

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第4857552号
(P4857552)

(45) 発行日 平成24年1月18日(2012.1.18)

(24) 登録日 平成23年11月11日(2011.11.11)

(51) Int. Cl. F I
C09K 19/30 (2006.01) C09K 19/30
G02F 1/13 (2006.01) G02F 1/13 500
G02F 1/139 (2006.01) G02F 1/139

請求項の数 29 (全 53 頁)

(21) 出願番号	特願2004-353182 (P2004-353182)	(73) 特許権者	311002067 JNC株式会社 東京都千代田区大手町二丁目2番1号
(22) 出願日	平成16年12月6日(2004.12.6)	(73) 特許権者	596032100 JNC石油化学株式会社 東京都千代田区大手町二丁目2番1号
(65) 公開番号	特開2006-160857 (P2006-160857A)	(72) 発明者	藤田 浩章 千葉県市原市五井海岸5番地の1 チッソ 石油化学株式会社 五井研究所内
(43) 公開日	平成18年6月22日(2006.6.22)	(72) 発明者	服部 憲和 千葉県市原市五井海岸5番地の1 チッソ 石油化学株式会社 五井研究所内
審査請求日	平成19年9月26日(2007.9.26)	審査官	上村 直子

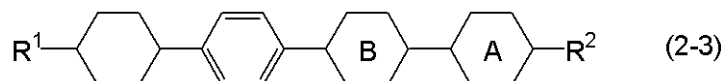
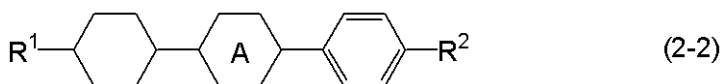
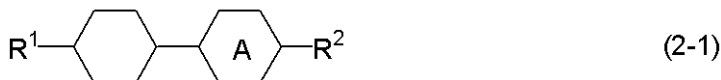
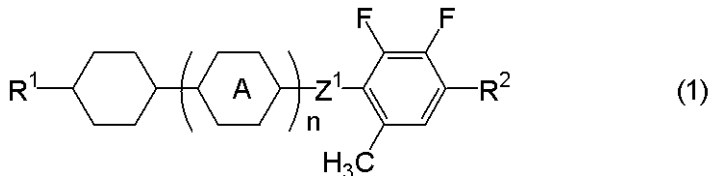
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 液晶組成物および液晶表示素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

第一成分として式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物、および第二成分として式(2-1)~(2-3)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



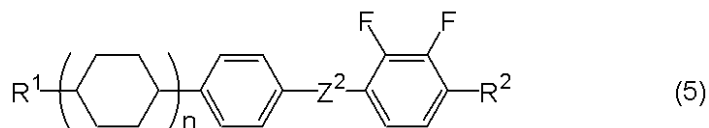
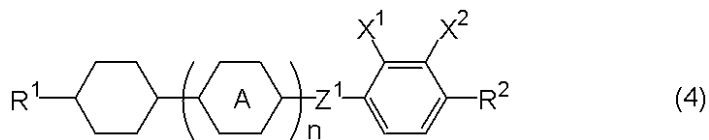
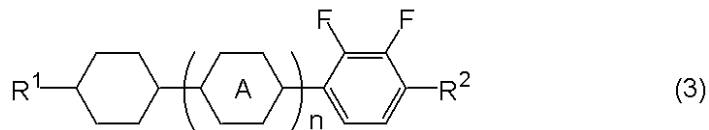
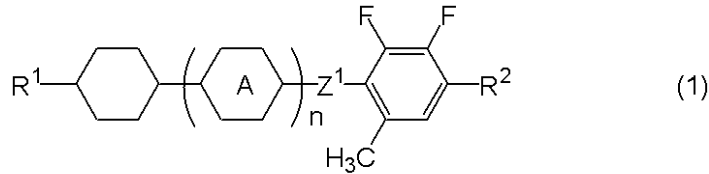
ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり； Z^1 は独立して単結合、 $-C_2H_4-$ 、 $-CH_2O-$ または $-CH=CH-$ であり；環 A は独立して 1, 4 - シクロヘキシレンまたは 1, 4 - フェニレンであり；環 B は独立して 1, 4 - フェニレンまたは任意の水素がフッ素に置き換えられた 1, 4 - フェニレンであり； n は独立して 0 または 1 である。

【請求項 2】

液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 30 ~ 95 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 70 重量% の範囲である、請求項 1 に記載の液晶組成物。

【請求項 3】

第一成分として式 (1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3) ~ (5) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、さらに負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり； Z^1 は独立して単結合、 $-C_2H_4-$ 、 $-CH_2O-$ または $-CH=CH-$ であり； Z^2 は独立して $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-C_2H_4CF_2O-$ または $-OCF_2C_2H_4-$ であり；環 A は独立して 1, 4 - シクロヘキシレンまたは 1, 4 - フェニレンであり； X^1 および X^2 の一方は $-F$ であり、他方は $-CF_2H$ であり； n は独立して 0 または 1 である。

【請求項 4】

液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 90 重量% の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 90 重量% の範囲である、請求項 3 に記載の液晶組成物。

【請求項 5】

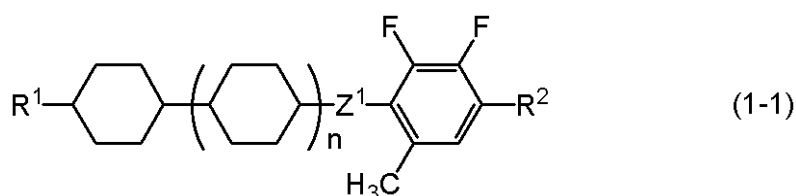
第一成分が式 (1 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

10

20

30

40

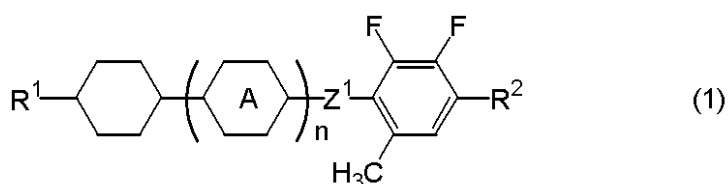


ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり； Z^1 は独立して単結合、 $-C_2H_4-$ 、 $-CH_2O-$ または $-CH=CH-$ であり； n は独立して 0 または 1 である。

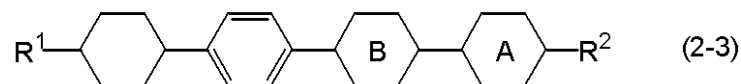
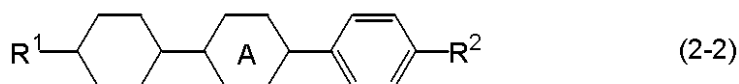
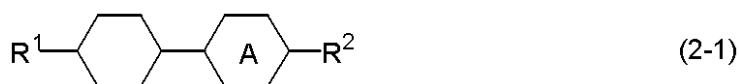
10

【請求項 6】

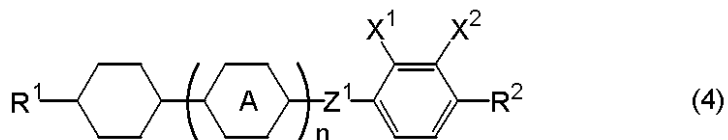
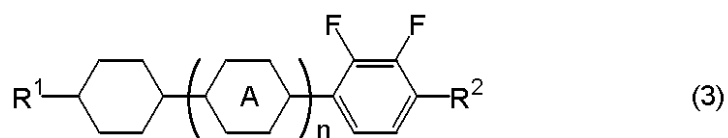
第一成分として式 (1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2-1) ~ (2-3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3) ~ (5) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



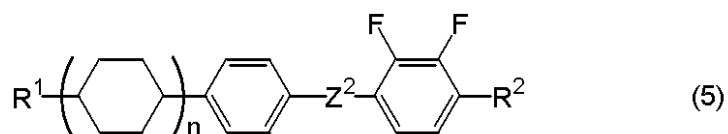
20



30



40



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり； Z^1 は独立して単結合、 $-C_2H_4-$ 、 $-CH_2O-$ または $-CH=CH-$ であり； Z^2 は独立して $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-C_2H_4CF_2O-$ または $-OCF_2C_2H_4-$ であり；環 A は独立して 1,4-シクロヘキシレン

50

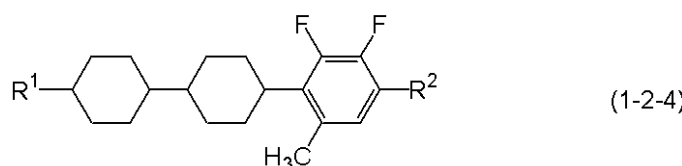
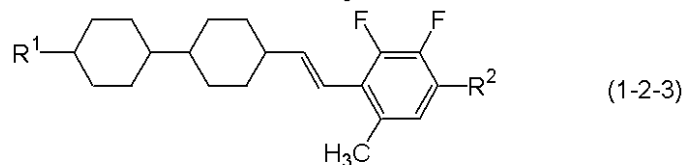
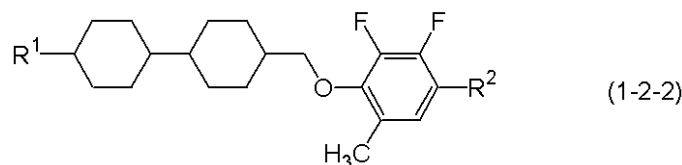
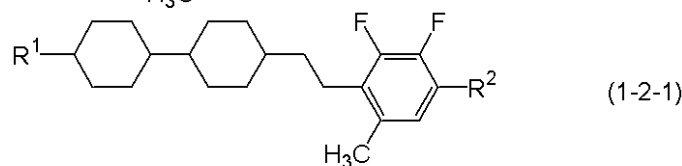
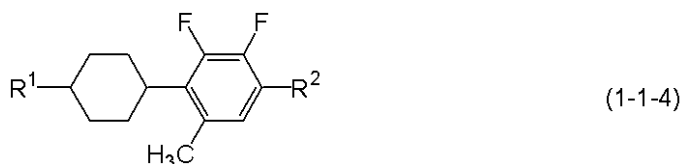
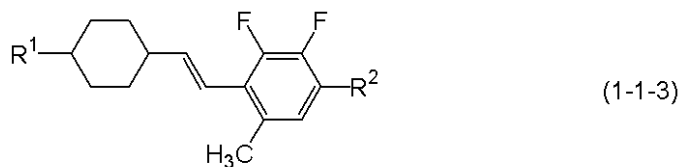
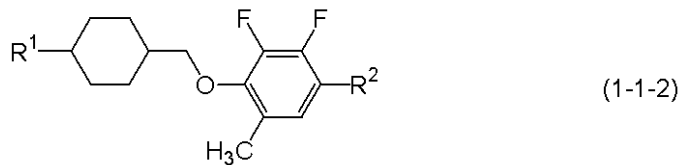
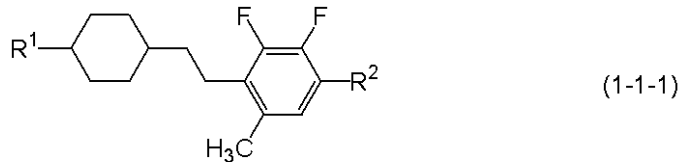
または 1, 4 - フェニレンであり ; 環 B は独立して 1, 4 - フェニレンまたは任意の水素がフッ素に置き換えられた 1, 4 - フェニレンであり ; X^1 および X^2 の一方は - F であり、他方は - CF_2H であり ; n は独立して 0 または 1 である。

【請求項 7】

液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 85 重量%の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 75 重量%の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 85 重量%の範囲である、請求項 6 に記載の液晶組成物。

【請求項 8】

第一成分が式 (1-1-1) ~ (1-1-4) および (1-2-1) ~ (1-2-4) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり ; R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

10

20

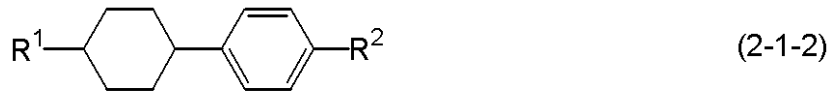
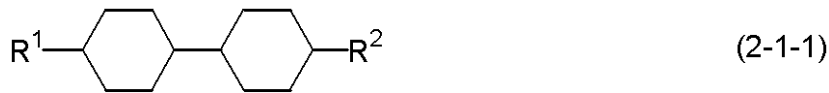
30

40

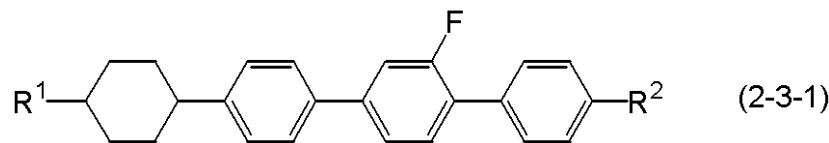
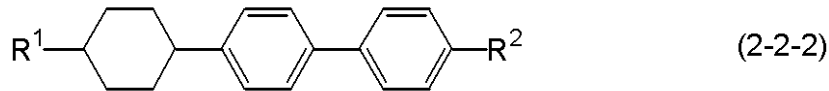
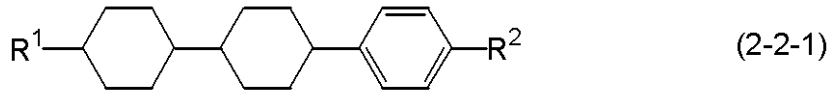
50

【請求項 9】

第二成分が式(2-1-1)、(2-1-2)、(2-2-1)、(2-2-2)および(2-3-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項1、2および5~8のいずれか1項に記載の液晶組成物。



10



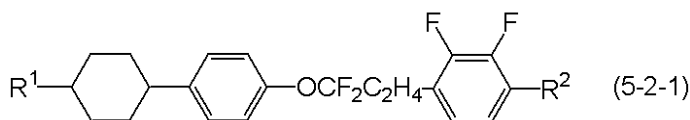
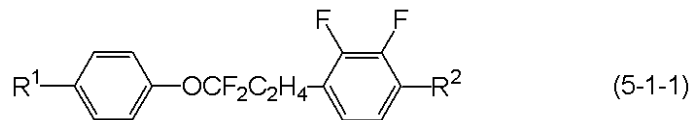
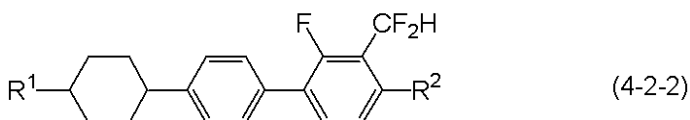
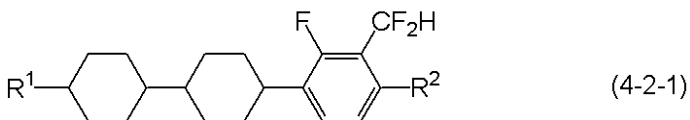
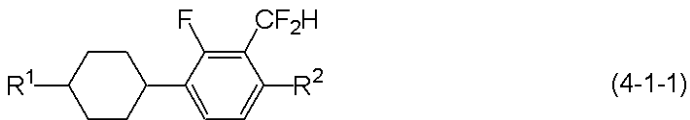
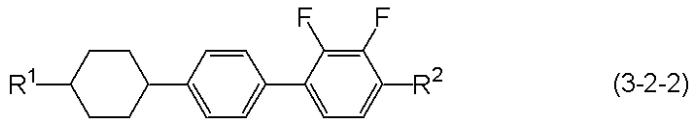
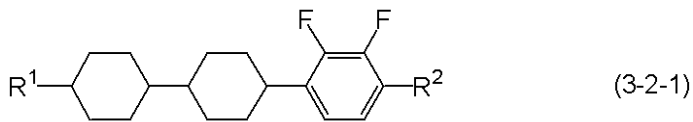
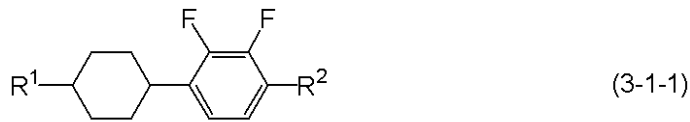
20

ここで、 R^1 は独立して炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数1~10のアルキル、炭素数2~10のアルケニルまたは炭素数1~9のアルコキシである。

【請求項 10】

第三成分が式(3-1-1)、(3-2-1)、(3-2-2)、(4-1-1)、(4-2-1)、(4-2-2)、(5-1-1)および(5-2-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項3~9のいずれか1項に記載の液晶組成物。

30



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【請求項 11】

第一成分として式 (1-1-1) ~ (1-1-4) および (1-2-1) ~ (1-2-4) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2-1-1)、(2-1-2)、(2-2-1)、(2-2-2)、および (2-3-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3-1-1)、(3-2-1)、(3-2-2)、(4-1-1)、(4-2-1)、(4-2-2)、(5-1-1)、および (5-2-1) で表される化合物の群から選

