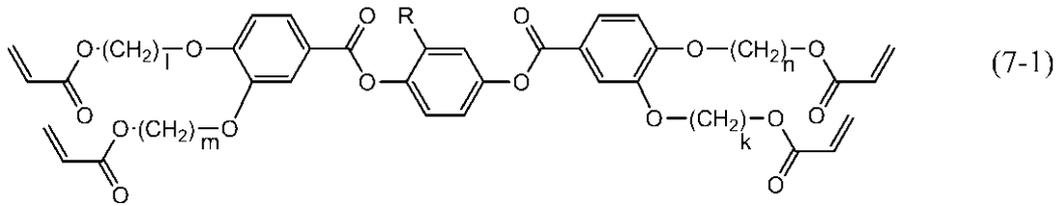
20

30

40

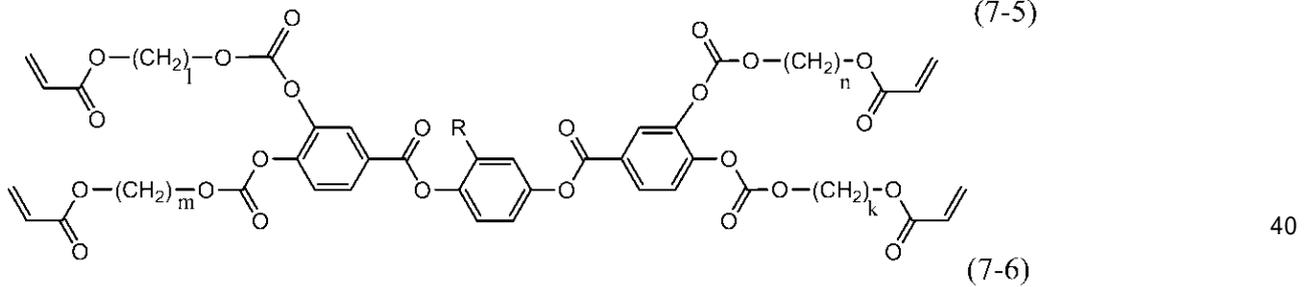
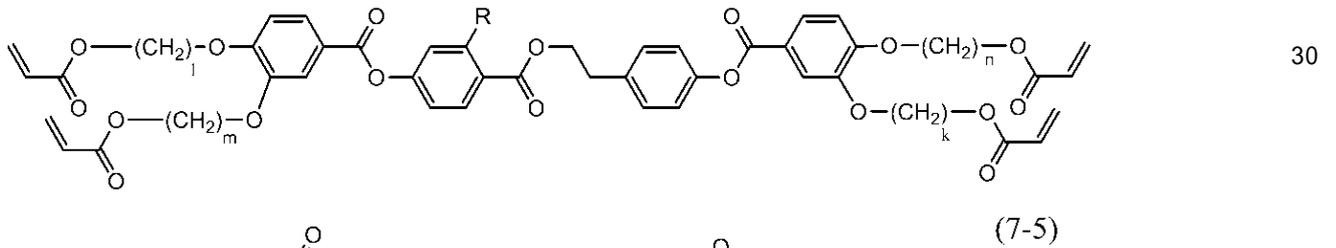
50

【化 8 9】



【 0 2 6 9】

【化 9 0】



【 0 2 7 0】

10

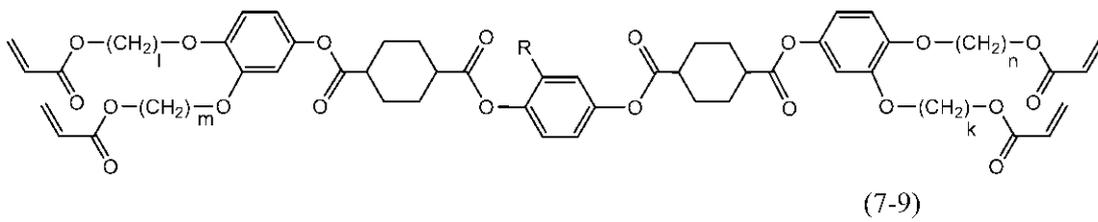
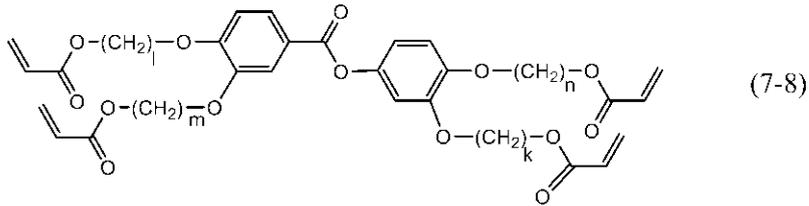
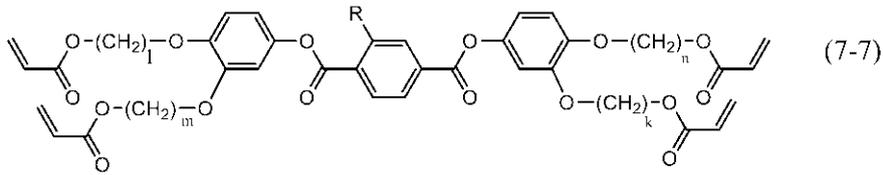
20

30

40

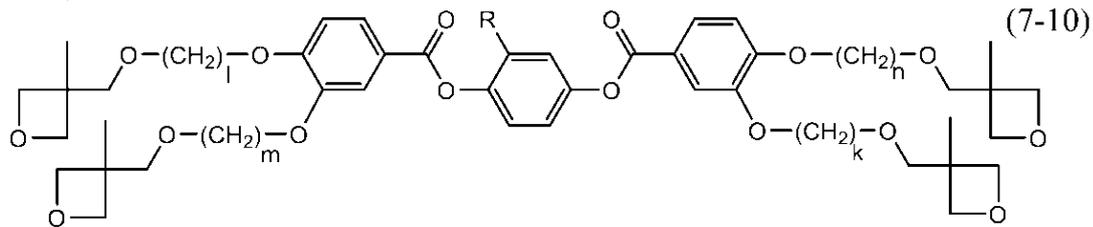
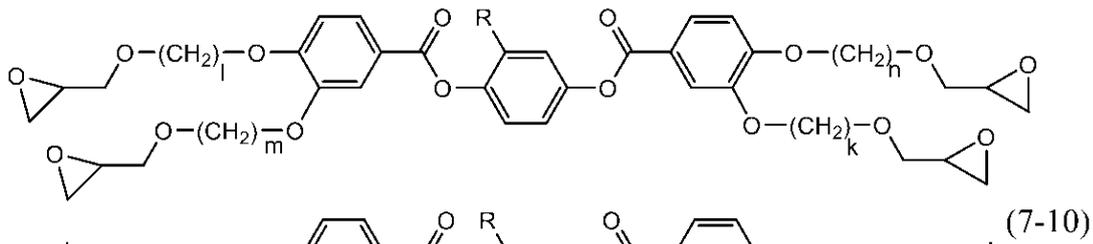
50

【化 9 1】



【 0 2 7 1】

【化 9 2】



【 0 2 7 2】

10

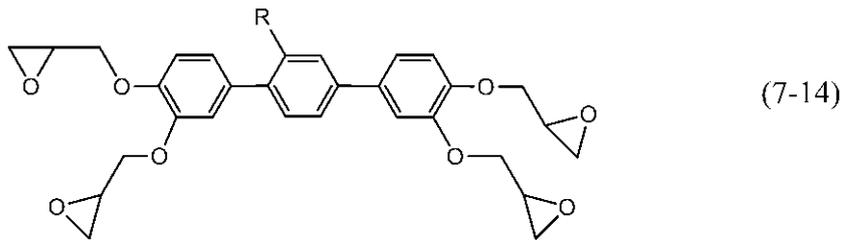
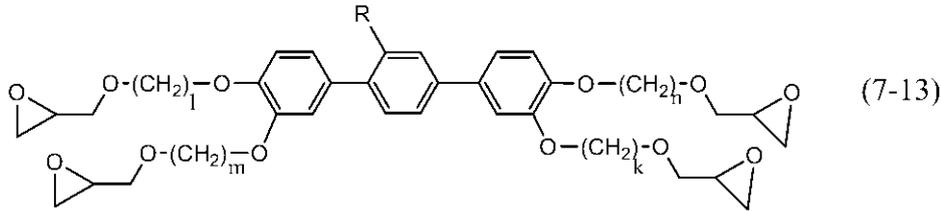
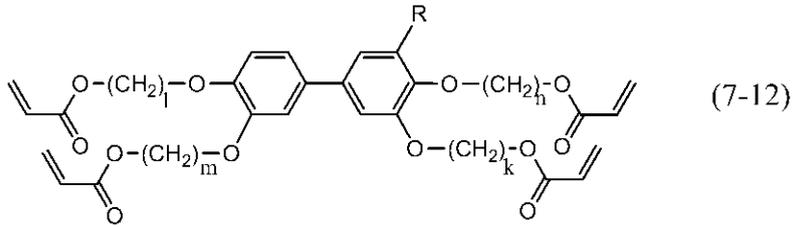
20

30

40

50

【化 9 3】



【 0 2 7 3】

上記式(7-1)~式(7-14)において、 n 、 m 、 l 、 k は、各々独立して1~10の整数数を表し、 R は、各々独立して水素原子、ハロゲン原子、炭素数1~6のアルキル基、炭素数1~6のアルコキシ基、シアノ基を示す。これらの基が炭素数1~6のアルキル基、あるいは炭素数1~6のアルコキシ基の場合、全部が未置換であるか、あるいは1つまたは2つ以上のハロゲン原子により置換されていてもよい。

【 0 2 7 4】

一般式(7)で表される重合性化合物を用いる場合、前記重合性化合物の含有量は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、ネットワーク構造を強化する観点から、0質量%以上であることが好ましく、1質量%以上であることがより好ましく、5質量%異常であることが特に好ましい。また、低電圧化の観点から、50質量%以下であることが好ましく、30質量%以下であることがより好ましく、20質量%以下であることが特に好ましい。

【 0 2 7 5】

上記一般式(8)で表される化合物として具体的には、下記の式(8-1)から式(8-10)で表される化合物が好ましい。

【 0 2 7 6】

10

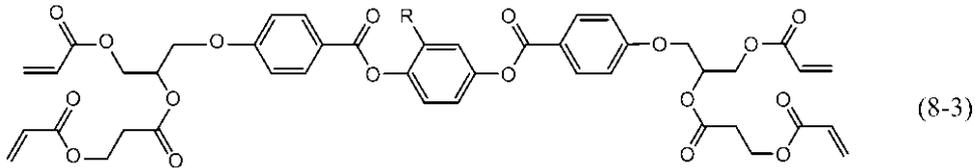
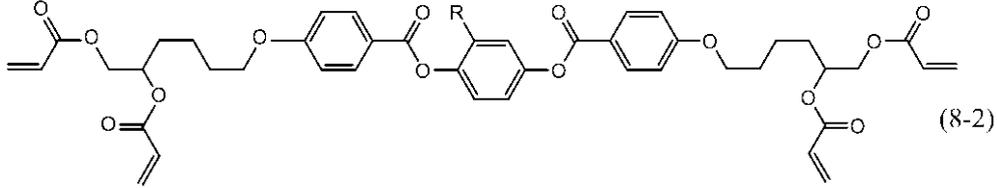
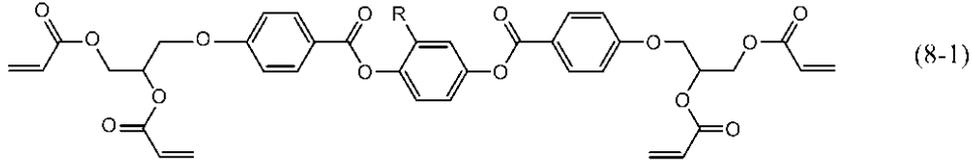
20

30

40

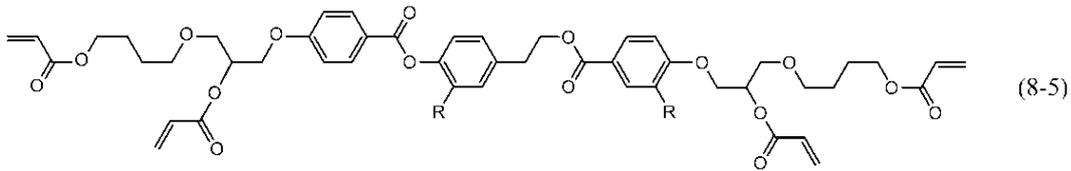
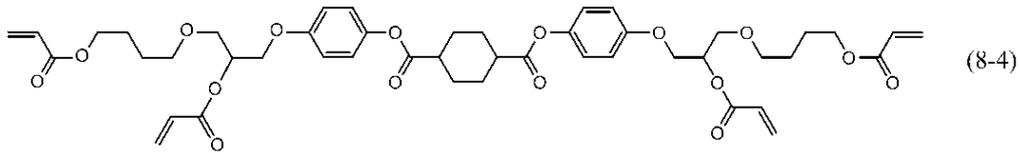
50

【化94】



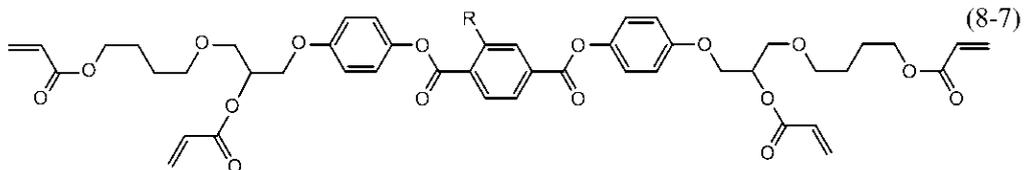
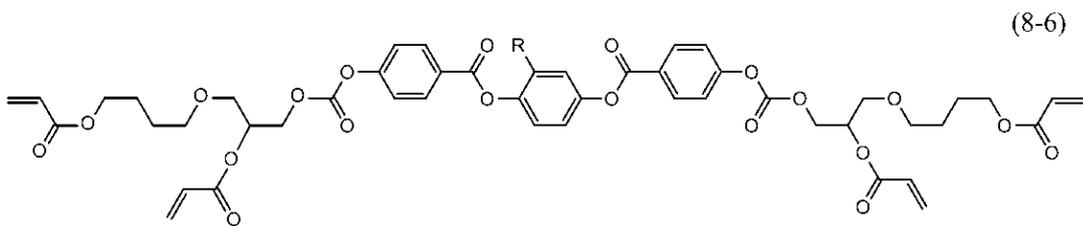
【0277】

【化95】



【0278】

【化96】



【0279】

10

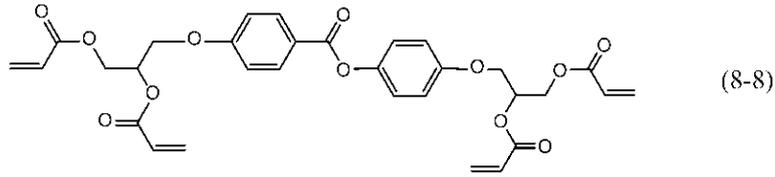
20

30

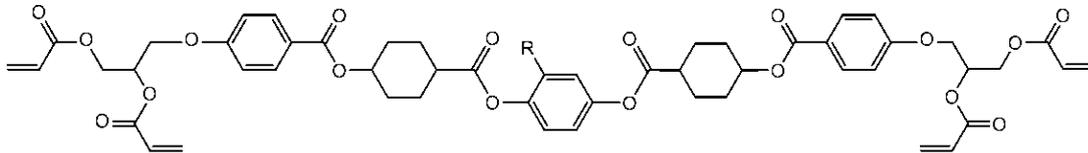
40

50

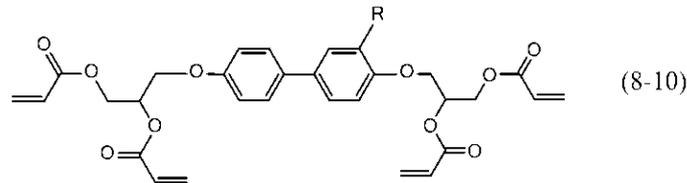
【化 9 7】



(8-9)



10



【 0 2 8 0】

上記式(8-1)～式(8-10)において、Rは、各々独立して水素原子、ハロゲン原子、炭素数1～6のアルキル基、炭素数1～6のアルコキシ基、シアノ基を示す。これらの基が炭素数1～6のアルキル基、あるいは炭素数1～6のアルコキシ基の場合、全部が未置換であるか、あるいは1つまたは2つ以上のハロゲン原子により置換されていてもよい。

20

【 0 2 8 1】

一般式(8)で表される重合性化合物を用いる場合、前記重合性化合物の含有量は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、ネットワーク構造を強化する観点から、0質量%以上であることが好ましく、1質量%以上であることがより好ましく、5質量%異常であることが特に好ましい。また、低電圧化の観点から、50質量%以下であることが好ましく、30質量%以下であることがより好ましく、20質量%