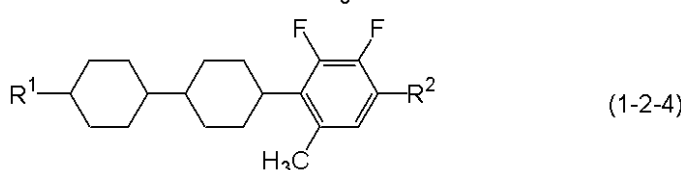
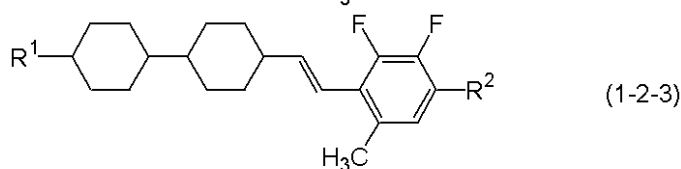
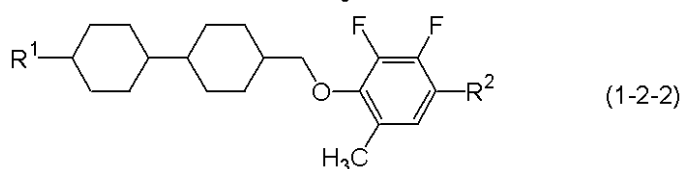
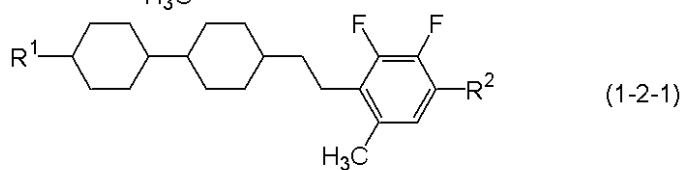
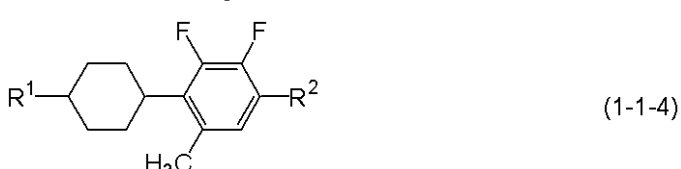
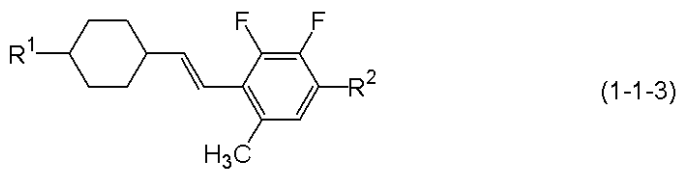
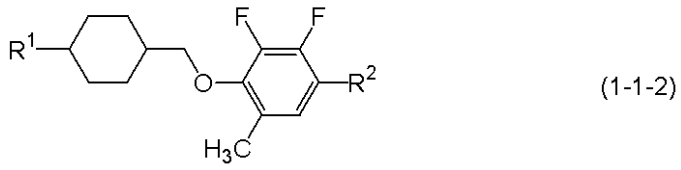
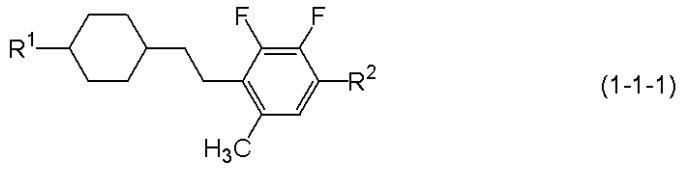
。

10

20

30

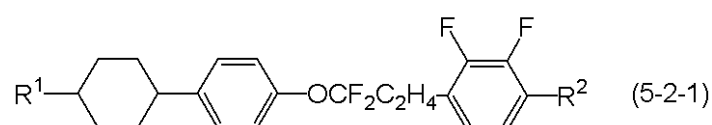
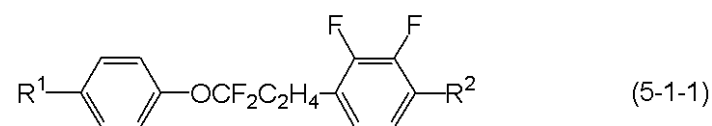
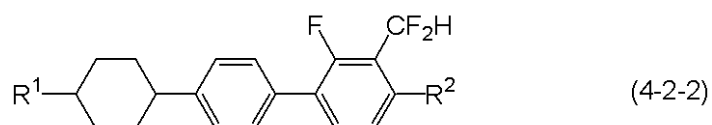
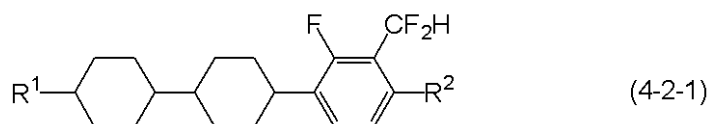
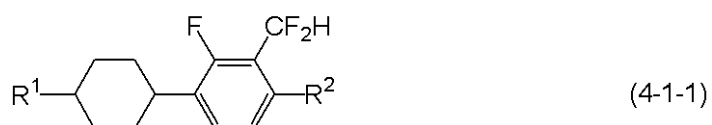
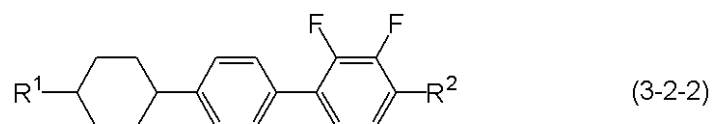
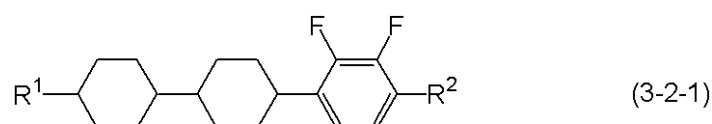
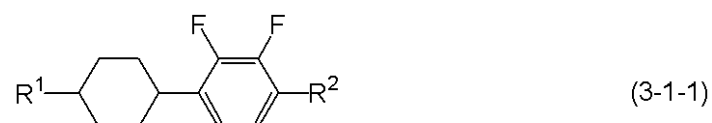
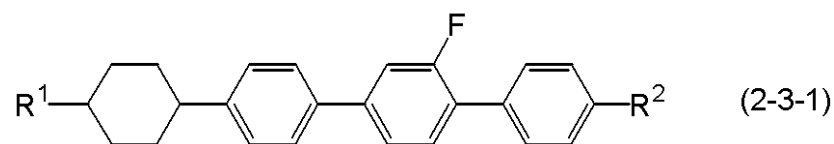
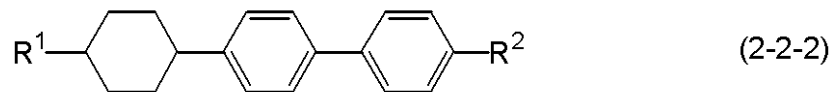
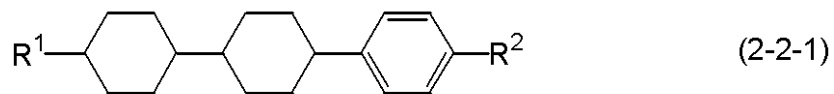
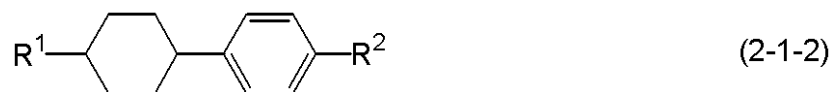
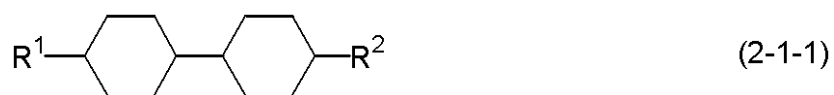
40



10

20

30



10

20

30

40

50

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【請求項 1 2】

液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 85 重量%の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 75 重量%の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 85 重量%の範囲である、請求項 1 1 に記載の液晶組成物。

【請求項 1 3】

第一成分が請求項 1 1 記載の式 (1 - 1 - 1) ~ (1 - 1 - 3) および (1 - 2 - 1) ~ (1 - 2 - 3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する請求項 1 ~ 1 2 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

10

【請求項 1 4】

第二成分が請求項 1 1 記載の式 (2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2) および (2 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する請求項 4、5 および 5 ~ 1 3 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

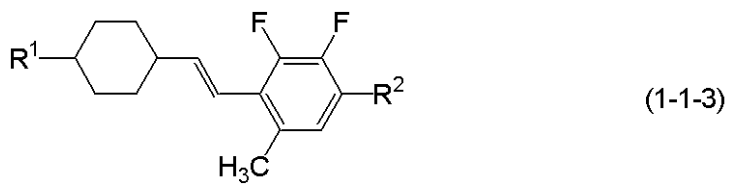
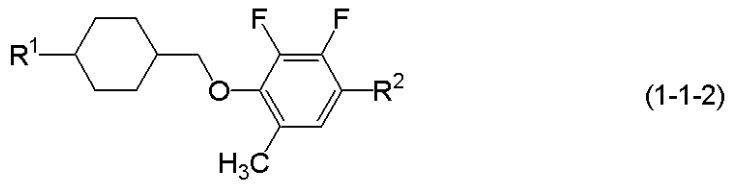
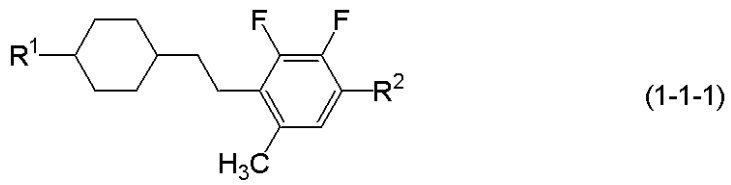
【請求項 1 5】

第三成分が請求項 1 1 記載の式 (3 - 1 - 1)、(3 - 2 - 1)、(4 - 1 - 1)、(4 - 2 - 1)、(5 - 1 - 1)、および (5 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有する請求項 3 ~ 1 4 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

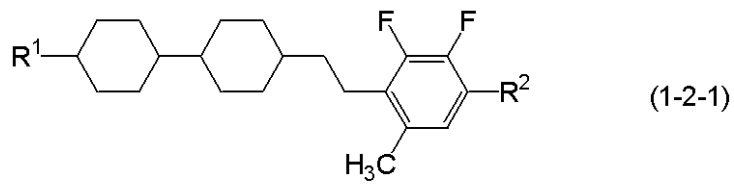
20

【請求項 1 6】

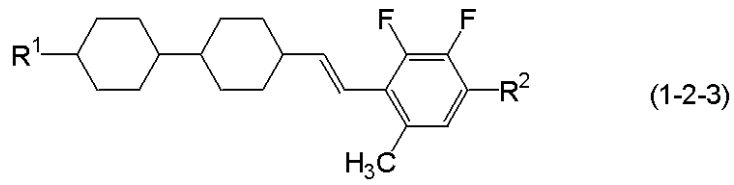
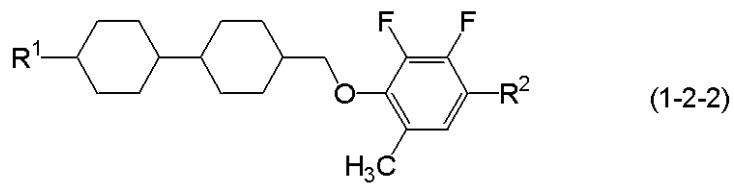
第一成分として式 (1 - 1 - 1) ~ (1 - 1 - 3) および (1 - 2 - 1) ~ (1 - 2 - 3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2) および (2 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3 - 1 - 1)、(3 - 2 - 1)、(4 - 1 - 1)、(4 - 2 - 1)、(5 - 1 - 1)、および (5 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



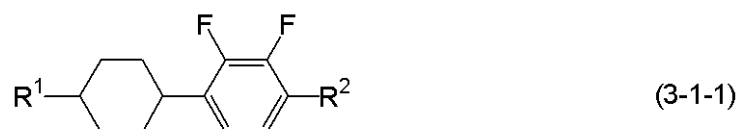
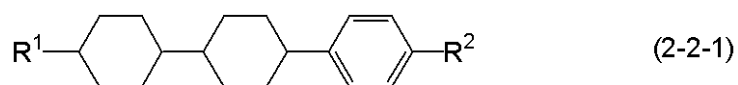
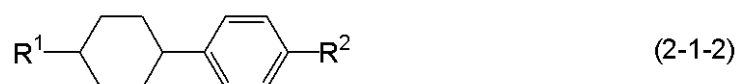
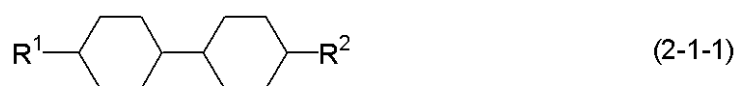
10



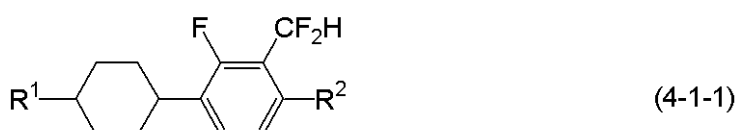
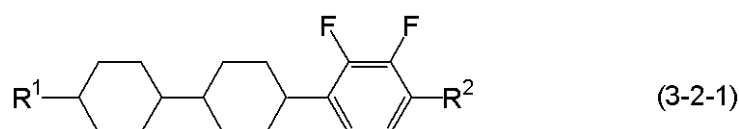
20



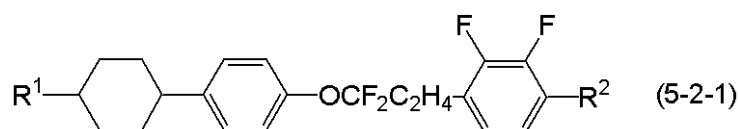
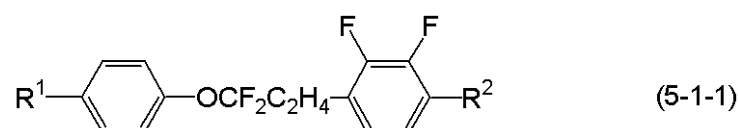
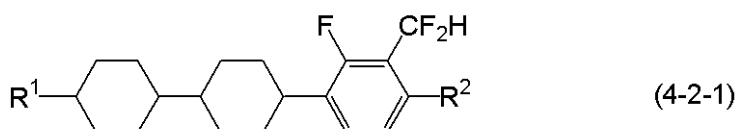
30



10



20



30

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

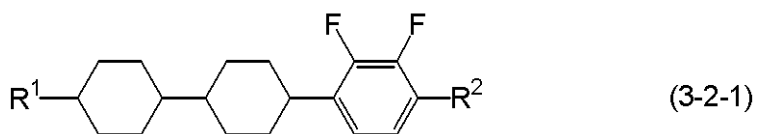
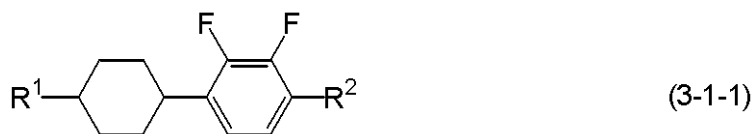
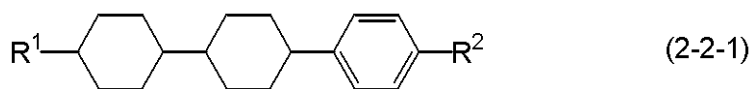
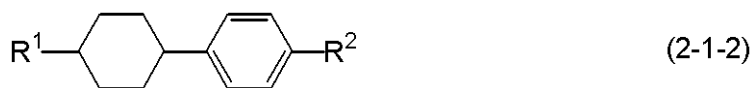
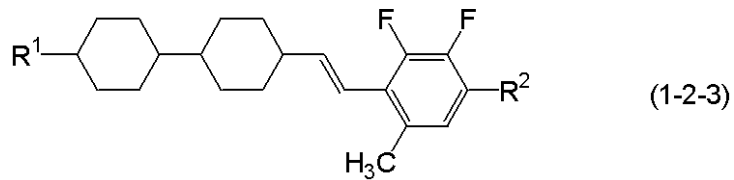
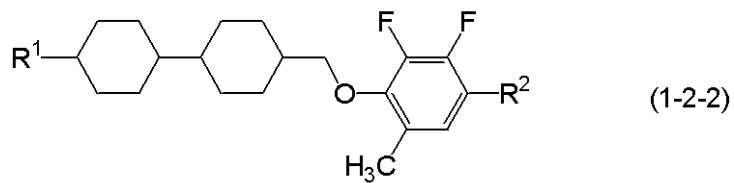
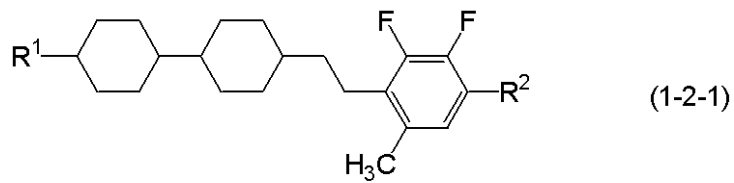
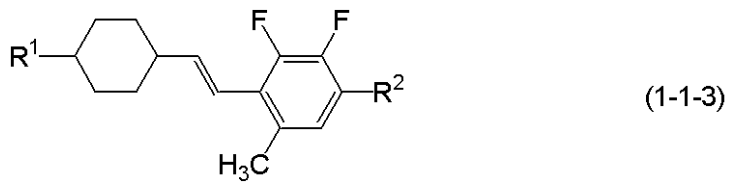
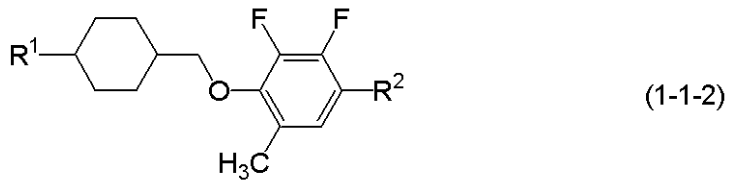
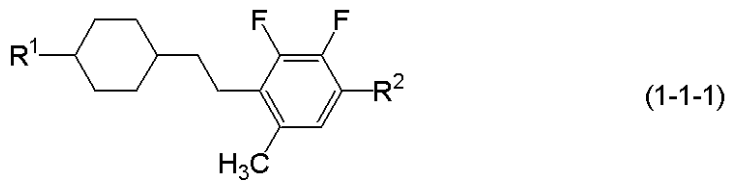
【請求項 17】