30

【 0 2 8 2】

なお、本発明においては、前記した通り、以上詳述した第1成分の中でも特に、前記一般式(2-4)～(2-5)で表される重合性化合物、前記一般式(3-1)～(3-7)で表される重合性化合物、前記一般式(3-41)～(3-43)で表される重合性化合物、前記一般式(3-50)～(3-51)で表される重合性化合物、前記一般式(3-56)～(3-60)で表される化合物、前記一般式(3-62)～(3-66)で表される重合性化合物、前記一般式(4-2)～(4-3)で表される重合性化合物、前記一般式(5-13)～(5-14)、(5-18)で表される重合性化合物、前記一般式(6-10)～(6-11)で表される重合性化合物、前記一般式(7-8)、(7-12)で表される重合性化合物、及び前記一般式(8-8)、(8-10)で表される重合性化合物を用いることが駆動電圧の低減効果の点から好ましく、特に一般式(3-41)～(3-43)、及び、一般式(3-62)～(3-63)で表される重合性化合物を用いることが好ましい。

40

【 0 2 8 3】

本発明のポリマーネットワーク構造を形成する重合体としては、メソゲン骨格を有さない重合性化合物を用いてもよい。メソゲン骨格を有さない重合性化合物は、本発明の液晶素子の電気光学特性を制御するために用いることができる。そのような化合物としては、公知慣用のものが用いられる。

【 0 2 8 4】

50

例えば、メチル(メタ)アクリレート、エチル(メタ)アクリレート、プロピル(メタ)アクリレート、ブチル(メタ)アクリレート、イソブチル(メタ)アクリレート、オクチル(メタ)アクリレート、2-エチルヘキシル(メタ)アクリレート、ドデシル(メタ)アクリレート、ステアシル(メタ)アクリレート、シクロヘキシル(メタ)アクリレート、ジシクロペンタニルオキシエチル(メタ)アクリレート、イソボルニルオキシエチル(メタ)アクリレート、イソボルニル(メタ)アクリレート、アダマンチル(メタ)アクリレート、ジメチルアダマンチル(メタ)アクリレート、ジシクロペンタニル(メタ)アクリレート、ジシクロペンテニル(メタ)アクリレート、メトキシエチル(メタ)アクリレート、エチルカルビトール(メタ)アクリレート、テトラヒドロフルフリル(メタ)アクリレート、ベンジル(メタ)アクリレート、フェノキシエチル(メタ)アクリレート、2-フェノキシジエチレングリコール(メタ)アクリレート、(2-メチル-2-エチル-1,3-ジオキソラン-4-イル)メチル(メタ)アクリレート、(3-エチルオキセタン-3-イル)メチル(メタ)アクリレート、o-フェニルフェノールエトキシ(メタ)アクリレート、2,2,3,3,3-ペンタフルオロプロピル(メタ)アクリレート、2,2,3,4,4,4-ヘキサフルオロブチル(メタ)アクリレート、2,2,3,3,4,4,4-ヘプタフルオロブチル(メタ)アクリレート、2-(パーフルオロブチル)エチル(メタ)アクリレート、2-(パーフルオロヘキシル)エチル(メタ)アクリレート、1H,1H,3H-テトラフルオロプロピル(メタ)アクリレート、1H,1H,5H-オクタフルオロペンチル(メタ)アクリレート、1H,1H,7H-ドデカフルオロヘプチル(メタ)アクリレート、1H-1-(トリフルオロメチル)トリフルオロエチル(メタ)アクリレート、1H,1H,3H-ヘキサフルオロブチル(メタ)アクリレート、1,2,2,2-テトラフルオロ-1-(トリフルオロメチル)エチル(メタ)アクリレート、1H,1H-ペンタデカフルオロオクチル(メタ)アクリレート、1H,1H,2H,2H-トリデカフルオロオクチル(メタ)アクリレート、2-(メタ)アクリロイルオキシエチルフタル酸、2-(メタ)アクリロイルオキシエチルヘキサヒドロフタル酸等、または、下記の構造

【0285】

10

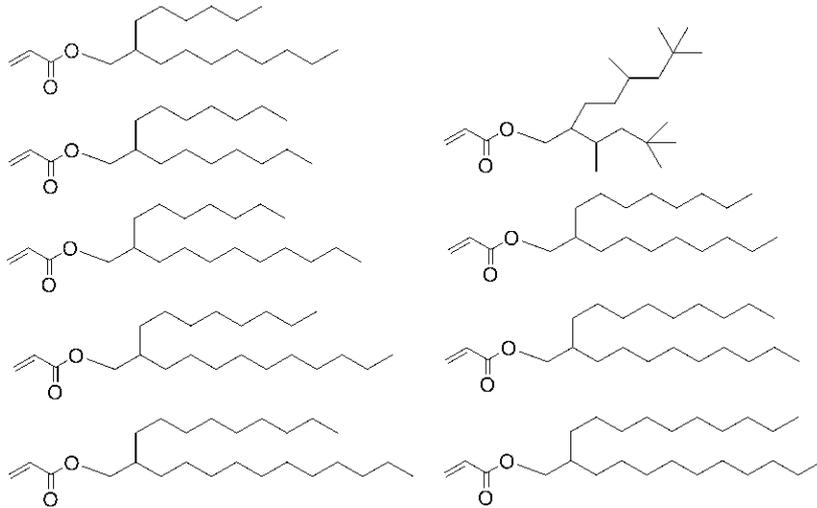
20

30

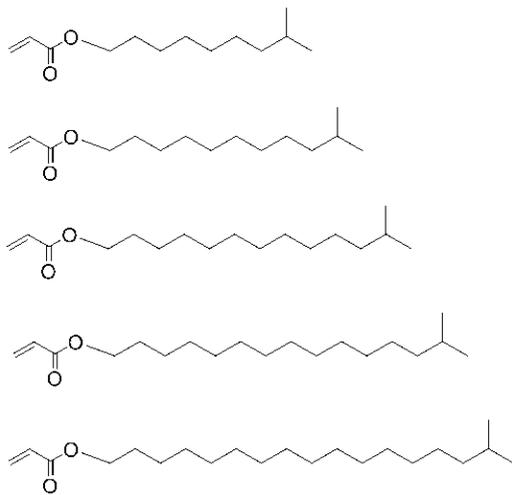
40

50

【化 9 8】



10



20

【0 2 8 6】

を有する単官能（メタ）アクリレートが好ましい。

【0 2 8 7】

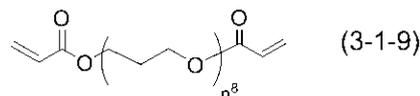
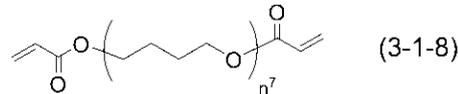
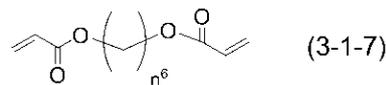
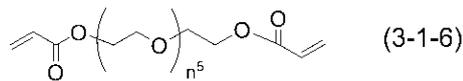
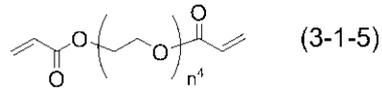
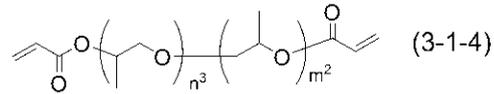
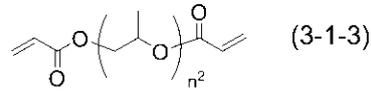
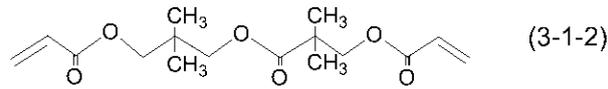
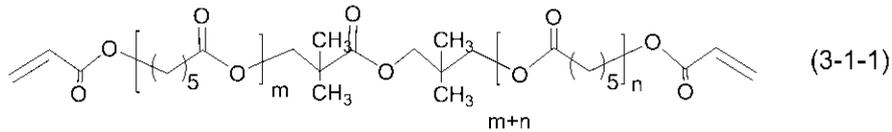
また、1, 4 - ブタンジオールジ（メタ）アクリレート、1, 6 - ヘキサジオールジ（メタ）アクリレート、1, 9 - ノナンジオールジ（メタ）アクリレート、ネオペンチルジオールジ（メタ）アクリレート、トリプロピレングリコールジ（メタ）アクリレート、エチレングリコールジ（メタ）アクリレート、ジエチレングリコールジ（メタ）アクリレート、トリエチレングリコールジ（メタ）アクリレート、トリクロデカンジメタノールジアクリレート、アダマンタンジ（メタ）アクリレート、ビスフェノールAジ（メタ）アクリレート、水素化ビスフェノールAジ（メタ）アクリレート、ビスフェノールFジ（メタ）アクリレート、エチレンオキサイド変性ビスフェノールAジ（メタ）アクリレート、トリシクロデカンジメタノールジ（メタ）アクリレート、9, 9 - ビス[4 - (2 - アクリロイルオキシエトキシ)フェニル]フルオレン、グリセリンジ（メタ）アクリレート、1, 6 - ヘキサジオールジグリシジルエーテルのアクリル酸付加物、1, 4 - ブタンジオールジグリシジルエーテルのアクリル酸付加物等、または、下記の構造