液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分での割合が 10 ~ 85 重量%の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 60 重量%の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 80 重量%の範囲である、請求項 16 に記載の液晶組成物。

40

【請求項 18】

第一成分として式 (1-1-1) ~ (1-1-3) および (1-2-1) ~ (1-2-3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2-1-1)、(2-1-2) および (2-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3-1-1) および (3-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭

10

20

30

40

50

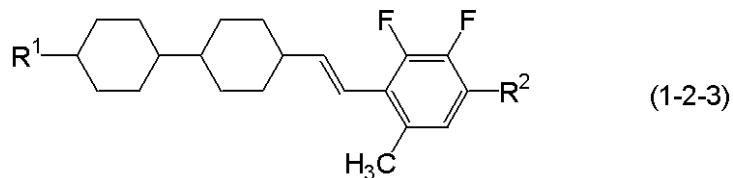
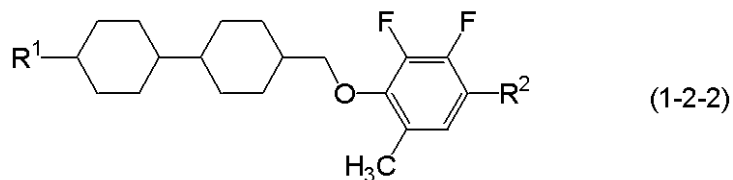
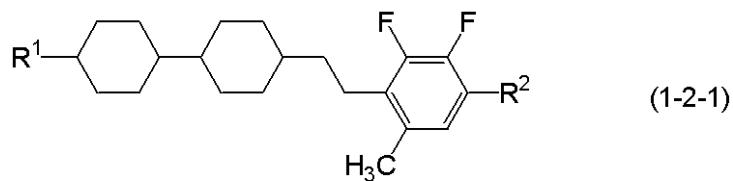
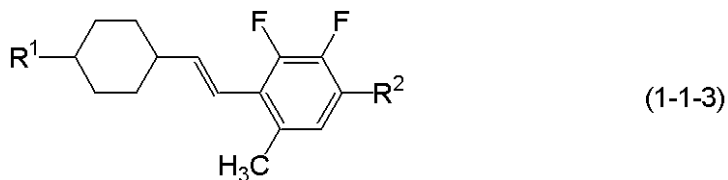
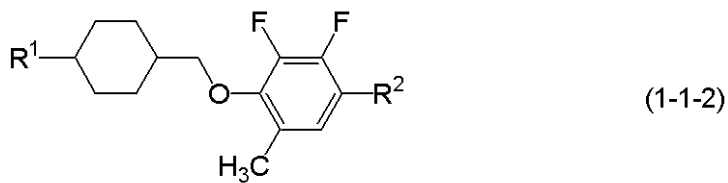
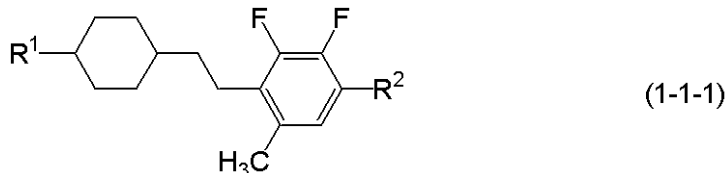
素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【請求項 19】

液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 85 重量%の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 60 重量%の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 70 重量%の範囲である、請求項 18 に記載の液晶組成物。

【請求項 20】

第一成分として式 (1-1-1) ~ (1-1-3) および (1-2-1) ~ (1-2-3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2-1-1)、(2-1-2) および (2-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (4-1-1)、(4-2-1)、(5-1-1)、および (5-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

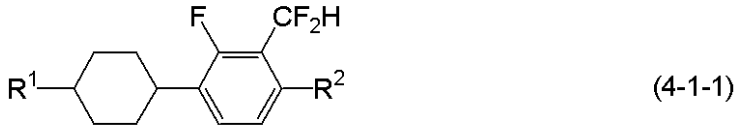
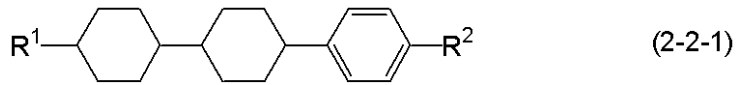
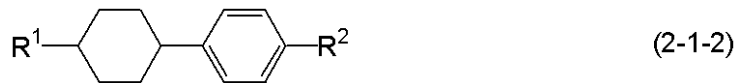
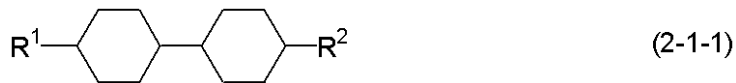


10

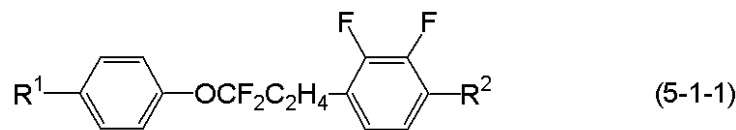
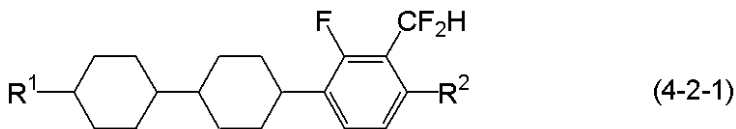
20

30

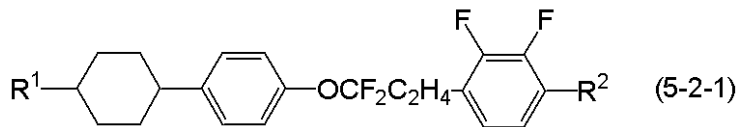
40



10



20



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【請求項 2 1】

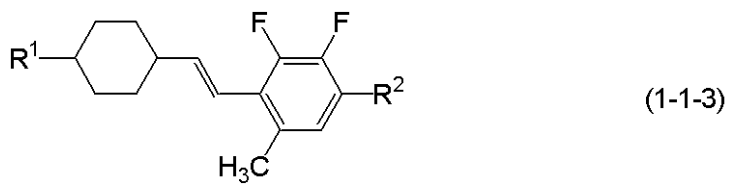
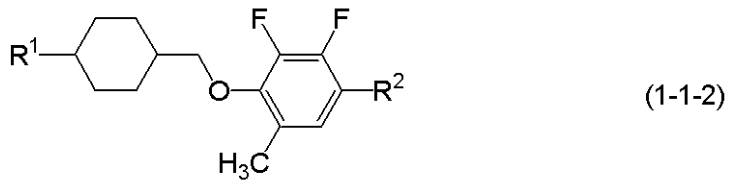
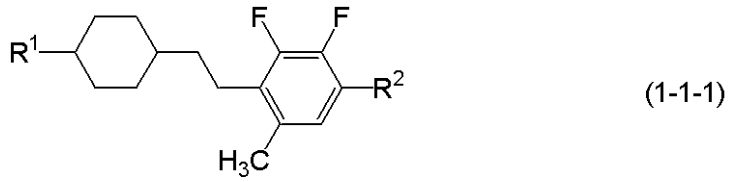
液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 85 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 50 重量% の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 80 重量% の範囲である、請求項 2 0 に記載の液晶組成物。

30

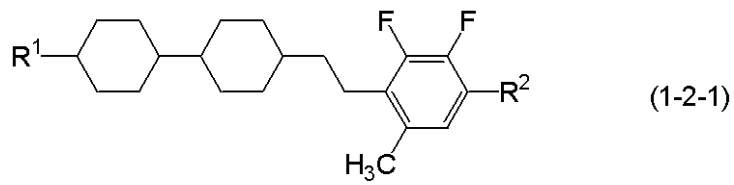
【請求項 2 2】

第一成分として式 (1-1-1) ~ (1-1-3) および (1-2-1) ~ (1-2-3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2-1-1)、(2-1-2) および (2-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第三成分として式 (3-1-1) および (3-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (4-1-1)、(4-2-1)、(5-1-1)、および (5-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

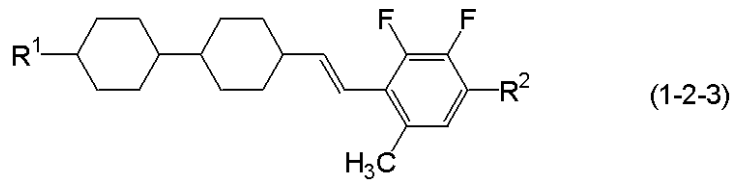
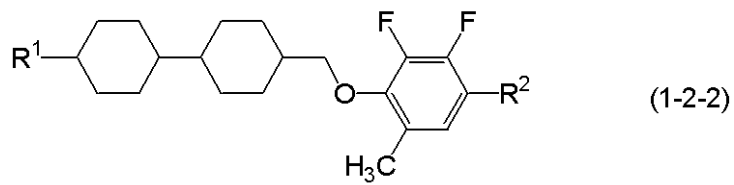
40



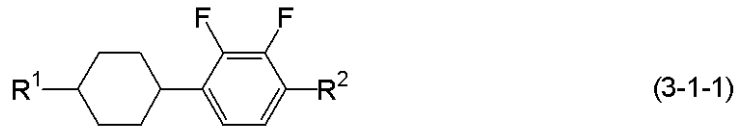
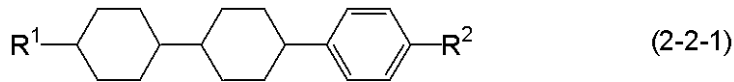
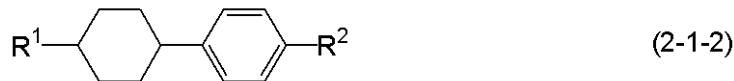
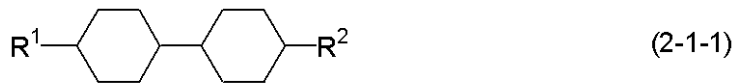
10



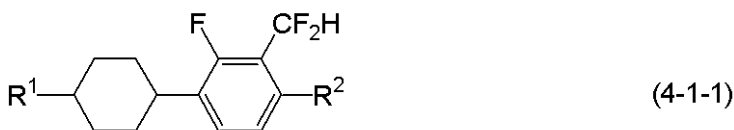
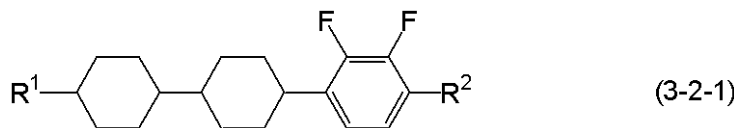
20



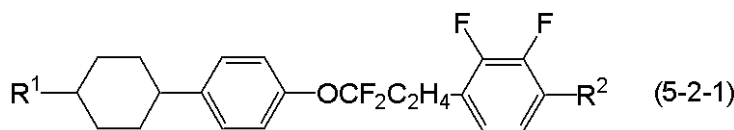
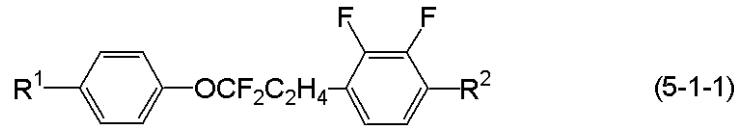
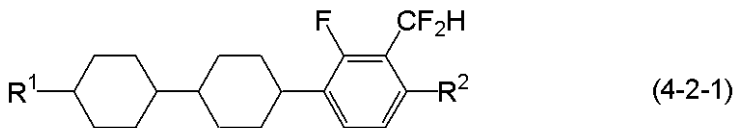
30



10



20



30

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

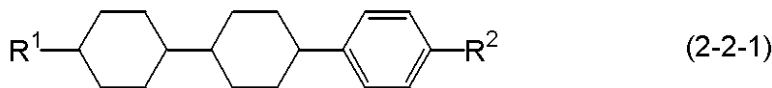
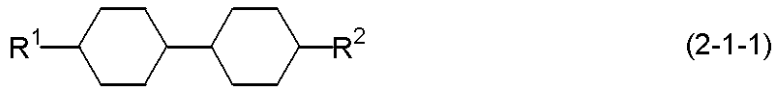
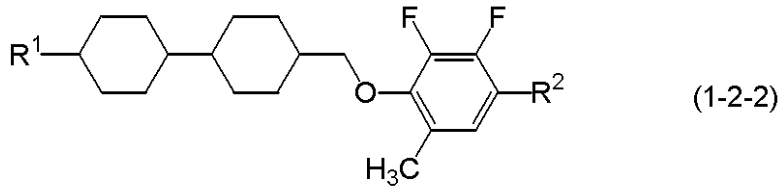
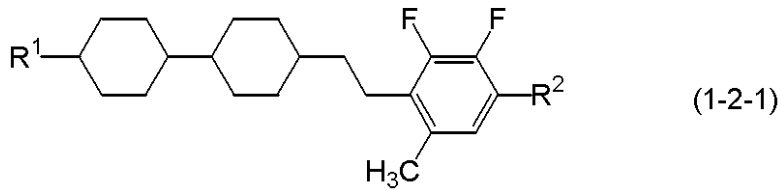
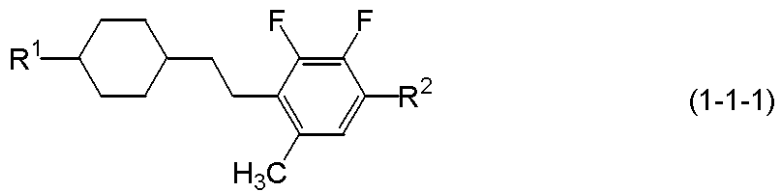
【請求項 23】

液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 75 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 50 重量% の範囲であり、第三成分のうち式 (3-1-1) および (3-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物の割合が 10 ~ 70 重量% の範囲であり、第三成分のうち式 (4-1-1)、(4-2-1)、(5-1-1)、および (5-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物の割合が 10 ~ 70 重量% の範囲である、請求項 22 に記載の液晶組成物。

40

【請求項 24】

第一成分として式 (1-1-1)、(1-2-1) および (1-2-2) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、第二成分として式 (2-1-1)、(2-1-2) および (2-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物をさらに含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【請求項 25】

液晶組成物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 50 ~ 90 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 10 ~ 50 重量% の範囲である、請求項 24 に記載の液晶組成物。

【請求項 26】

液晶組成物の誘電率異方性の値が -6.5 ~ -1.5 の範囲である請求項 1 ~ 25 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

【請求項 27】

請求項 1 ~ 26 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【請求項 28】

液晶表示素子が VA モードまたは IPS モードを有し、そしてアクティブマトリックスで駆動される請求項 27 に記載の液晶表示素子。

【請求項 29】

請求項 1 ~ 26 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を、VA モードまたは IPS モードを有し、そしてアクティブマトリックスで駆動される液晶表示素子に使用する方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、主として AM (active matrix) 素子に適する液晶組成物およびこの組成物を含有する AM 素子に関する。