40

【0 2 8 8】

50

【化 9 9】



【0289】

で表されるの2官能(メタ)アクリレートが好ましい。

【0290】

また、4-および2,6-トリレンジイソシアネート(TDI)、オルトトルイジンジイソシアネート(TODI)、ナフチレンジイソシアネート(NDI)、キシリレンジイソシアネート(XDI)、4,4'-ジフェニルメタンジイソシアネート(MDI)、イソホロンジイソシアネート、およびカルボジイミド変成MDI、ジイソシアネート等を反応して得られる各種ウレタンアクリレートが好ましい。

【0291】

また、エチレングリコールジグリシジルエーテル、ジエチレングリコールジグリシジルエーテル、プロピレングリコールジグリシジルエーテル、ネオペンチルグリコールジグリシジルエーテル、1,6-ヘキサンジオールジグリシジルエーテル、グリセリンジグリシジルエーテル、ビスフェノールAジグリシジルエーテル、等のエポキシ化合物が好ましい。

【0292】

中でも、上記の構造を有する単官能(メタ)アクリレートや2官能(メタ)アクリレート、各種ウレタンアクリレートが特に好ましい。

メソゲン骨格を有さない重合性化合物の含有量は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、0~30質量%が好ましく、1~20質量%が特に好ましい。これらは、単独で使用することもできるし、2種類以上混合して使用することもできる。

10

20

30

40

50

【0293】

重合性化合物を重合して重合体5を形成する際、重合開始剤を用いることができる。重合を光照射によって行う場合に使用する光重合開始剤としては、特に限定はないが、前記1つの重合性基を有し、かつ、式(I)を満たす重合性化合物、メソゲン性骨格を有する重合性化合物の配向状態を阻害しない程度で公知慣用のものが使用できる。

【0294】

例えば1-ヒドロキシシクロヘキシルフェニルケトン「OmniRad184」、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「オムニラッド1173」、2-メチル-1-[(メチルチオ)フェニル]-2-モリホリノプロパン-1「オムニラッド907」、2,2-ジメトキシ-1,2-ジフェニルエタン-1-オン「オムニラッドBDK」、2-ベンジル-2-ジメチルアミノ-1-(4-モルフォリノフェニル)-ブタノン「オムニラッド369」、2-ジメチルアミノ-2-(4-メチルベンジル)-1-(4-モルフォリノ-フェニル)ブタン-1-オン「オムニラッド379」、2,2-ジメトキシ-1,2-ジフェニルエタン-1-オン、ビス(2,4,6-トリメチルベンゾイル)-ジフェニルフォスフィンオキシド「オムニラッドTPO」、2,4,6-トリメチルベンゾイル-フェニル-フォスフィンオキシド「オムニラッド819」(IGM Resins株式会社製)、1,2-オクタンジオン、1-[4-(フェニルチオ)-,2-(O-ベンゾイルオキシム)],エタノン「イルガキュアOXE01」、1-[9-エチル-6-(2-メチルベンゾイル)-9H-カルバゾール-3-イル]-,1-(O-アセチルオキシム)「イルガキュアOXE02」、
「イルガキュアOXE04」(BASF株式会社製)、「アデカアークルズNCI-831」、「アデカアークルズNCI-930」、「アデカアークルズN-1919」(ADEKA社製)、2,4-ジエチルチオキサントン(日本化薬社製「カヤキュアDETX」とp-ジメチルアミノ安息香酸エチル(日本化薬社製「カヤキュアEPA」との混合物、イソプロピルチオキサントン(ワ-ドブレキンソップ社製「カンタキュア-ITX」とp-ジメチルアミノ安息香酸エチルとの混合物、「エサキュアONE」、「エサキュアKIP150」、「エサキュアKIP160」、「エサキュア1001M」、「エサキュアA198」、「エサキュアKIPIT」、「エサキュアKTO46」、「エサキュアTZT」(Lamberti株式会社製)、「スピードキュアBMS」、「スピードキュアPBZ」、「ベンゾフェノン」(LAMBSON社製)等が挙げられる。さらに、光カチオン開始剤としては、光酸発生剤を用いることができる。光酸発生剤としてはジアゾジスルホン系化合物、トリフェニルスルホニウム系化合物、フェニルスルホン系化合物、スルフォニルピリジン系化合物、トリアジン系化合物及びジフェニルヨードニウム化合物などが挙げられる。

【0295】

光重合開始剤の含有率は、本発明の重合体5を形成する重合性化合物の合計量100質量%に対し、0.1~10質量%が好ましく、1~7質量%が特に好ましい。これらは、単独で使用することもできるし、2種類以上混合して使用することもできる。

【0296】

また、熱重合の際に使用する熱重合開始剤としては公知慣用のものが使用でき、例えば、メチルアセトアセテイトパーオキシド、キュメンハイドロパーオキシド、ベンゾイルパーオキシド、ビス(4-t-ブチルシクロヘキシル)パーオキシジカーボネイト、t-ブチルパーオキシベンゾエイト、メチルエチルケトンパーオキシド、1,1-ビス(t-ヘキシルパーオキシ)3,3,5-トリメチルシクロヘキサン、p-ペンタハイドロパーオキシド、t-ブチルハイドロパーオキシド、ジクミルパーオキシド、イソブチルパーオキシド、ジ(3-メチル-3-メトキシブチル)パーオキシジカーボネイト、1,1-ビス(t-ブチルパーオキシ)シクロヘキサン等の有機過酸化物、2,2'-アゾビスイソブチロニトリル、2,2'-アゾビス(2,4-ジメチルバレロニトリル)等のアゾニトリル化合物、2,2'-アゾビス(2-メチル-N-フェニルプロピオン-アミジン)ジハイドロクロライド等のアゾアミジン化合物、2,2'-アゾビス{2-メチル-N

10

20

30

40

50

- [1 , 1 - ビス (ヒドロキシメチル) - 2 - ヒドロキシエチル] プロピオンアミド } 等のアゾアミド化合物、 2 , 2 ' アゾビス (2 , 4 , 4 - トリメチルペンタン) 等のアルキルアゾ化合物等を使用することができる。熱重合開始剤の含有利量は本発明のポリマーネットワーク型液晶素子用液晶性組成物の重合性組成物に用いる重合性化合物の合計量 1 0 0 質量 % に対し、 0 . 1 ~ 1 0 質量 % が好ましく、 1 ~ 6 質量 % が特に好ましい。これらは、単独で使用することもできるし、 2 種類以上混合して使用することもできる。

(その他の成分)

本発明の液晶層は、液晶組成物中に、光安定剤、酸化防止剤、重合禁止剤等の種々の添加剤を含有しても良い。これらの添加剤は、複合液晶組成物中に混合させることにより、添加剤含有の液晶層を得られる。

(液晶素子の製造方法の例)

本発明の液晶素子は、生産性の観点から、例えば基材と基材との間に空間を有するような形状の中空素子、いわゆる空セルに、前記した液晶組成物、自発配向剤、及び重合体 5 を形成する前の (重合前の) 重合性化合物を含む複合組成物等を狭持させた重合性液晶素子から作製することが好ましい。重合性液晶素子中において、複合組成物中の液晶性化合物やメソゲン基を有する重合性化合物は、 K^{i1} で表される部分構造を有する自発配向剤の配向規制力によってホメオトロピック配向状態にある。この配向状態下に、複合組成物中の重合性化合物を上記の方法により紫外線硬化し、複合組成物から相分離液晶層を形成することで、ポリマーネットワークを形成した重合体 5 を有する液晶素子が得られる。

【 0 2 9 7 】

中空素子に複合組成物を狭持させる方法は、常法でよく、真空注入法、ODF法、ロール to ロール法、ロール to シート法などを用いることができる。ODF法の前記液晶素子製造工程においては、中空素子のバックプレーンまたはフロントプレーンのどちらか一方の基板にエポキシ系光熱併用硬化性などのシール剤を、ディスペンサーを用いて閉ループ土手状に描画し、その中に脱気下で所定量の前記複合組成物を滴下後、フロントプレーンとバックプレーンを接合することによって前記液晶素子を製造することができる。本発明に用いられる複合組成物は、相安定性が高く揮発しにくいいため、ODF工程に好適に使用することができる。