【背景技術】

【0002】

10

20

30

40

50

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

10

【 0 0 0 3 】

これらの素子は適切な特性を有する液晶組成物を含有する。良好な一般的特性を有する A M 素子を得るには組成物の一般的特性を向上させる。2つの一般的特性における関連を下記の表 1 にまとめる。組成物の一般的特性を市販されている A M 素子に基づいてさらに説明する。ネマチック相の温度範囲は、素子の使用できる温度範囲に関連する。ネマチック相の好ましい上限温度は 70 以上であり、そしてネマチック相の好ましい下限温度は - 20 以下である。組成物の粘度は素子の応答時間に関連する。素子で動画を表示するためには短い応答時間が好ましい。したがって、組成物における小さな粘度が好ましい。低い温度における小さな粘度はより好ましい。

20

【 0 0 0 4 】

表1 組成物とAM素子における一般的特性

No	組成物の一般的特性	AM素子の一般的特性
1	ネマチック相の温度範囲が広い	使用できる温度範囲が広い
2	粘度が小さい ¹⁾	応答時間が短い
3	光学異方性が適切である	コントラスト比が大きい
4	正または負に誘電率異方性が大きい	駆動電圧が低い、消費電力が小さい
5	比抵抗が大きい	電圧保持率が大きい、コントラスト比が大きい

30

1) 液晶セルに組成物を注入する時間が短縮できる

【 0 0 0 5 】

組成物の光学異方性は、素子のコントラスト比に関連する。V A モード、I P S モードなどを有する素子は電氣的に制御された複屈折 (electrically controlled birefringence) を利用している。そこで、V A モードにおけるコントラスト比を最大にするために、組成物の光学異方性 (n) と素子のセルギャップ (d) との積 ($n \cdot d$) を一定の値に設計する。この値の例は $0.30 \sim 0.35 \mu\text{m}$ (V A モード) または $0.20 \sim 0.30 \mu\text{m}$ (I P S モード) である。セルギャップ (d) は通常 $3 \sim 6 \mu\text{m}$ であるので、組成物における光学異方性は主に $0.05 \sim 0.11$ の範囲である。組成物の大きな誘電率異方性は素子の小さな駆動電圧に寄与する。したがって、大きな誘電率異方性が好ましい。通常の A M 素子においては正の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。一方、V A モードの A M 素子においては負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。組成物における大きな比抵抗は、素子における大きな電圧保持率と大きなコントラスト比に寄与する。したがって、初期に大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。長時間使用したあとも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。

40

【 0 0 0 6 】

負の誘電率異方性を有する組成物は、負の誘電率異方性を有する化合物を含有する。こ

50

のような化合物として、例えば 6 - メチル - 2 , 3 - ジフロロ - 1 , 4 - フェニレンを有する負の誘電率異方性を有する化合物が記載されている（例えば、特許文献 1 参照）。

【 0 0 0 7 】

【特許文献 1】特開平 1 0 - 2 9 1 9 4 5 号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【 0 0 0 8 】

本発明の目的は、ネマチック相の広い温度範囲、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗などの特性において、複数の特性を充足する液晶組成物を提供することにある。この目的は複数の特性に関して適切なバランスを有する液晶組成物を提供することでもある。この目的はネマチック相の広い温度範囲、特にネマチック相の下限温度が - 2 0 以下である液晶組成物を提供することでもある。この目的は、この組成物を含有し、そして大きな電圧保持率を有する液晶表示素子を提供することでもある。この目的は、小さな粘度、0 . 0 5 ~ 0 . 1 1 の光学異方性、- 6 . 5 ~ - 1 . 5 の誘電率異方性などの特性を有する組成物を含有し、そして V A モード、I P S モードなどに適した A M 素子を提供することでもある。

10

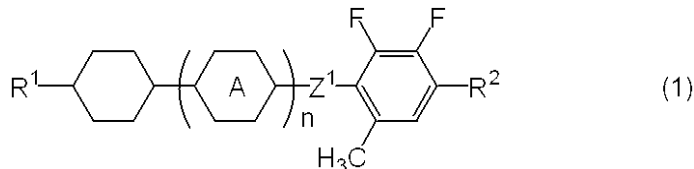
【課題を解決するための手段】

【 0 0 0 9 】

本発明は下記の項などである。

1 . 第一成分として式 (1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 2 つの化合物を含有し、負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

20



ここで、R¹ は独立して炭素数 1 ~ 1 0 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 1 0 のアルケニルであり；R² は独立して炭素数 1 ~ 1 0 のアルキル、炭素数 2 ~ 1 0 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり；Z¹ は独立して単結合、- C₂H₄ -、- CH₂O - または - CH = CH - であり；環 A は独立して 1 , 4 - シクロヘキシレンまたは 1 , 4 - フェニレンであり；n は独立して 0 または 1 である。

30

【 0 0 1 0 】

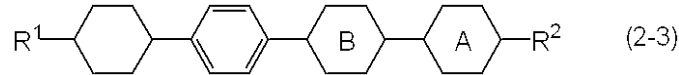
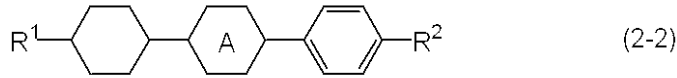
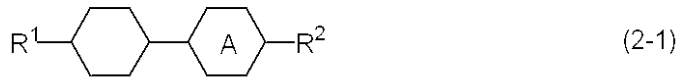
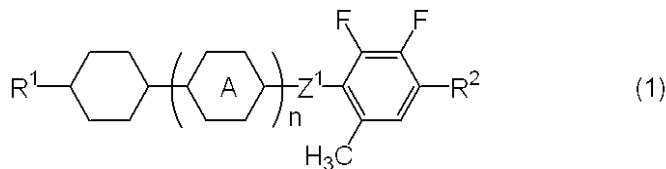
2 . 第一成分が式 (1) において n = 0 で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および式 (1) において n = 1 で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である、項 1 に記載の液晶組成物。

3 . 液晶化合物の全重量に基づいて、式 (1) において n = 0 で表される化合物の成分の割合が 2 0 ~ 6 0 重量%の範囲であり、式 (1) において n = 1 で表される化合物の成分の割合が 4 0 ~ 8 0 重量%の範囲である、項 1 または 2 に記載の液晶組成物。

【 0 0 1 1 】

4 . 第一成分として式 (1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第二成分として式 (2 - 1) ~ (2 - 3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

40



【0012】

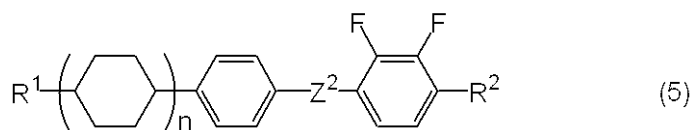
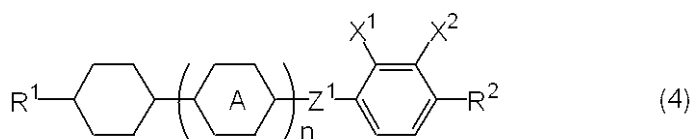
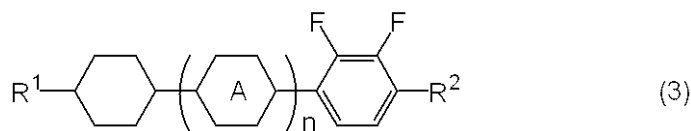
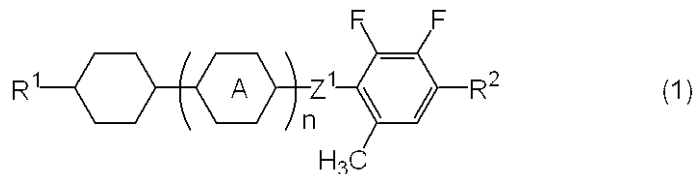
ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり； Z^1 は独立して単結合、 $-C_2H_4-$ 、 $-CH_2O-$ または $-CH=CH-$ であり；環 A は独立して 1, 4 - シクロヘキシレンまたは 1, 4 - フェニレンであり；環 B は独立して 1, 4 - フェニレンまたは任意の水素がフッ素に置き換えられた 1, 4 - フェニレンであり； n は独立して 0 または 1 である。

【0013】

5. 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 30 ~ 95 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 70 重量% の範囲である、項 4 に記載の液晶組成物。

【0014】

6. 第一成分として式 (1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3) ~ (5) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、さらに負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



【0015】

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり； Z^1 は独立して単結合、 $-C_2H_4-$ 、 $-CH_2O-$ または $-CH=CH-$ であり； Z^2 は独立して $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-C_2H_4CF_2O-$ または $-OCF_2C_2H_4-$ であり；環 A は独立して 1, 4 - シクロヘキシレン

10

20

30

40

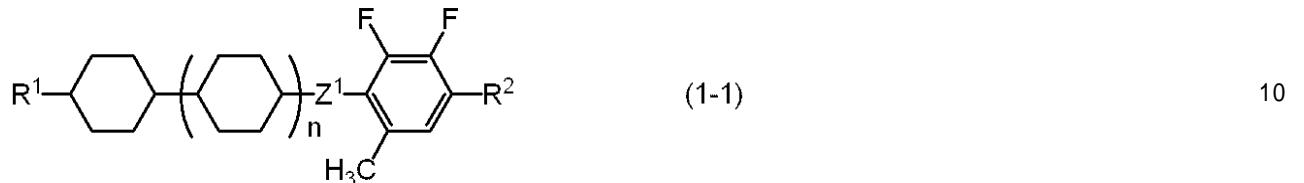
50

または 1,4-フェニレンであり; X^1 および X^2 の一方は -F であり、他方は -CF₂H であり; n は独立して 0 または 1 である。

7. 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 90 重量% の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 90 重量% の範囲である、項 6 に記載の液晶組成物。

【0016】

8. 第一成分が式(1-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

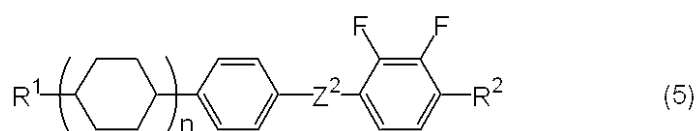
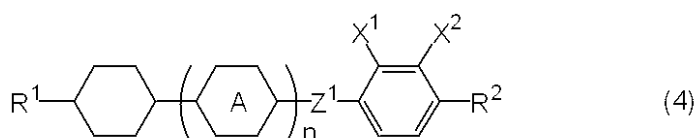
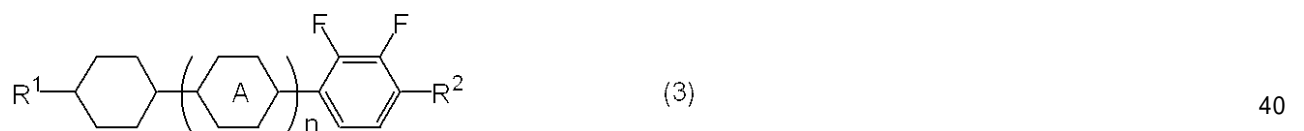
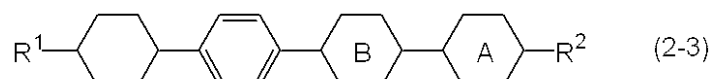
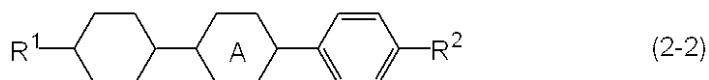
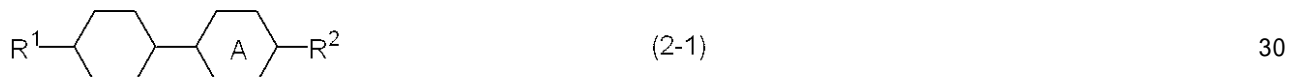
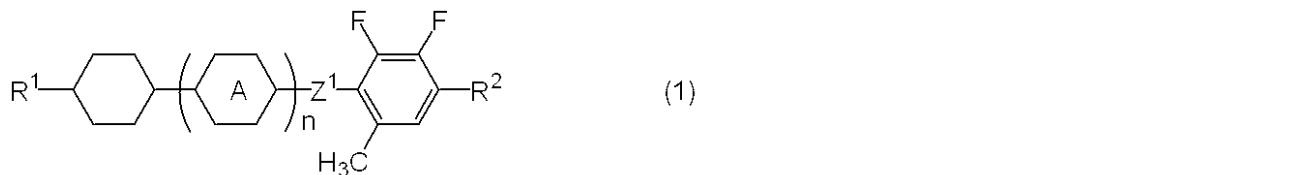


ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり; R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり; Z^1 は独立して単結合、-C₂H₄-、-CH₂O- または -CH=CH- であり; n は独立して 0 または 1 である。

【0017】

9. 第一成分として式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式(2-1) ~ (2-3)で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式(3) ~ (5)で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

【0018】



【0019】

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシであり； Z^1 は独立して単結合、 $-C_2H_4-$ 、 $-CH_2O-$ または $-CH=CH-$ であり； Z^2 は独立して $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $C_2H_4CF_2O-$ または $-OCF_2C_2H_4-$ であり；環 A は独立して 1, 4 - シクロヘキシレンまたは 1, 4 - フェニレンであり；環 B は独立して 1, 4 - フェニレンまたは任意の水素がフッ素に置き換えられた 1, 4 - フェニレンであり； X^1 および X^2 の一方は $-F$ であり、他方は $-CF_2H$ であり； n は独立して 0 または 1 である。

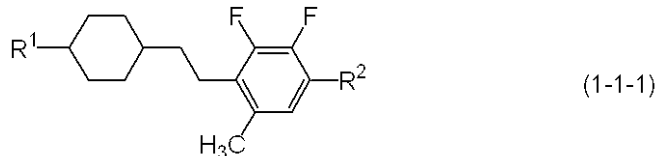
【0020】

10 . 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 85 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 75 重量% の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 85 重量% の範囲である、項 9 に記載の液晶組成物。

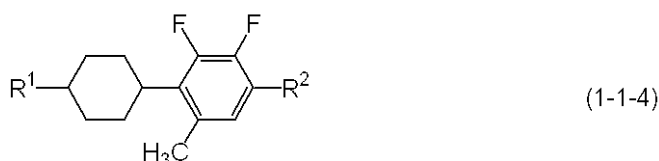
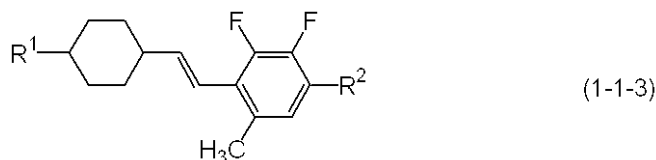
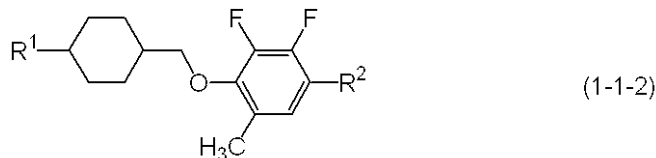
10

【0021】

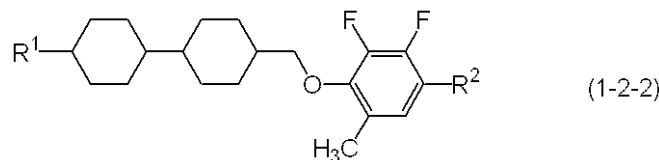
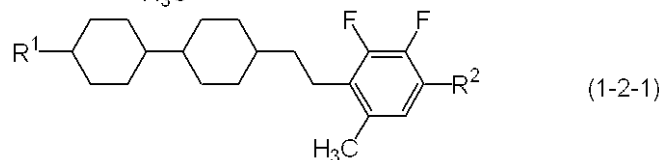
11 . 第一成分が式 (1-1-1) ~ (1-1-4) および (1-2-1) ~ (1-2-4) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



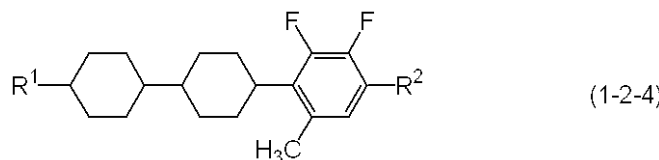
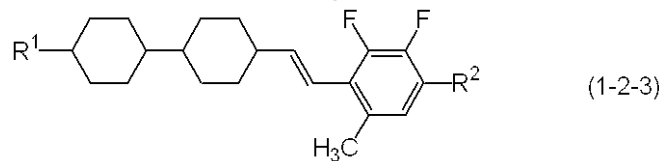
20