【 0 2 9 8 】

また、ロール to ロール法による前記液晶素子の製造工程においては、第一の電極と第一の電極を有するガラス基材、あるいはプラスチック基材上に、前記複合組成物を塗布し、第二の電極と第二の電極を有するガラス基材、あるいはプラスチック基材の前記電極側と前記複合組成物が接するように貼り合せ、厚みを均一にすることで、前記液晶素子を製造することもできる。本発明に用いられる複合組成物を塗布する方法としては、アプリケーション法、バーコーティング法、ロールコーティング法、ダイレクトグラビアコーティング法、リバースグラビアコーティング法、インクジェット法、ダイコーティング法、キャップコーティング法等、公知慣用の方法を行うことができる。

【 0 2 9 9 】

複合組成物を、液晶素子の厚みを決定するための粒子を混合した複合組成物として、該複合組成物を中空素子に狭持させてもよい。そのような粒子としては、一般的な液晶表示素子や液晶ディスプレイに用いられる公知慣用のガラス粒子やポリマー粒子が用いられる。

【 0 3 0 0 】

その場合、前記液晶素子の厚みを決定する粒子を含む複合組成物を第一の電極を含有するプラスチック基材上に塗布した後、第二の電極を含有するプラスチック基材を前記第一の電極と前記第二の電極が対向するように貼り合せ、前記第一のプラスチック基材と前記第二のプラスチック基材に圧力をかけた状態で紫外線を照射する方法、あるいは、前記液晶素子の厚みを決定する粒子を含む複合組成物を第一の電極を含有する第一のプラスチック基材上に塗布した後、前記第一のプラスチック基材、及び、前記塗布された液晶性組成物を真空状態にし、第二の電極を含有する第二のプラスチック基材を前記第一の電極と前記第二の電極が対向するように貼り合せた真空状態で紫外線を照射する方法が好ましい。

10

20

30

40

50

(重合方法)

本発明の複合組成物を重合させる方法としては、活性エネルギー線を照射する方法や熱重合法等が挙げられる。得られる液晶素子の用途に応じて、適宜選択される。

【0301】

紫外線等の光を照射する場合、照射時の温度は、本発明の前記液晶組成物が液晶相を保持できる温度とすることが好ましい。加熱をする場合は、前記液晶組成物中の重合性化合物成分が十分重合して液晶組成物成分と相分離構造を形成するまでは、本発明の前記液晶組成物が液晶相を保持できる温度が好ましく、前記相分離構造が形成された後は、液晶相を保持できる温度でなくても構わない。

【0302】

本発明の液晶素子は、そのまま使用することも、他の基材に貼り合せて使用することもできる。また、接着剤や接着層、粘着剤や粘着層、保護フィルムや偏光フィルム等が積層されていてもよい。

(その他の電界型)

本発明の液晶素子には、上記垂直電界型その他、横電界型やその他の電界型を採用してもよい。FFS駆動モードに採用されるフリンジ電界を採用してもよい。

【0303】

本発明の液晶素子は、たとえば、建材、調光ガラス、車載向けのスマートウィンドウ又はOLEDディスプレイにおける調光ユニット等に用いることが好ましい。本発明の液晶表示素子は、従来の高分子分散型液晶表示素子と同様な用途に用いることができるほか、特に透過型ディスプレイ、フレキシブルディスプレイ等にも好ましく用いることができる。より具体的には、窓、天窓、屋根、壁、仕切り、間仕切り、扉等の建築用調光素子、扉、窓、ドア、ヘルメット、サンルーフ等の輸送用調光素子、サングラス、眼鏡、サンバイザー、時計、鏡、反射板等の装飾用調光素子、フレキシブル液晶表示素子、反射型液晶表示素子、透明液晶表示素子、可変式拡散フィルム等のディスプレイ用部材等の物品に用いることができる。

【実施例】

【0304】

以下に実施例を挙げて本発明を更に詳述するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。また、以下の実施例及び比較例の組成物における「部」は「重量部」を意味する。

【0305】

各実施例及び比較例中で用いた液晶化合物(A-1)~(A-19)、及び、(N-1)~(N-33)の構造は次式の通りである。また、各実施例及び比較例で用いた液晶組成物(L-1)~(L-7)は表1及び表2に示す。

【0306】

10

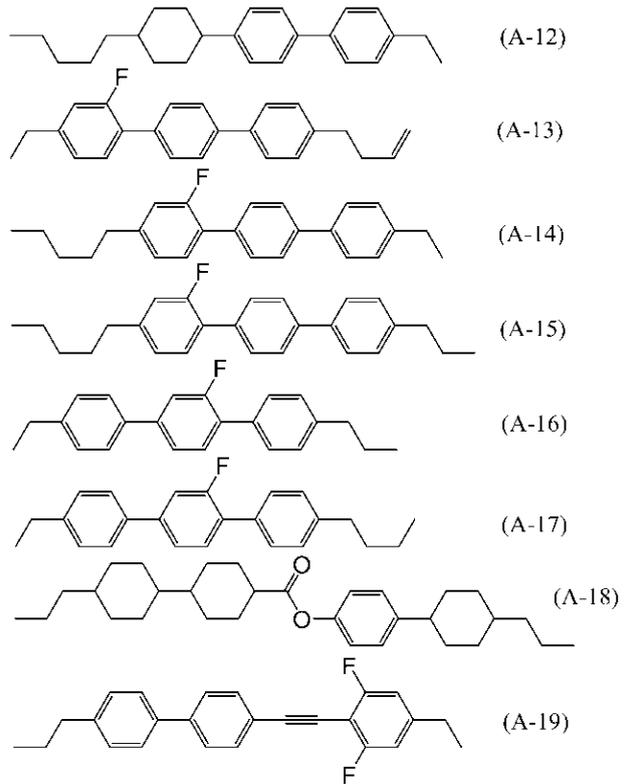
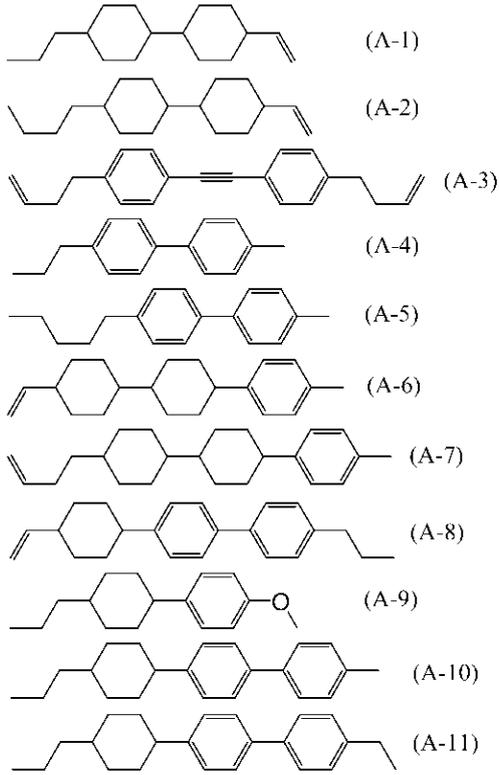
20

30

40

50

【化100】

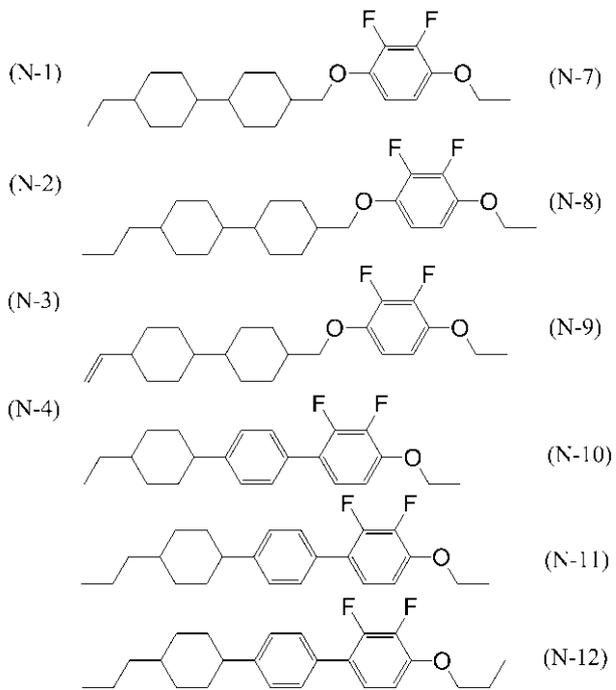
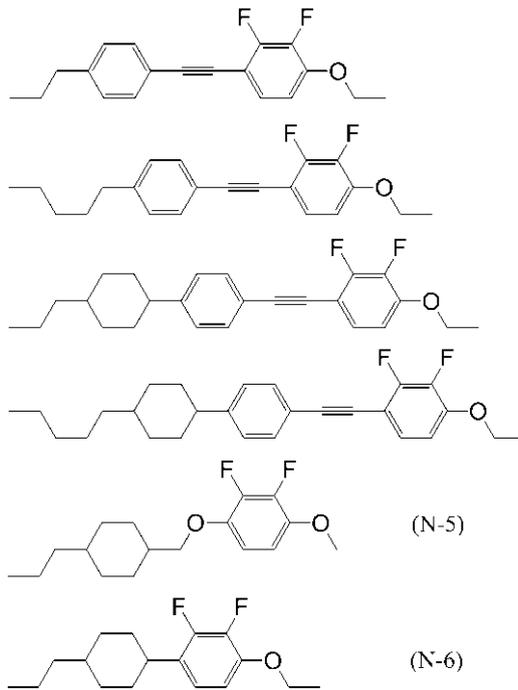


10

20

【0307】

【化101】

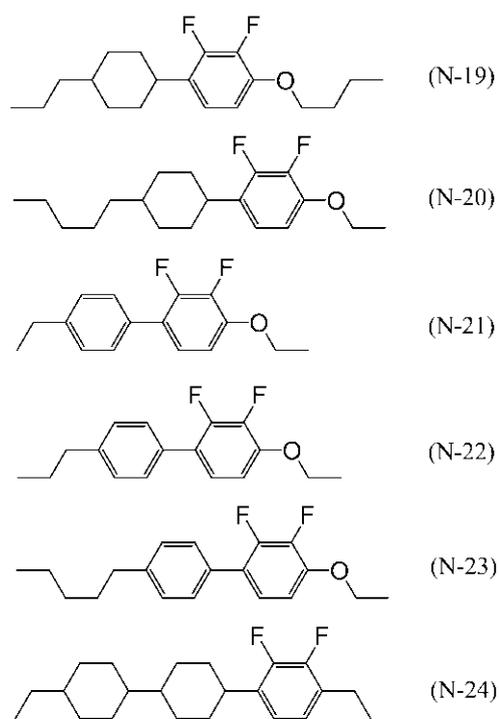
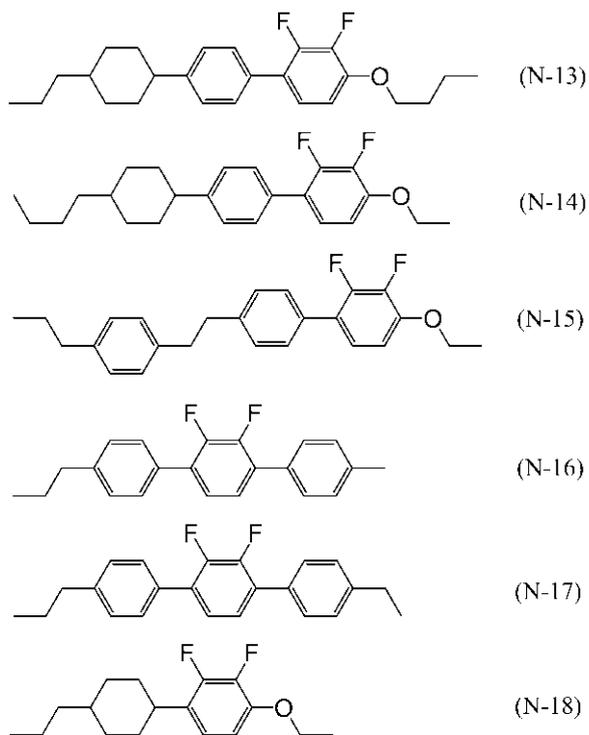


30

40

【0308】

【化 1 0 2】

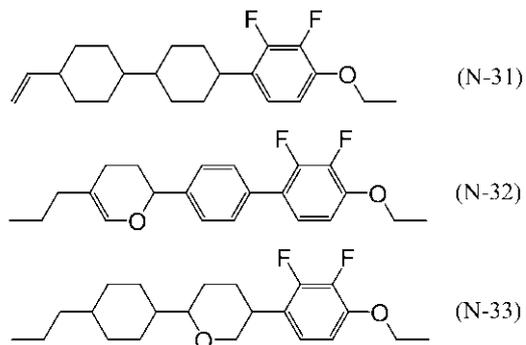
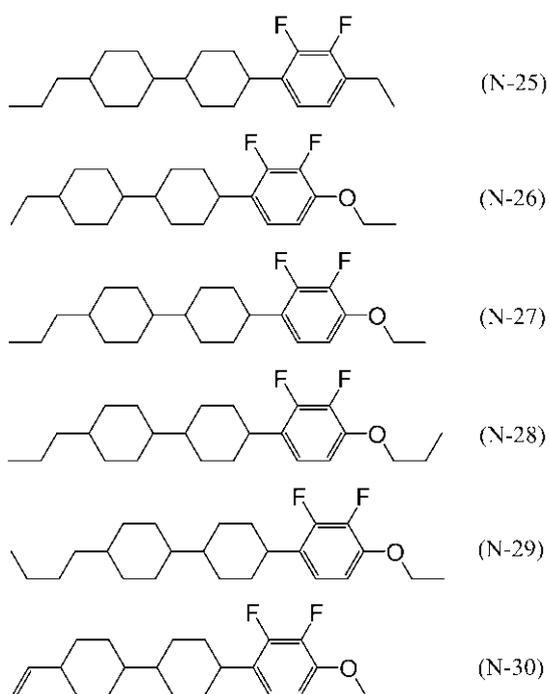


10

20

【 0 3 0 9】

【化 1 0 3】



30

40

【 0 3 1 0】

【表 1】

液晶化合物	L-1	L-2	L-3	L-4
A-1		11.7		
A-2				14
A-3		3		
A-4				
A-5	20		18	
A-6		7		5
A-7		6		10
A-8	8			
A-9			7	
A-10			5	
A-11			6	
A-12			9	
A-19				3
N-1		5		11
N-2		5		11
N-3		7		5
N-4		7		5
N-5	4	6		
N-6	10	11		
N-7	11	11	12	
N-8	15	12	12	
N-9		8		
N-10	6		6	5
N-11	7		6	
N-12			6	
N-13	9		6	
N-15	10		7	
N-18				3
N-19				10
N-27				6
N-28				6
N-29				6
IR1076P		0.1		
KEMISORB 71		0.2		

10

20

30

40

【 0 3 1 1 】

50

【表 2】

液晶化合物	L-5	L-6	L-7
A-4			8
A-5	10		10
A-8	6		3
A-10			4
A-11	5		5
A-12	5		6
A-13			6
A-14		9	
A-15		9	
A-16			4
A-17			4
A-18	3		
N-10	8	3	5
N-11	8	8	5
N-12	8		5
N-13	8		5
N-14		3	
N-16	7		
N-17	7		7
N-18		9	
N-20		7	
N-21		6	5
N-22		10	5
N-23		10	3
N-24	5		5
N-25	5		
N-27	15	5	
N-30		3	
N-31		11	
N-32		7	
N-33			5

10

20

30

40

【0312】

IR1076P：BASFジャパン株式会社製

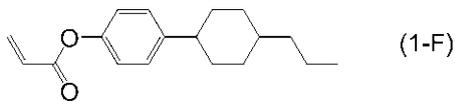
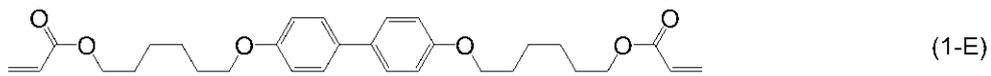
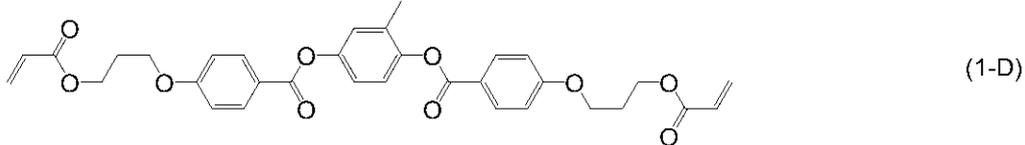
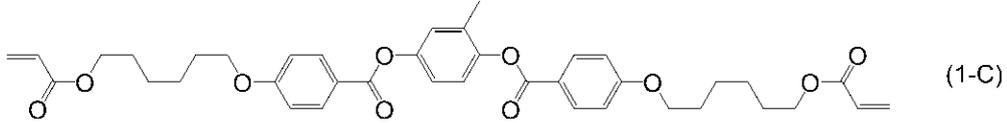
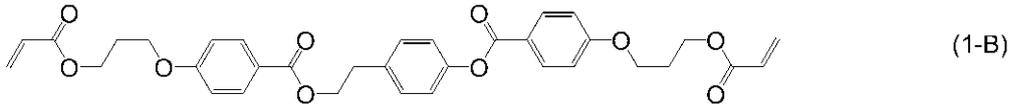
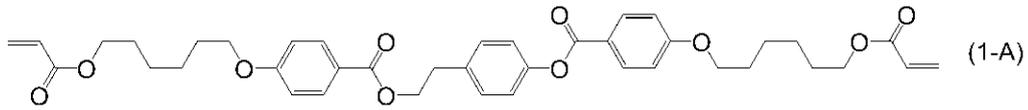
KEMISORB71：ケミプロ化成株式会社製