30



40

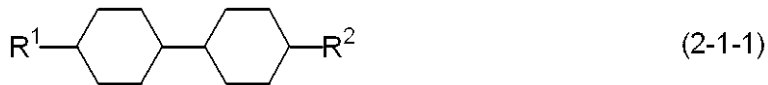


50

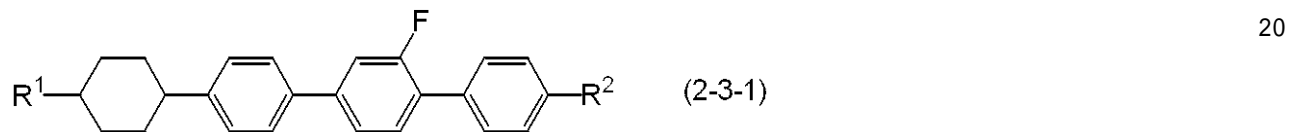
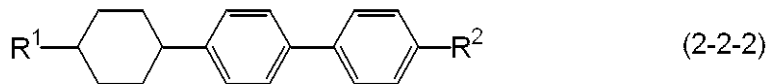
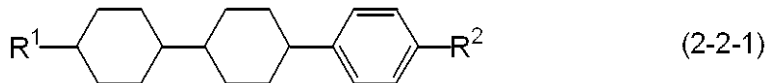
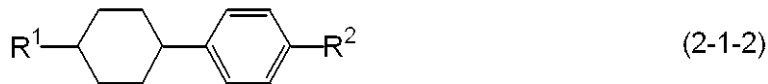
ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【 0 0 2 2 】

12. 第二成分が式 (2-1-1)、(2-1-2)、(2-2-1)、(2-2-2) および (2-3-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である項 4、5 および 8 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



10



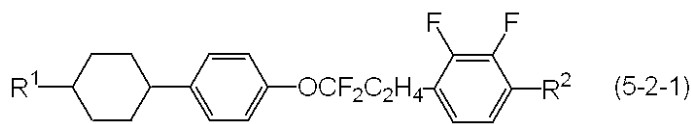
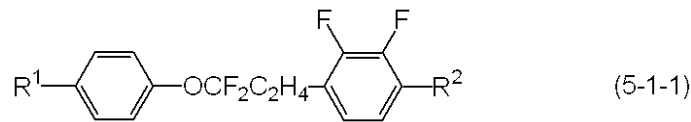
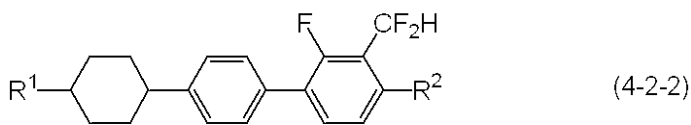
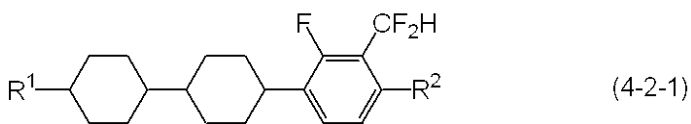
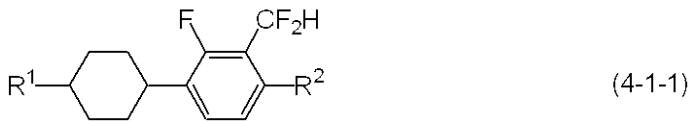
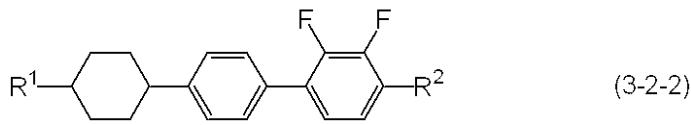
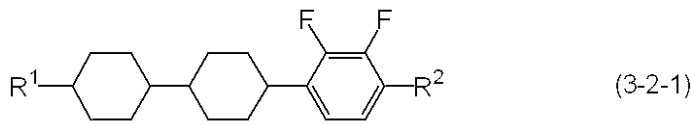
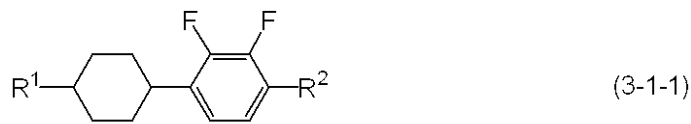
20

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【 0 0 2 3 】

13. 第三成分が式 (3-1-1)、(3-2-1)、(3-2-2)、(4-1-1)、(4-2-1)、(4-2-2)、(5-1-1) および (5-2-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である項 6 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

30



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【 0 0 2 4 】

14 . 第一成分として式 (1 - 1 - 1) ~ (1 - 1 - 4) および (1 - 2 - 1) ~ (1 - 2 - 4) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2)、(2 - 2 - 1)、(2 - 2 - 2)、および (2 - 3 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3 - 1 - 1)、(3 - 2 - 1)、(3 - 2 - 2)、(4 - 1 - 1)、(4 - 2 - 1)、(4 - 2 - 2)、(5 - 1 - 1)、および (5 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

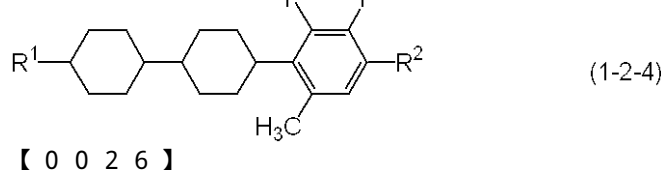
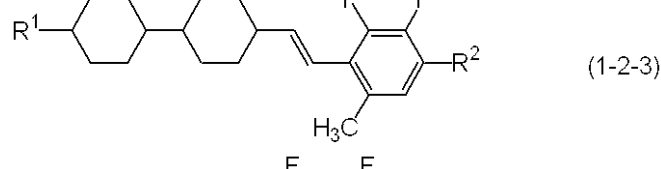
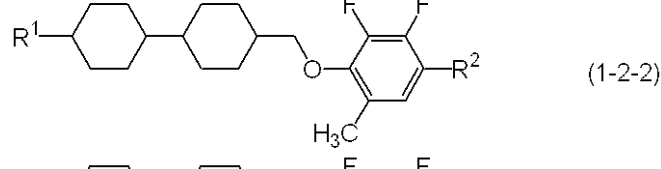
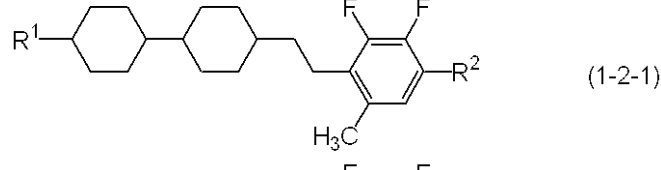
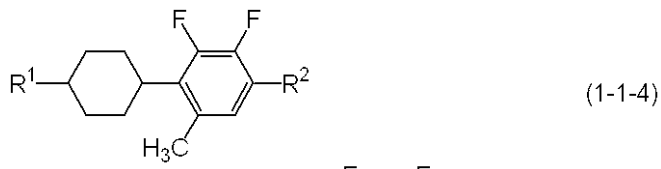
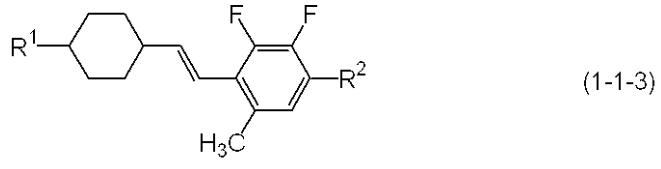
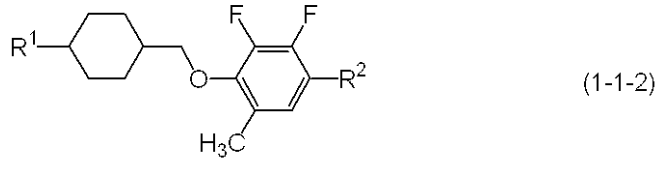
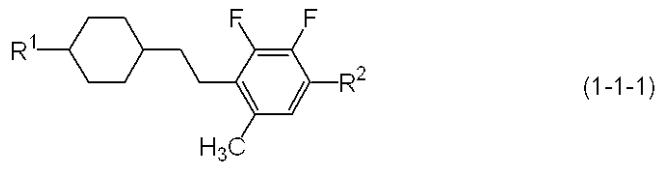
【 0 0 2 5 】

10

20

30

40

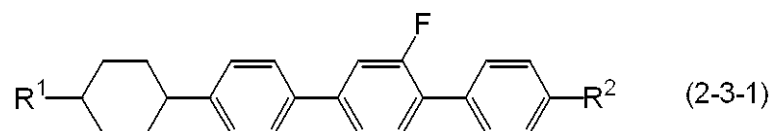
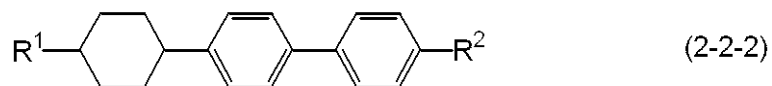
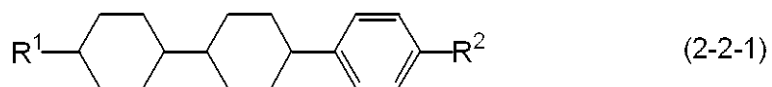
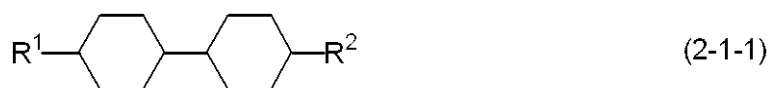


【 0 0 2 6 】

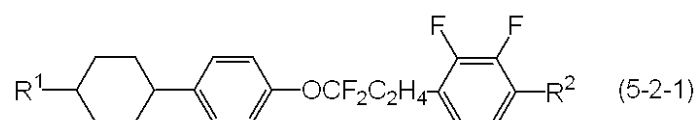
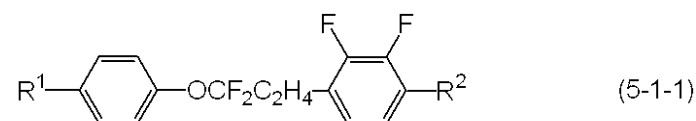
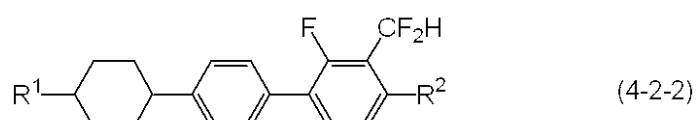
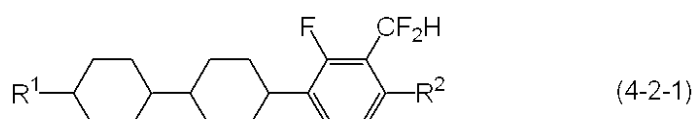
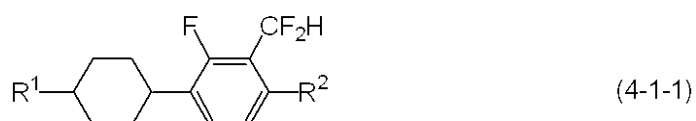
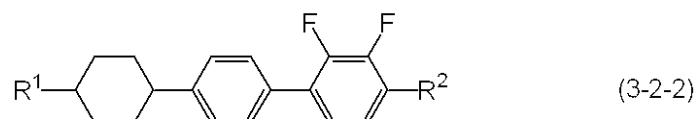
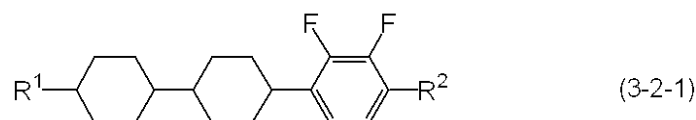
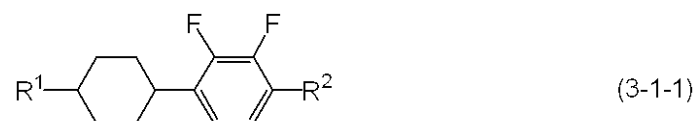
10

20

30



【 0 0 2 7 】



ここで、R¹は独立して炭素数1～10のアルキルまたは炭素数2～10のアルケニルであり；R²は独立して炭素数1～10のアルキル、炭素数2～10のアルケニルまたは炭素数1～9のアルコキシである。

10

20

30

40

50

【0028】

15. 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が10～85重量%の範囲であり、第二成分の割合が5～75重量%の範囲であり、第三成分の割合が10～85重量%の範囲である、項14に記載の液晶組成物。

16. 第一成分が項14記載の式(1-1-1)～(1-1-3)および(1-2-1)～(1-2-3)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する項1～15のいずれか1項に記載の液晶組成物。

【0029】

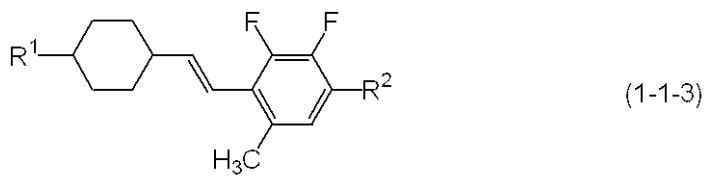
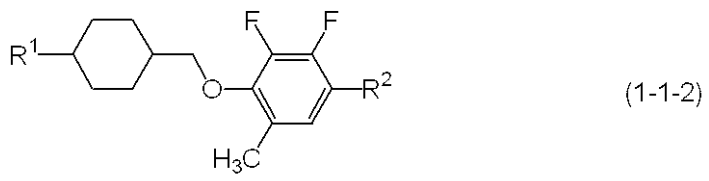
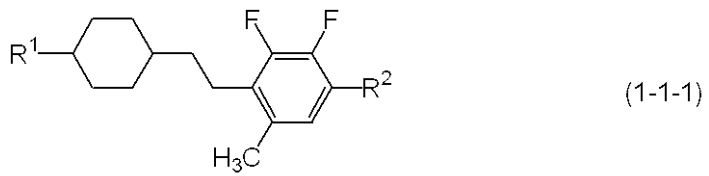
17. 第二成分が項14記載の式(2-1-1)、(2-1-2)および(2-2-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する項4、5および8～16のいずれか1項に記載の液晶組成物。 10

18. 第三成分が項14記載の式(3-1-1)、(3-2-1)、(4-1-1)、(4-2-1)、(5-1-1)、および(5-2-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する項6～17のいずれか1項に記載の液晶組成物。

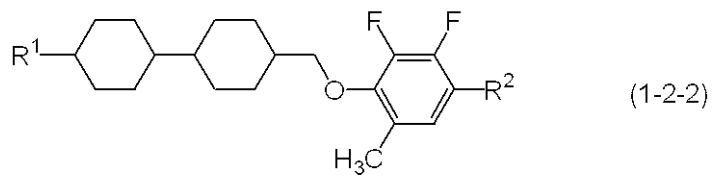
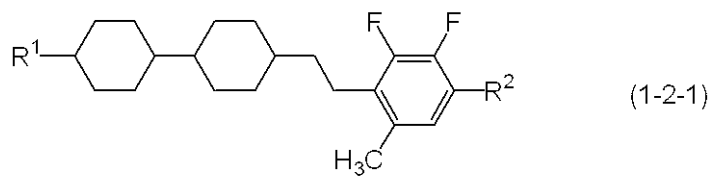
【0030】

19. 第一成分として式(1-1-1)～(1-1-3)および(1-2-1)～(1-2-3)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物、第二成分として式(2-1-1)、(2-1-2)および(2-2-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物、および第三成分として式(3-1-1)、(3-2-1)、(4-1-1)、(4-2-1)、(5-1-1)、および(5-2-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。 20

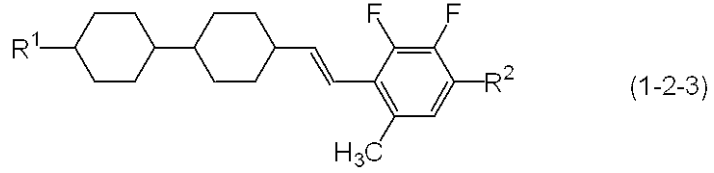
【0031】



10

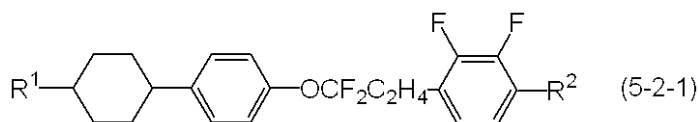
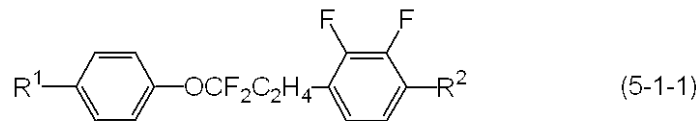
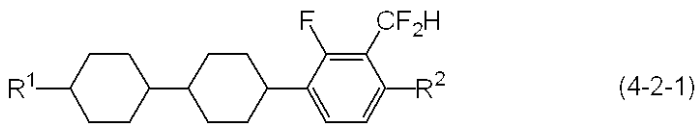
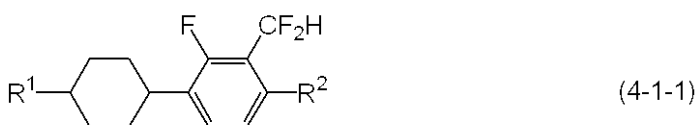
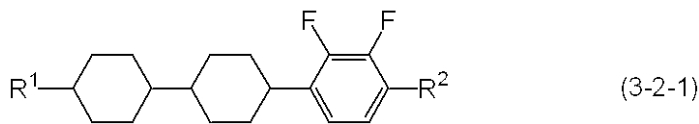
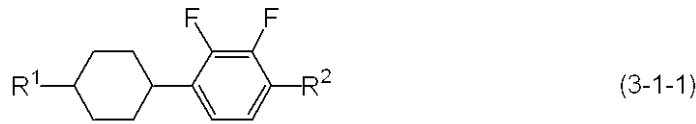
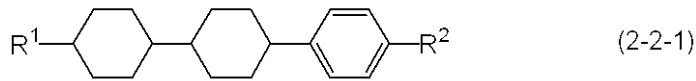
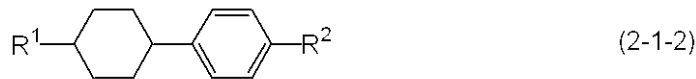
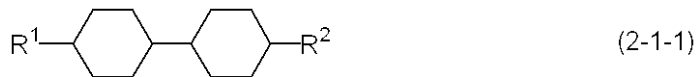


20



【 0 0 3 2 】

30



10

20

30

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

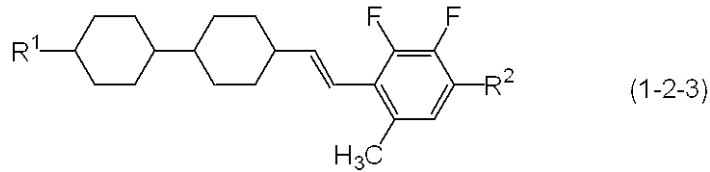
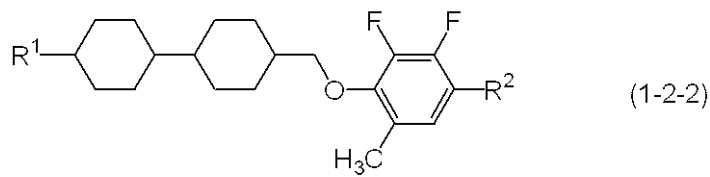
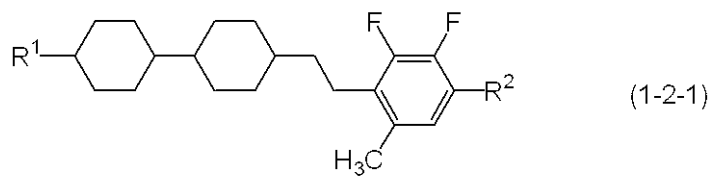
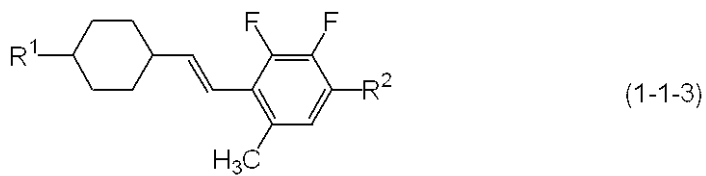
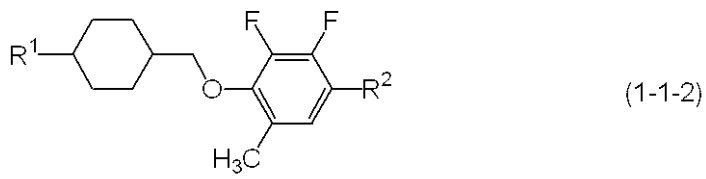
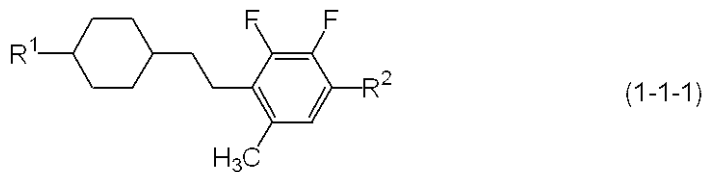
【 0 0 3 3 】

20 . 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分での割合が 10 ~ 85 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 60 重量% の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 80 重量% の範囲である、項 19 に記載の液晶組成物。

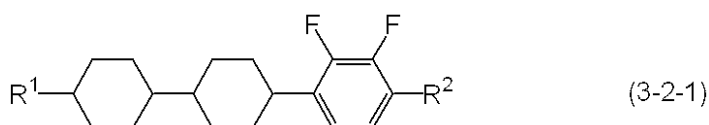
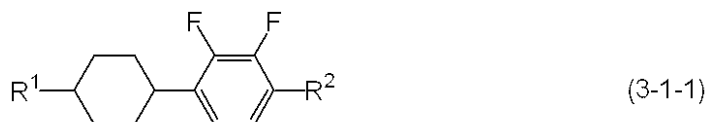
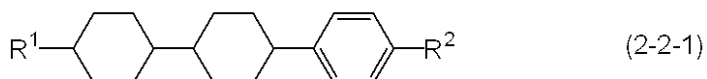
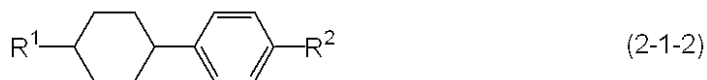
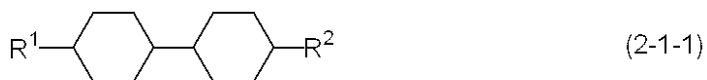
21 . 第一成分として式 (1 - 1 - 1) ~ (1 - 1 - 3) および (1 - 2 - 1) ~ (1 - 2 - 3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2) および (2 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (3 - 1 - 1) および (3 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

40

【 0 0 3 4 】



【 0 0 3 5 】



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【 0 0 3 6 】

2 2 . 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 1 0 ~ 8 5 重量% の範囲であ

10

20

30

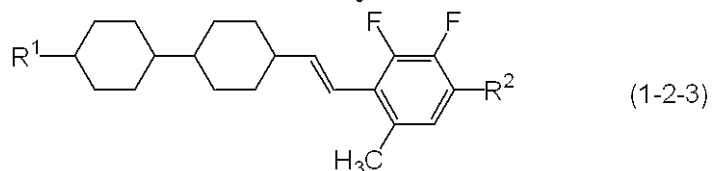
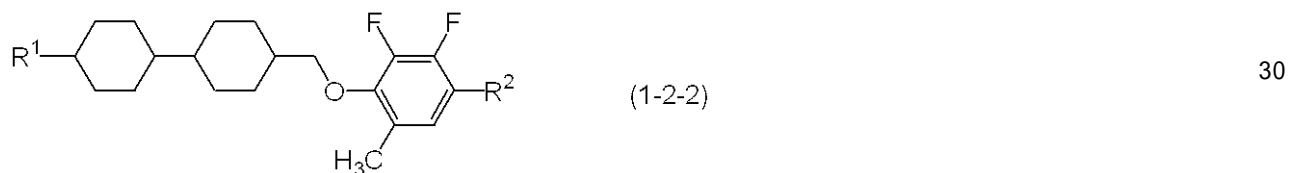
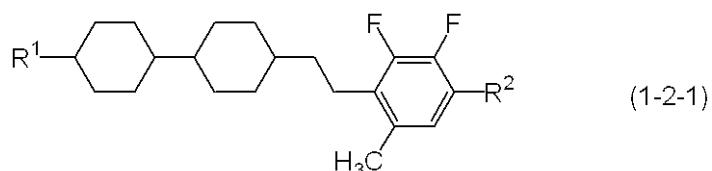
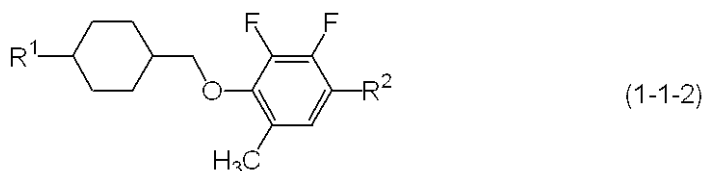
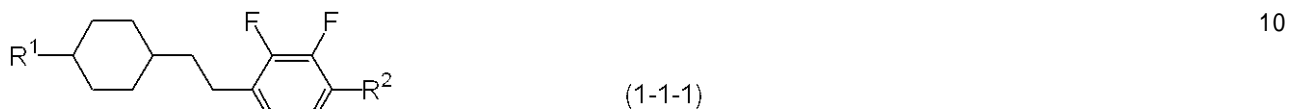
40

50

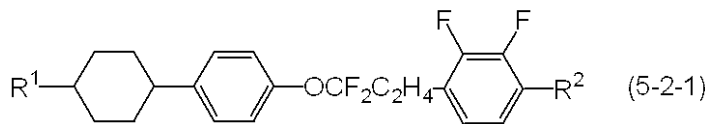
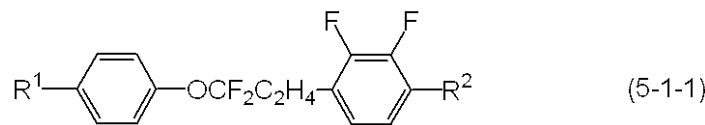
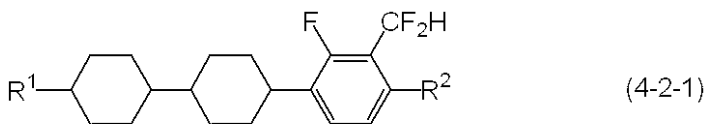
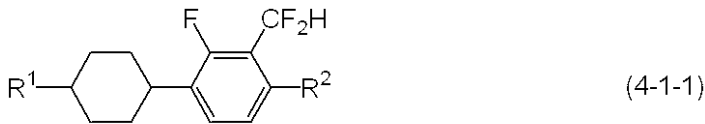
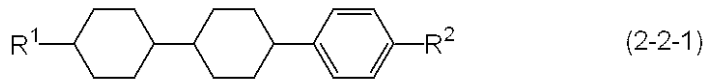
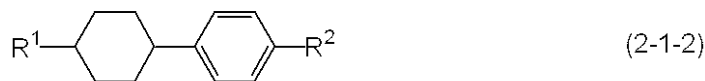
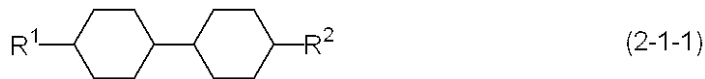
り、第二成分の割合が5～60重量%の範囲であり、第三成分の割合が10～70重量%の範囲である、項21に記載の液晶組成物。

23. 第一成分として式(1-1-1)～(1-1-3)および(1-2-1)～(1-2-3)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物、第二成分として式(2-1-1)、(2-1-2)および(2-2-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物、および第三成分として式(4-1-1)、(4-2-1)、(5-1-1)、および(5-2-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

【0037】



【0038】



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【 0 0 3 9 】

24 . 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 85 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 50 重量% の範囲であり、第三成分の割合が 10 ~ 80 重量% の範囲である、項 23 に記載の液晶組成物。

【 0 0 4 0 】

25 . 第一成分として式 (1 - 1 - 1) ~ (1 - 1 - 3) および (1 - 2 - 1) ~ (1 - 2 - 3) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第二成分として式 (2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2) および (2 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、第三成分として式 (3 - 1 - 1) および (3 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物、および第三成分として式 (4 - 1 - 1)、(4 - 2 - 1)、(5 - 1 - 1)、および (5 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

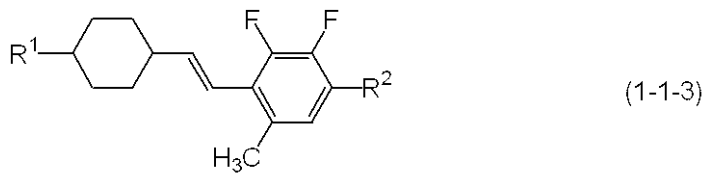
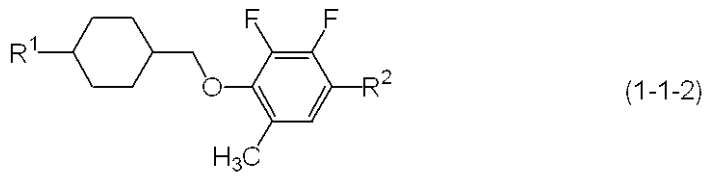
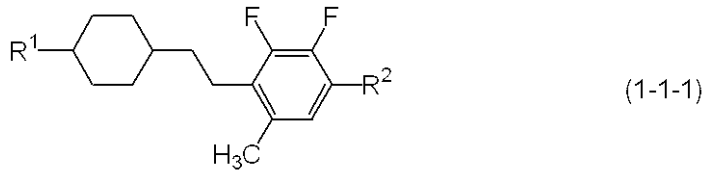
【 0 0 4 1 】

10

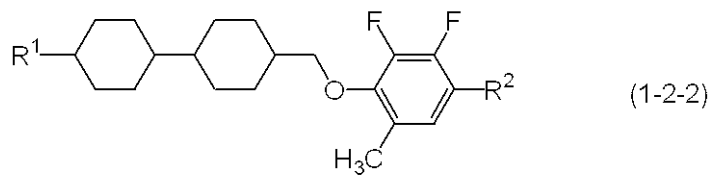
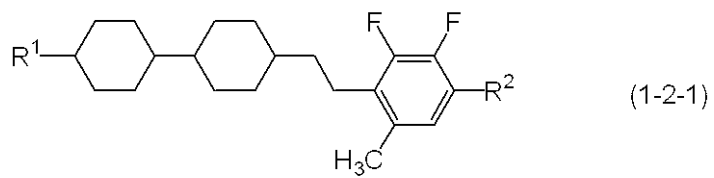
20

30

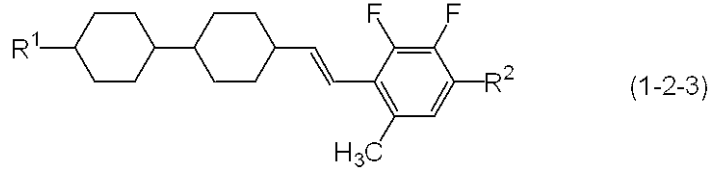
40



10

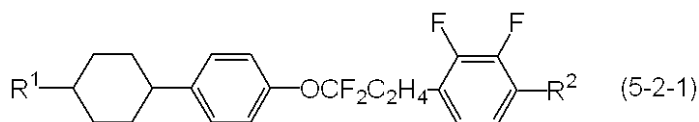
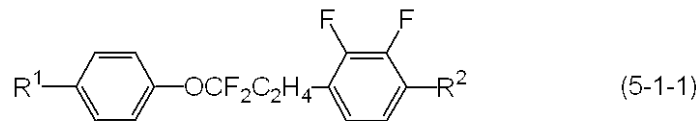
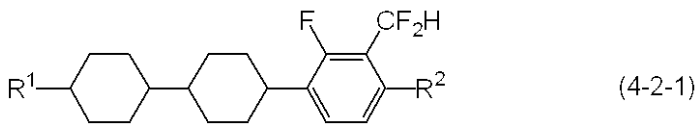
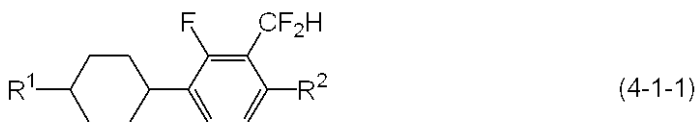
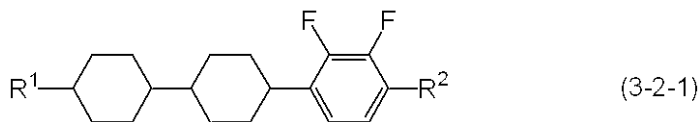
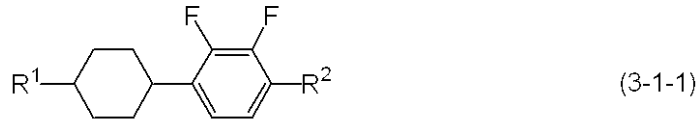
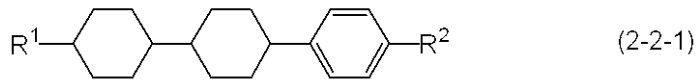
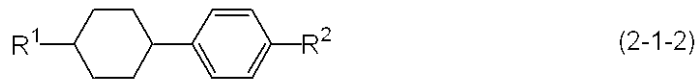
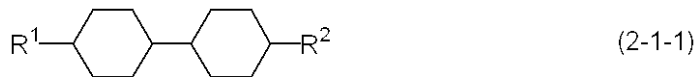