各実施例及び比較例中で用いたメソゲン骨格を有する重合性化合物(1-A)～(1-F)の構造は次式の通りである。

【0313】

50

【化104】



10

20

【0314】

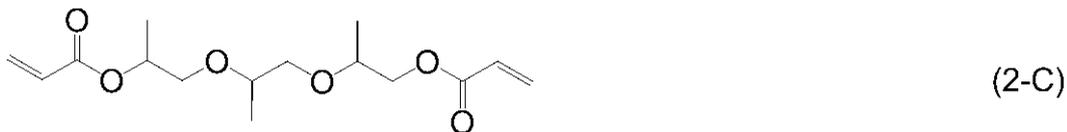
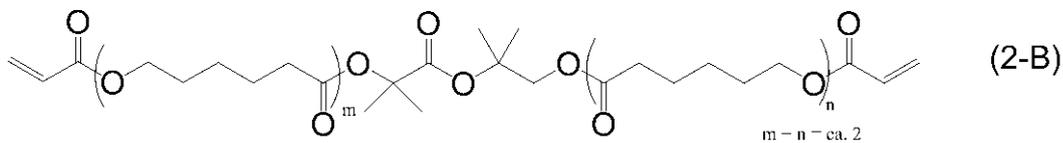
各実施例及び比較例で用いたメソゲン骨格を有さない重合性化合物(2-A)~(2-C)の構造は以下のとおりである。

【0315】

【化105】



30



40

【0316】

各実施例及び比較例で用いたメソゲン骨格を有する重合性化合物、メソゲン骨格を有さない重合性化合物、及び、重合開始剤の組み合わせである重合性組成物は、表3に示す。

【0317】

50

【表 3】

重合性化合物	M-1	M-2	M-3	M-4	M-5	M-6	M-7	M-8	M-9
1-A	50		20		25		25	40	40
1-B		40	20				25		
1-C				40					
1-D						50			
1-E						50			
1-F					25		50		
2-A	50	60	60	60	50			50	50
2-B								10	
2-C									10
開始剤	2	2	2	2	2	2	2	2	2

10

【0318】

開始剤：2, 2 - ジメトキシ - 2 - フェニルアセトフェノン

各実施例及び比較例で用いた自発配向剤 (P - 1) ~ (P - 8) の構造は次式の通りである。

【0319】

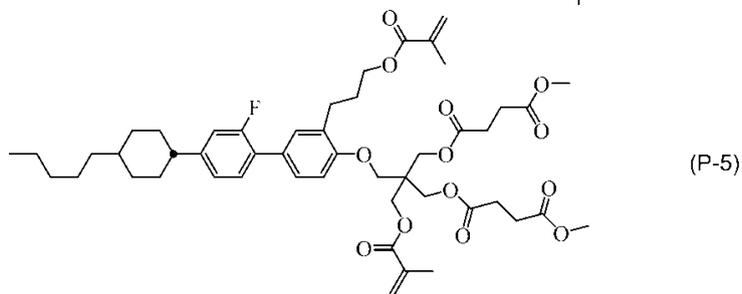
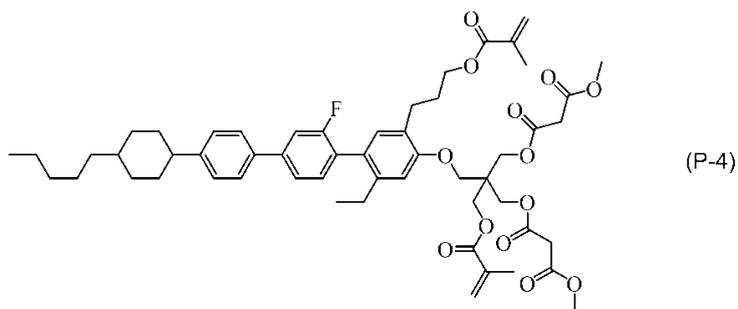
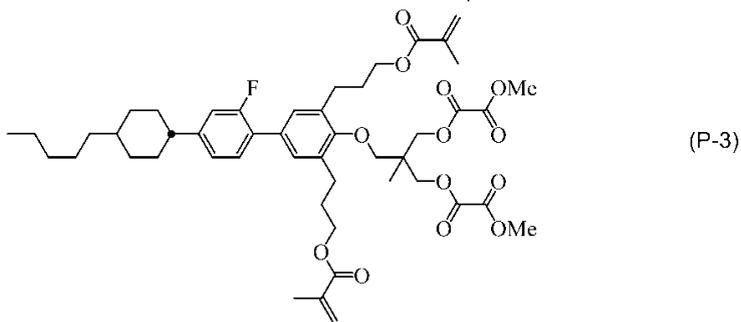
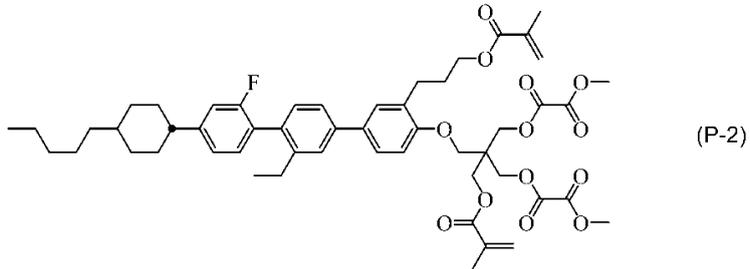
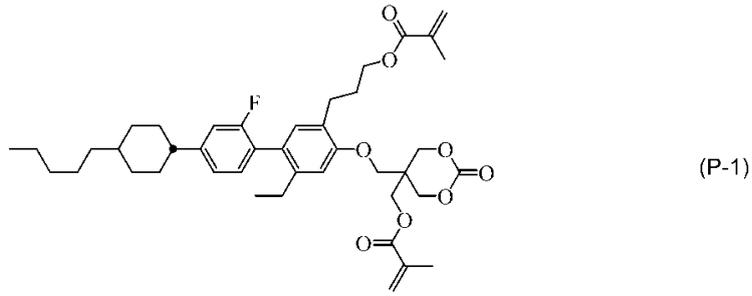
20

30

40

50

【化 1 0 6】



【 0 3 2 0】

10

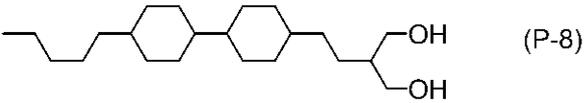
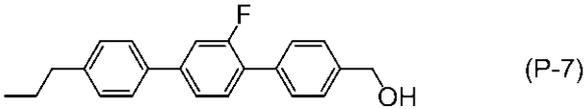
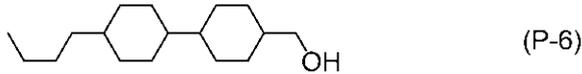
20

30

40

50

【化107】



10

【0321】

(実施例1)

液晶組成物「L-1」を92重量部、重合性組成物「M-1」を8重量部、自発配向剤「P-1」を0.5部混合して、高分子分散型液晶素子用液晶組成物である複合組成物(PN-1)を調製した。得られたPN-1は、常温でネマチック相を示した。

(低温安定性の評価試験)

得られた液晶組成物をメンブレンフィルター(Agilent Technologies社製、PTFE 13mm-0.2μm)にてろ過を行い、真空減圧条件にて15分間静置し溶存空気の除去を行った。これをアセトンにて洗浄し十分に乾燥させたバイアル瓶に0.5g秤量し、0℃の低温環境下に静置した。その後、目視にて析出の有無を観察し、以下の3段階で判定した。

20

A: 7日静置後、析出が確認できない。

B: 3日静置後、析出が確認される。

C: 1日静置後、析出が確認できる。

【0322】

複合組成物(PN-1)の低温安定性試験の評価結果は、Aであった。

(垂直配向性の評価)

透明な共通電極からなる透明電極層(ITO)を具備した配向膜を有さない第一の基板(共通電極基板)と、アクティブ素子により駆動される透明画素電極を有する画素電極層を有する配向膜を有さない第二の基板(画素電極基板)とを作製した。第一の基板上に複合組成物を滴下し、第二の基板上で挟持し、シール材を常圧で110℃2時間の条件で硬化させ、セル面が10cm×10cm、セルギャップ3.5μmの液晶セルを得た。