20



【 0 0 4 2 】

30



10

20

30

ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

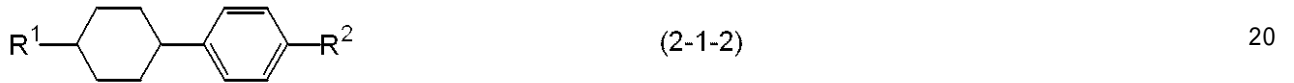
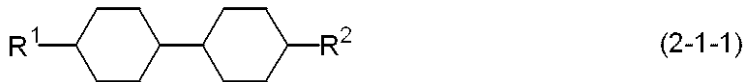
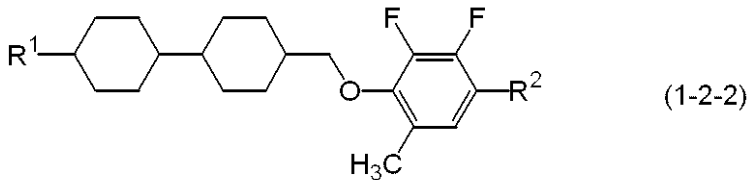
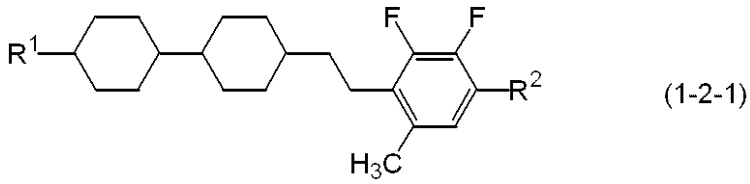
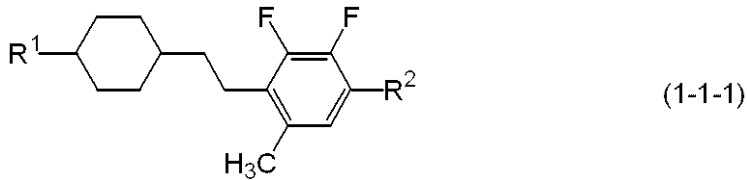
【 0 0 4 3 】

26 . 液晶化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 10 ~ 75 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 5 ~ 50 重量% の範囲であり、第三成分のうち式 (3 - 1 - 1) および (3 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物の割合が 10 ~ 70 重量% の範囲であり、第三成分のうち式 (4 - 1 - 1)、(4 - 2 - 1)、(5 - 1 - 1)、および (5 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物の割合が 10 ~ 70 重量% の範囲である、項 25 に記載の液晶組成物。

40

27 . 第一成分として式 (1 - 1 - 1)、(1 - 2 - 1) および (1 - 2 - 2) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物を含有し、第二成分として式 (2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2) および (2 - 2 - 1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物をさらに含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

【 0 0 4 4 】



ここで、 R^1 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R^2 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキル、炭素数 2 ~ 10 のアルケニルまたは炭素数 1 ~ 9 のアルコキシである。

【0045】

28. 液晶組成物の全重量に基づいて、第一成分の割合が 50 ~ 90 重量% の範囲であり、第二成分の割合が 10 ~ 50 重量% の範囲である、項 27 に記載の液晶組成物。

29. 液晶組成物の誘電率異方性の値が -6.5 ~ -1.5 の範囲である項 1 ~ 28 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

【0046】

30. 項 1 ~ 29 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

31. 液晶表示素子が VA モードまたは IPS モードを有し、そしてアクティブマトリックスで駆動される項 30 に記載の液晶表示素子。

32. 項 1 ~ 29 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を、VA モードまたは IPS モードを有し、そしてアクティブマトリックスで駆動される液晶表示素子に使用する方法。

【発明の効果】

【0047】

本発明の組成物は、ネマチック相の広い温度範囲、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗などの特性において、複数の特性を充足する。この組成物は複数の特性に関して適切なバランスを有する。この目的はネマチック相の広い温度範囲、特にネマチック相の下限温度が -20 以下である。本発明の素子は、この組成物を含有し、そして大きな電圧保持率を有する。この素子は、小さな粘度、0.05 ~ 0.11 の光学異方性、-6.5 ~ -1.5 の誘電率異方性などの特性を有する組成物を含有するので、VA モード、IPS モードなどを有する AM 素子に適する。

【発明を実施するための最良の形態】

【0048】

この明細書における用語の使い方は次のとおりである。本発明の液晶組成物または本発

10

20

30

40

50

明の液晶表示素子をそれぞれ「組成物」または「素子」と略すことがある。液晶表示素子は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。アクティブマトリクスで駆動される素子をAM素子と略すことがある。TNモードを有する素子をTN素子と略すことがある。他のモードを有する素子も同様に略すことがある。液晶組成物は液晶性化合物を含有する。この液晶性化合物は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物および液晶相を有さないが組成物の成分として有用な化合物の総称である。式(1)~(1-2-4)をまとめて、式(1)と略すことがある。他の式も同様に略すことがある。式(2-1-1)および(2-1-2)をまとめて、式(2-1)と略すことがある。他の式も同様に略すことがある。式(2-1)で表わされる化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を「化合物(2-1)」と略すことがある。他の式に関する化合物も同様に略すことがある。

10

【0049】

ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。「比抵抗が大きい」は、組成物が初期に大きな比抵抗を有し、そして長時間使用したあとも組成物が大きな比抵抗を有することを意味する。「電圧保持率が大きい」は、素子が初期に大きな電圧保持率を有し、そして長時間使用したあとも素子が大きな電圧保持率を有することを意味する。光学異方性などの特性を説明するときは、実施例に記載した方法で測定した値を用いる。組成物における成分の割合(百分率)は、組成物の全重量に基づいた重量百分率(重量%)である。

【0050】

20

本発明の組成物を次の順で説明する。第一に、組成物における成分の構成を説明する。第二に、成分である化合物の主要な特性、および化合物が組成物に及ぼす主要な効果を説明する。第三に、成分である化合物の好ましい割合およびその理由を説明する。第四に、成分である化合物の好ましい形態を説明する。第五に、成分である化合物の具体的な例を示す。第六に、成分である化合物の合成法を説明する。

【0051】

第一に、組成物における成分の構成を説明する。本発明の組成物は、第一成分である6-メチル-2,3-ジフロロ-1,4-フェニレンの構造を有する化合物(1)を必須成分とする液晶組成物である。第一成分、第二成分、第三成分である化合物(3)および第三成分である化合物(4)および(5)の組み合わせは8とおりである。これをタイプ1~タイプ8に分類して表2にまとめる。表2においてマル印は該当する化合物が成分であることを意味する。空欄は該当する化合物が成分でないことを意味する。例えば、タイプ3は化合物(1)および化合物(3)が組成物に含有される成分であることを意味する。

30

【0052】

表2. 化合物の組み合わせ例

化合物	第一成分	第二成分	第三成分	
	(1)	(2)	(3)	(4), (5)
タイプ(1)	○			
タイプ(2)	○	○		
タイプ(3)	○		○	
タイプ(4)	○			○
タイプ(5)	○		○	○
タイプ(6)	○	○	○	
タイプ(7)	○	○		○
タイプ(8)	○	○	○	○

40

【0053】

本発明の組成物には表2以外の液晶性化合物を含有してもよい。例えば、表2のタイプ(3)は化合物(1)および(3)が含有しているが、化合物(2)、(4)および(5)

50

は含まれていない組成例である。そして、このタイプ(3)には化合物(1)~(5)でない液晶性化合物を含有してもよい。

【0054】

第一成分は化合物(1)の群から選択された少なくとも1つの化合物である。この場合、化合物(1)は、単一の化合物であってもよいし、または複数の化合物であってもよい。この規則は他の式で表される化合物にも適用される。好ましい第一成分は、化合物(1-1-1)~(1-1-4)、(1-2-1)~(1-2-4)などである。第二成分は化合物(2-1)~(2-3)の群から選択された少なくとも1つの化合物である。好ましい第二成分は、化合物(2-1-1)、(2-1-2)、(2-2-1)、(2-2-2)、(2-3-1)などである。第三成分は化合物(3)~(5)の群から選択された

10

【0055】

本発明の組成物は組成物Aと組成物Bに分類される。組成物Aはその他の化合物をさらに含有してもよい。「その他の化合物」は液晶性化合物、添加物、不純物などである。この液晶性化合物は化合物(1)~(5)とは異なる。この液晶性化合物は、特性を調整する目的で組成物に混合される。この添加物は光学活性な化合物、色素、紫外線吸収剤、酸化防止剤などである。液晶のらせん構造を誘起してねじれ角を与える目的で光学活性な化合物が組成物に混合される。GH(guest host)モードを有する素子に適合させるために色素が組成物に混合される。液晶やAM素子の劣化を防止するために紫外線吸収剤や酸化防止剤が組成物に混合される。不純物は化合物の合成や組成物の調製のような工程において混入した化合物などである。

20

【0056】

組成物Bは、実質的に化合物(1)~(5)から選択された化合物のみからなる。「実質的に」は、これらの化合物とは異なる液晶性化合物を組成物Bが含有しないことを意味する。「実質的に」は、添加物、不純物などを組成物Bがさらに含有してもよいことを意味する。これらの化合物に含まれていた不純物、光学活性な化合物、色素、紫外線吸収剤、酸化防止剤などの化合物を組成物Bがさらに含有してもよいことも意味する。組成物Bは組成物Aに比較して成分の数が少ない。組成物Bはコストの観点から組成物Aよりも好ましい。その他の液晶性化合物を混合することによって物性をさらに調整できるので、組成物Aは組成物Bよりも好ましい。

30

【0057】

紫外線吸収剤の例は、ベンゾフェノン、ベンゾエート、トリアゾールなどである。ベンゾフェノンの例は、2-ヒドロキシ-4-オクトキシベンゾフェノンなどである。ベンゾエートの例は、2,4-ジ-tert-ブチルフェニル-3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンゾエートなどである。トリアゾールの例は、2-(2-ヒドロキシ-5-メチルフェニル)ベンゾトリアゾール、2-[2-ヒドロキシ-3-(3,4,5,6-テトラヒドロキシフタルイミド-メチル)-5-メチルフェニル]ベンゾトリアゾール、2-(3-tert-ブチル-2-ヒドロキシ-5-メチルフェニル)-5-クロロベンゾトリアゾールなどである。

40

【0058】

酸化防止剤の例は、フェノール、有機硫黄化合物などである。フェノールの例は、3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシトルエン、2,2'-メチレンビス(6-tert-ブチル-4-メチルフェノール)、4,4'-ブチリデンビス(6-tert-ブチル-3-メチルフェノール)、2,6-ジ-tert-ブチル-4-(2-オクタデシルオキシカルボニル)エチルフェノール、ペンタエリスリトールテトラキス[3-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオネート]などである。有機硫黄化合物の例は、ジラウリル-3,3'-チオプロピオネート、ジミリスチル-3,3'-チオプロピオネート、ジステアリル-3,3'-チオプロピオネート、ペンタエリスリトールテトラキ

50

ス(3-ラウリルチオプロピオネート)、2-メルカプトベンズイミダゾールなどである。

【0059】

紫外線吸収剤または酸化防止剤のような添加物は目的を達するためには多い量が好ましい。しかし、多過ぎる量の添加物は組成物の一般的特性には好ましくない。組成物を加熱したとき、多い量の酸化防止剤は比抵抗の低下を防止できる。しかし、多過ぎる量の酸化防止剤は組成物の上限温度を下げる可能性がある。好ましい紫外線吸収剤または酸化防止剤の割合は、組成物の全重量に基づいて例えば10ppm~500ppmである。好ましい割合は30~300ppmである。さらに好ましい割合は40~200ppmである。

【0060】

第二に、成分である化合物の主要な特性、および化合物が組成物に及ぼす主要な効果を説明する。化合物の主要な特性を表3にまとめる。表3の記号において、Lは大きいまたは高い、Mは中程度の、そしてSは小さいまたは低いを意味する。0は誘電率異方性がほぼゼロである(または極めて小さい)ことを意味する。L、MおよびSの記号は、これらの化合物における相対的な評価である。

【0061】

表3. 化合物の特性

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

1) 化合物の誘電率異方性は負である。

【0062】

成分化合物が組成物に及ぼす主要な効果は以下の通りである。第一成分は、6-メチル-2,3-ジフロロ-1,4-フェニレンの構造を有し、6位のメチル基が化合物の誘電率異方性を負に大きくし、組成物の下限温度を特に下げ、そして誘電率異方性を負に大きくする効果を有する。化合物(1)は、組成物の下限温度を特に下げ、上限温度を下げ、粘度を大きくし、光学異方性を適度にし、そして誘電率異方性を負に大きくする。第二成分は、組成物の粘度を小さくし、誘電率異方性を負に小さくする効果を有する。化合物(2-1)は、組成物の下限温度を下げ、上限温度を下げ、粘度を特に小さくし、光学異方性を小さくし、そして誘電率異方性を負に小さくする。化合物(2-2)は、組成物の上限温度を上げ、粘度を小さくし、そして誘電率異方性を負に小さくする。化合物(2-3)は、組成物の上限温度を特に上げ、粘度を小さくし、光学異方性を大きくし、そして誘電率異方性を負に小さくする。第三成分は、組成物の誘電率異方性を負に大きくする効果を有する。化合物(3)は、組成物の粘度を大きくし、そして誘電率異方性を負に大きくする。化合物(4)は、組成物の粘度を大きくし、そして誘電率異方性を特に負に大きくする。化合物(5)は、組成物の下限温度を下げ、粘度を大きくし、光学異方性を大きくし、そして誘電率異方性を負に大きくする。

【0063】

第三に、成分の好ましい割合およびその理由を説明する。第一成分は化合物(1)である。第一成分の好ましい割合は、下限温度を下げるおよび誘電率異方性を負に大きくするために、またはしきい値電圧を下げるために5重量%以上であり、そして下限温度を下げるために90重量%以下である。さらに好ましい割合は10~75重量%である。さらに好ましい割合は30~95重量%でもある。特に好ましい割合は50~90重量%である

。第二成分は、化合物(2)である。第二成分の好ましい割合は、粘度を小さくするために5重量%以上であり、そして誘電率異方性を負に大きくするために、またはしきい値電圧を下げるために75重量%以下である。さらに好ましい割合は、5重量%~50重量%である。さらに好ましい割合は、5重量%~70重量%でもある。特に好ましい割合は110~50重量%である。第三成分は化合物(3)~(5)である。第三成分の好ましい割合は、誘電率異方性を負に大きくするために、またはしきい値電圧を下げるために10重量%以上であり、そして下限温度を下げるために90重量%以下である。さらに好ましい割合は20~80重量%である。さらに好ましい割合は10~70重量%でもある。

【0064】

第四に成分である化合物の好ましい形態を説明する。成分である化合物の化学式において、 R^1 の記号を複数の化合物に用いた。これらの化合物同士において、複数の R^1 の意味は同一であってもよいし、または異なってもよい。例えば、化合物(1-1-1)の R^1 がアルキルであり、化合物(2-1-1)の R^1 がアルケニルであるケースがある。このルールは、 R^2 、A、B、 Z^1 、 Z^2 、 X^1 、 X^2 またはnの記号についても適用する。

10

【0065】

R^1 は炭素数1~10のアルキルまたは、炭素数2~10のアルケニルである。 R^2 は炭素数1~10のアルキル、炭素数2~10のアルケニルまたは炭素数1~10のアルコキシである。

好ましい R^1 は炭素数1~8のアルキルまたは、炭素数2~6のアルケニルである。好ましい R^2 は炭素数1~8のアルキル、炭素数2~6のアルケニルまたは炭素数1~8のアルコキシである。

20

【0066】

好ましいアルキルは、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、またはオクチルである。さらに好ましいアルキルは、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、またはヘプチルである。

【0067】

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

30

【0068】

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

40

【0069】

成分である化合物において、1,4-シクロヘキシレンに関する立体配置は、シスよりもトランスが好ましい。環Bに関する「任意の水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレン」は、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2,6-ジフルオロ-1,4-フェニレン、2,3,5-トリフルオロ-1,4-フェニレン、または2,3,5,6-テトラ-1,4-フェニレンである。好ましいBは1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレンまたは2,3-ジフルオロ-1,4-フェニレンである。さらに好ましい基は1,4-フェニレンまたは2-フルオロ-1,4-フェニレンである。2-フルオロ-1,4-フェニレンは3-フルオロ-1,4-フェニレンと同一であるので、後者は例

50

示しなかった。この規則は、2, 5 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレンと3, 6 - ジフルオロ - 1, 4 - フェニレンとの関係、2 - ジフルオロメチル - 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレンと3 - ジフルオロメチル - 2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレンとの関係などにも適用される。例えば、化合物(4)には、2 - ジフルオロメチル - 3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレンを有する化合物も含まれる。

【0070】

Z¹は独立して単結合、-C₂H₄-、-CH₂O-または-CH=CH-である。好ましいZ¹は単結合、-C₂H₄-、-CH₂O-または-CH=CH-である。Z²は独立して-CF₂O-、-OCF₂-、C₂H₄CF₂O-または-OCF₂C₂H₄-である。好ましいZ²は-CF₂O-、-OCF₂-または-OCF₂C₂H₄-である。さらに好ましいZ²は-OCF₂C₂H₄-である。

10

【0071】

X¹およびX²の一方はフッ素であり、他方は-CF₂Hである。X¹が-Fの場合X²は-CF₂Hであり、X¹が-CF₂Hの場合X²は-Fである。好ましいX¹およびX²は、X¹が-FでX²が-CF₂H、または、X¹が-CF₂HでX²が-Fある。特に好ましいX¹およびX²は、X¹が-Fであり、X²が-CF₂Hある。