30

次いで、前記液晶セルを23±1℃に保ちながら紫外線を照射し、高分子分散型液晶素子を作製した。このとき、紫外線光源はメタルハライドランプを用い、紫外線を15mW/cm²の照度で200秒間照射(計3.0J/cm²)した。照度はウシオ電機社製の受光器UVD-365PD付きユニメータUIT-101を用いて測定した。

【0323】

得られた液晶素子は、電圧無印加時、透明状態で散乱は観察されず、液晶が垂直配向していることが確認された。電圧無印加時の垂直配向性は、得られた電圧無印加時の液晶素子に対して法線方向に測定光を入射させたときの液晶素子のヘイズ(Hz)を、ヘイズメーター(日本電色工業社製NDH-7000)を用いて、セル面から任意の5か所を選択して測定することにより評価した。ヘイズの値は、全光線透過率(TT)と平行光線透過率(PT)とから、次の式で求めた。

40

【0324】

$$Hz = [\{ TT - PT \} / TT] \times 100 \quad (\%)$$

液晶素子のヘイズは、5か所のヘイズの値の平均値とした。得られた液晶素子の電圧印加前のヘイズは0.6%であった。なお、垂直配向性および配向ムラの評価基準は以下のとおりである。

【0325】

50

- : ヘイズが 0.5% 未満
- △ : ヘイズが 0.5% 以上 1.0% 未満
- : ヘイズが 1.0% 以上 3.0% 未満
- × : ヘイズが 3.0% 以上

この液晶素子に AC60V (60Hz、矩形波) の電圧を印加したところ、白濁して、入射光の散乱 (拡散) が確認できた。

(実施例 2 ~ 実施例 21、比較例 1 ~ 3)

実施例 2 ~ 実施例 20、及び、比較例 1 ~ 比較例 3 において、表 4 に示すとおり の複合組成物 (PN-2) ~ (PN-23) を調製した。得られた (PN-2) ~ (PN-23) は、いずれも、常温でネマチック相を示した。(PN-2) ~ (PN-23) について、実施例 1 と同様にして、低温安定性の評価試験を行った。また、(PN-2) ~ (PN-23) を用いた以外は実施例 1 と同様にして、高分子分散型液晶素子を作製し、垂直配向性の評価を行った。各々得られた結果を表 5 に示す。

【0326】

なお、実施例 2 ~ 21 の液晶素子も、実施例 1 と同様に電圧を印加したところ、白濁して、入射光の散乱 (拡散) が確認できた。

【0327】

【表 4】

	複合組成物	液晶組成物		重合性組成物		自発配向剤①		自発配向剤②	
		組成物	添加量(部)	組成物	添加量(部)	化合物	添加量(部)	化合物	添加量(部)
実施例1	PN-1	L-1	92	M-1	8	P-1	0.5		
実施例2	PN-2	L-1	92	M-1	8	P-1	0.2	P-2	0.4
実施例3	PN-3	L-1	92	M-1	8	P-3	0.7		
実施例4	PN-4	L-1	92	M-1	8	P-4	0.8		
実施例5	PN-5	L-1	92	M-1	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例6	PN-6	L-1	92	M-1	8	P-5	1		
実施例7	PN-7	L-2	92	M-1	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例8	PN-8	L-3	92	M-1	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例9	PN-9	L-4	92	M-1	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例10	PN-10	L-5	92	M-1	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例11	PN-11	L-6	92	M-1	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例12	PN-12	L-7	92	M-1	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例13	PN-13	L-1	92	M-2	8	P-1	0.2	P-2	0.4
実施例14	PN-14	L-1	92	M-3	8	P-4	0.8		
実施例15	PN-15	L-1	92	M-4	8	P-2	0.4	P-3	0.5
実施例16	PN-16	L-1	92	M-5	8	P-3	0.7		
実施例17	PN-17	L-1	92	M-6	8	P-1	0.2	P-2	0.4
実施例18	PN-18	L-1	92	M-7	8	P-3	0.7		
実施例19	PN-19	L-1	92	M-8	8	P-4	0.8		
実施例20	PN-20	L-1	92	M-9	8	P-2	0.4	P-3	0.5
比較例1	PN-21	L-1	92	M-1	8	P-6	1		
比較例2	PN-22	L-1	92	M-1	8	P-7	1		
比較例3	PN-23	L-6	92	M-4	8	P-8	0.9		

【0328】

10

20

30

40

50

【表 5】

	複合組成物	低温保存性	垂直配向性
実施例1	PN-1	A	○
実施例2	PN-2	A	◎
実施例3	PN-3	A	◎
実施例4	PN-4	A	◎
実施例5	PN-5	A	◎
実施例6	PN-6	A	○
実施例7	PN-7	A	◎
実施例8	PN-8	A	◎
実施例9	PN-9	A	◎
実施例10	PN-10	A	◎
実施例11	PN-11	A	◎
実施例12	PN-12	A	◎
実施例13	PN-13	A	◎
実施例14	PN-14	A	◎
実施例15	PN-15	A	◎
実施例16	PN-16	A	◎
実施例17	PN-17	A	◎
実施例18	PN-18	B	◎
実施例19	PN-19	A	◎
実施例20	PN-20	A	◎
比較例1	PN-21	C	△
比較例2	PN-22	C	△
比較例3	PN-23	C	×

10

20

30

【0329】

実施例及び比較例より、本発明の自発配向剤を含有する複合組成物は、低温保存性に優れた複合組成物を得られることがわかった。また、本発明の自発配向剤を含有する複合組成物を用いた高分子分散型液晶素子は、配向膜を用いなくても、配向ムラがなく垂直配向性に優れた素子を得られることがわかった。

【0330】

以上の結果から本発明の高分子分散型液晶素子用液晶組成物、及び高分子分散型液晶素子は、良好な電気光学特性を有する液晶素子を得ることができる。

【符号の説明】

【0331】

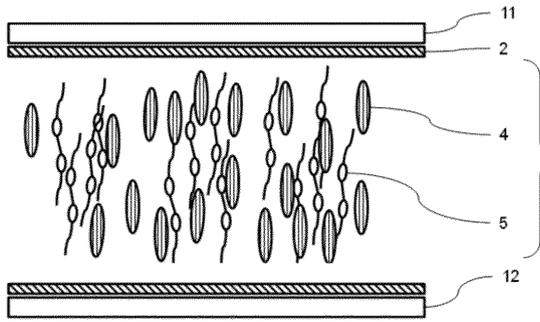
- 1 1 ... 第一の透明基板
- 1 2 ... 第二の透明基板
- 2 ... 電極
- 3 ... 垂直配向膜
- 4 ... 液晶分子
- 5 ... 配向性重合体

40

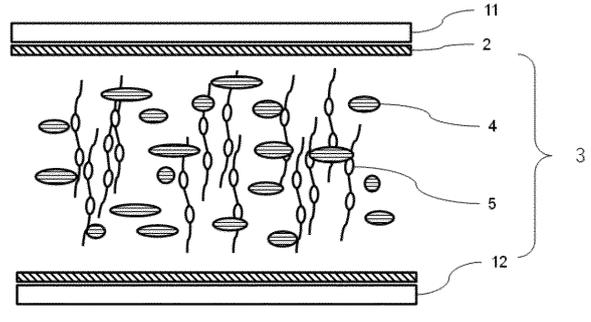
50

【図面】

【図 1】



【図 2】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

C 0 9 K	19/30	(2006.01)	C 0 9 K	19/30	
C 0 9 K	19/32	(2006.01)	C 0 9 K	19/32	
C 0 9 K	19/34	(2006.01)	C 0 9 K	19/34	
C 0 9 K	19/38	(2006.01)	C 0 9 K	19/38	
C 0 9 K	19/54	(2006.01)	C 0 9 K	19/54	Z
C 0 9 K	19/56	(2006.01)	C 0 9 K	19/56	
G 0 2 F	1/13	(2006.01)	G 0 2 F	1/13	5 0 0

(72)発明者 桑名 康弘

埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4 4 7 2 - 1

D I C 株式会社 埼玉工場内

(72)発明者 井ノ上 雄一

埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4 4 7 2 - 1

D I C 株式会社 埼玉工場内

(72)発明者 木村 正臣

埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4 4 7 2 - 1

D I C 株式会社 埼玉工場内

審査官 岩村 貴

(56)参考文献 国際公開第2 0 1 8 / 2 2 1 2 3 6 (W O , A 1)

国際公開第2 0 1 9 / 0 0 3 9 3 5 (W O , A 1)

国際公開第2 0 1 8 / 1 0 5 3 1 2 (W O , A 1)

(58)調査した分野 (Int.Cl. , D B 名)

G 0 2 F 1 / 1 3 3 4

G 0 2 F 1 / 1 3

G 0 2 F 1 / 1 3 3 7

C 0 9 K 1 9 / 5 4

C 0 9 K 1 9 / 5 6

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)