【0072】

第五に、成分である化合物の具体例を示す。好ましい化合物(1)は、化合物(1-1-1)~(1-1-4)および(1-2-1)~(1-2-8)である。より好ましい化合物(1)は、化合物(1-1-1)~(1-1-4)および(1-2-1)~(1-2-4)などである。特に好ましい化合物(1)は、化合物(1-1-1)~(1-1-3)および(1-2-1)~(1-2-3)などである。

20

【0073】

好ましい化合物(2)は、化合物(2-1-1)、(2-1-2)、(2-2-1)、(2-2-2)および(2-3-1)~(2-3-4)などである。より好ましい化合物(2)は、化合物(2-1-1)、(2-1-2)、(2-2-1)、(2-2-2)および(2-3-1)などである。特に好ましい化合物(2)は化合物(2-1-1)、(2-1-2)および(2-2-1)などである。

【0074】

好ましい化合物(3)は、化合物(3-1-1)、(3-2-1)および(3-2-2)などである。より好ましい化合物(3)は、化合物(3-1-1)および(3-2-1)などである。

30

【0075】

好ましい化合物(4)は、化合物(4-1-1)~(4-1-5)および(4-2-1)~(4-2-8)などである。より好ましい化合物(4)は、化合物(4-1-1)、(4-2-1)および(4-2-2)などである。特に好ましい化合物(4)は化合物(4-1-1)および(4-2-1)などである。

【0076】

好ましい化合物(5)は、化合物(5-1-1)~(5-1-3)および(5-2-1)~(5-2-3)などである。より好ましい化合物(5)は、化合物(5-1-1)および(5-2-1)~(5-2-3)などである。特に好ましい化合物(5)は化合物(5-1-1)および(5-2-1)などである。

40

【0077】

これらの具体例の化合物および好ましい化合物において、R¹などによって表される具体的な基は同一であってもよいし、または異なってもよい。この規則はすでに記載した。

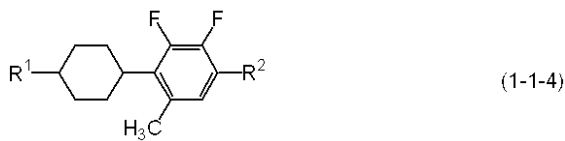
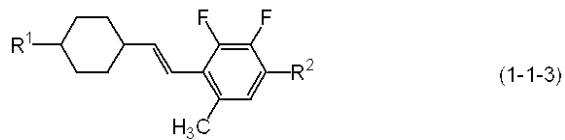
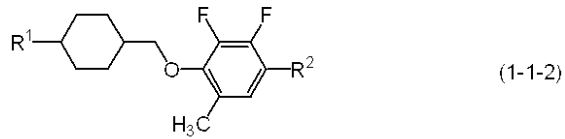
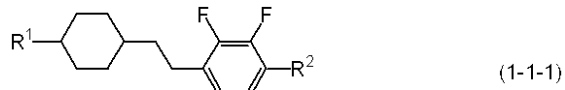
【0078】

R¹は炭素数1~10のアルキルまたは炭素数2~10のアルケニルである。好ましいR¹は炭素数1~8のアルキルまたは、炭素数2~6のアルケニルである。R²は炭素数1~10のアルキル、炭素数2~10のアルケニルまたは炭素数1~9のアルコキシである。好ましいR²は炭素数1~8のアルキル、炭素数2~6のアルケニルまたは炭素数1

50

~ 8 のアルコキシである。さらに好ましいアルキル、アルケニル、またはアルコキシはすでに記載したとおりである。これらアルケニルにおいて、 $-CH=CH-$ の好ましい立体配置は、すでに記載したとおりである。これらの好ましい化合物において 1, 4 - シクロヘキシレンに関する立体配置はシスよりもトランスが好ましい。

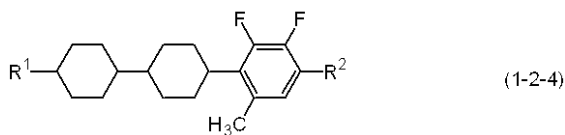
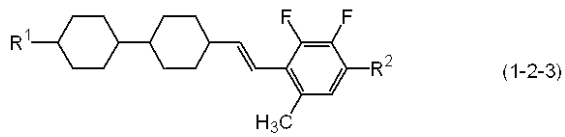
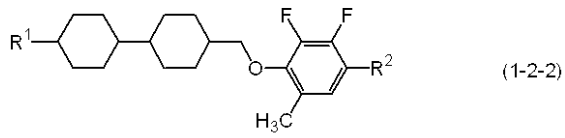
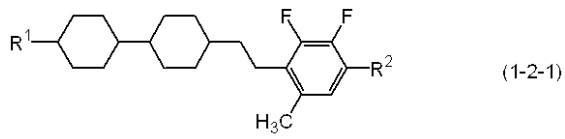
【 0 0 7 9 】



10

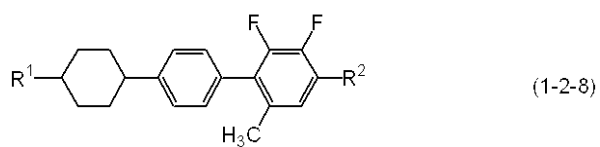
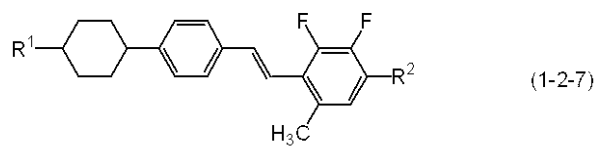
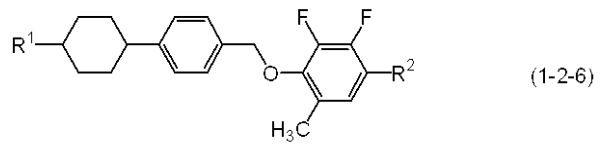
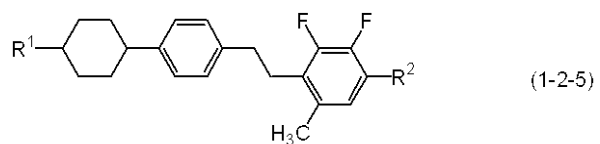
20

【 0 0 8 0 】

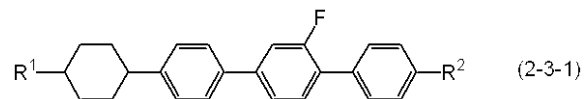
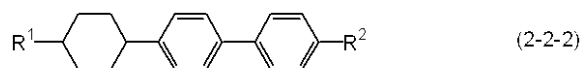
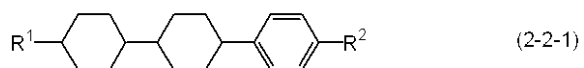
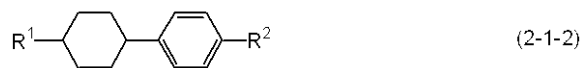
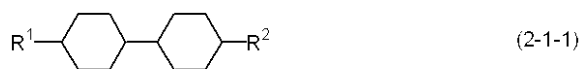


30

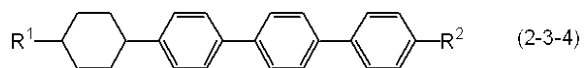
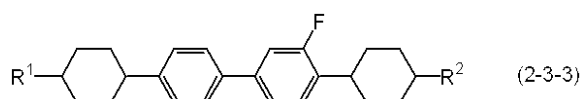
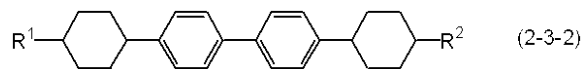
【 0 0 8 1 】



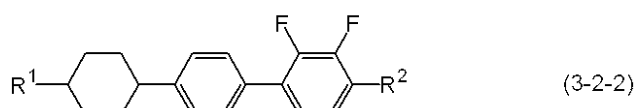
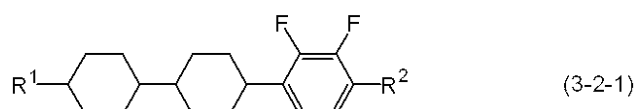
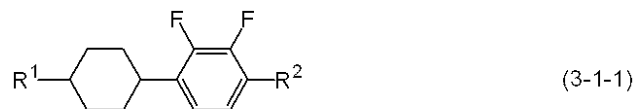
【 0 0 8 2 】



【 0 0 8 3 】



【 0 0 8 4 】



10

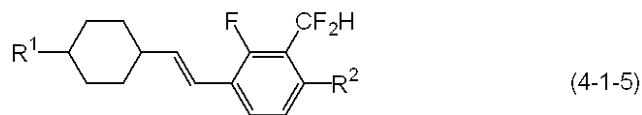
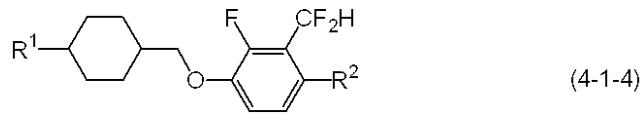
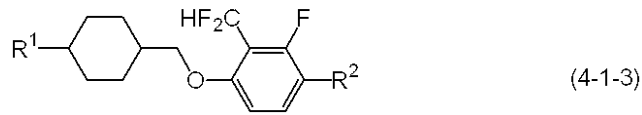
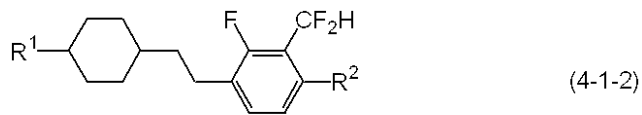
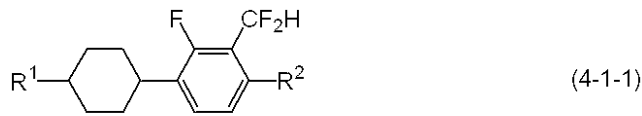
20

30

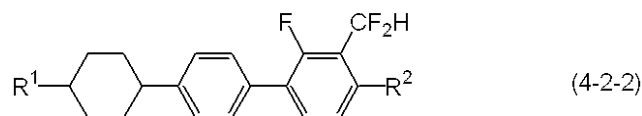
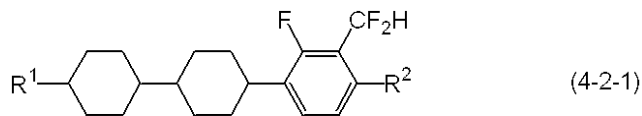
40

50

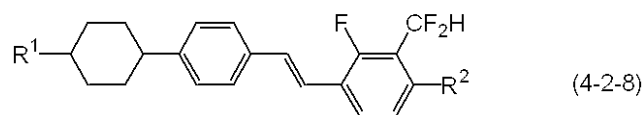
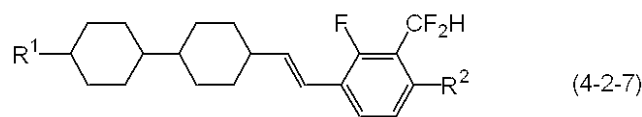
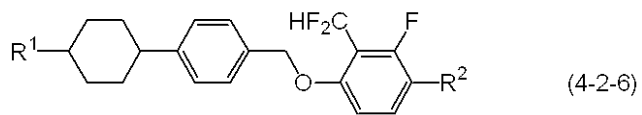
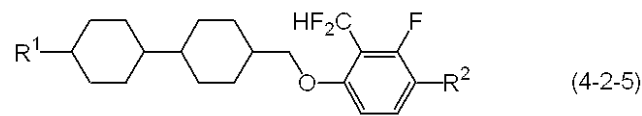
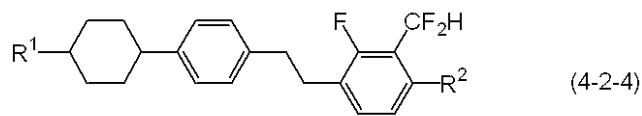
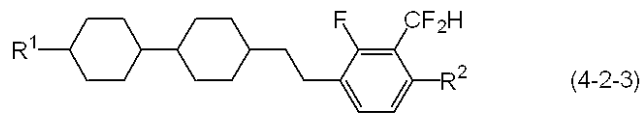
【 0 0 8 5 】



【 0 0 8 6 】



【 0 0 8 7 】



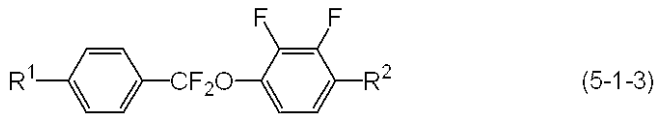
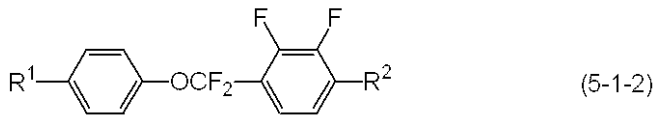
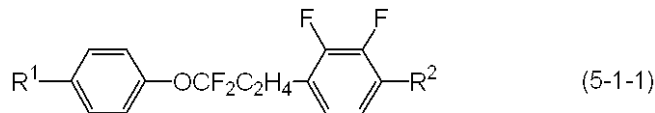
【 0 0 8 8 】

10

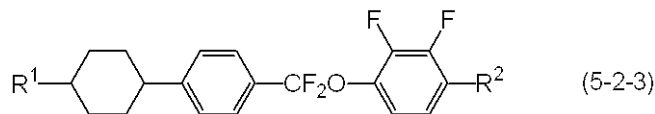
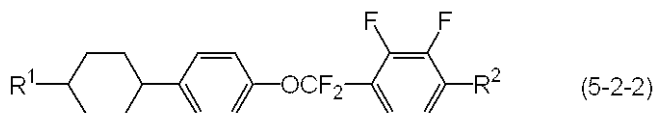
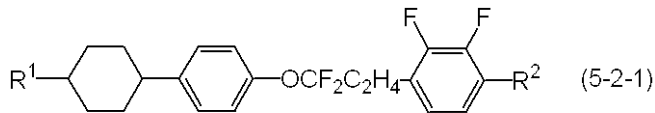
20

30

40



【 0 0 8 9 】



【 0 0 9 0 】

第六に、成分である化合物の合成法を説明する。これらの化合物は既知の方法によって合成できる。合成法を例示する。化合物(1)は特開平10-291945号公報に記載された方法を修飾することによって合成する。化合物(2-1-1)は特開昭59-70624号公報または特開昭60-16940号公報に記載された方法によって合成する。化合物(3-1-1)および(3-2-1)などは、特開平6-228037号公報に記載された方法を修飾することによって合成する。化合物(4-1-1)および(4-2-1)などは、国際公開00/39063号パンフレット(US6576303B1)に記載された方法を修飾することによって合成する。化合物(5-1-1)および(5-2-1)などは、特開平9-278698号公報または特開2003-2858に記載された方法を修飾することによって合成する。

【 0 0 9 1 】

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

【 0 0 9 2 】

本発明の組成物は、主として0.05~0.11の光学異方性および-6.5~-1.5の誘電率異方性を有する。好ましい誘電率異方性は、-5.0~-2.5の範囲である。成分である化合物の割合を制御することによって、またはその他の化合物を混合することによって、0.05~0.18の光学異方性を有する組成物、さらには0.05~0.20の光学異方性を有する組成物を調製してもよい。したがって、この組成物はVAモード、IPSモードなどを有するAM素子に適する。この組成物はVAモードを有するAM素子に特に適する。

【 0 0 9 3 】

TNモード、VAモードなどを有する素子における電場の方向は、基板の法線方向に対

10

20

30

40

50

して垂直である。一方、IPSモードなどを有する素子における電場の方向は、基板の法線方向に対して平行である。VAモードを有する素子の構造は、K. Ohmuro, S. Kataoka, T. Sasaki and Y. Koike, SID '97 Digest of Technical Papers, 28, 845 (1997)に報告されている。IPSモードを有する素子の構造は、国際公開91/10936号(US5576867)に報告されている。本発明の組成物は、これらの素子にも適する。

【0094】

この組成物はAM素子だけでなくPM素子にも使用することが可能である。この組成物は、PC、TN、STN、OCBなどのモードを有する素子に使用できる。これらの素子が反射型、透過型または半透過型であってもよい。この組成物はマイクロカプセル化して作製したNCA P (nematic curvilinear aligned phase) 素子や、PN (polymer network) 素子のような、組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたPD (polymer dispersed) 素子などにも使用できる。

10

(実施例)

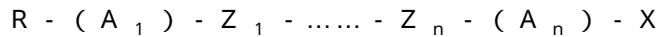
【0095】


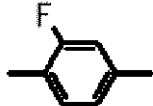
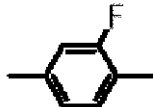
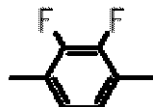
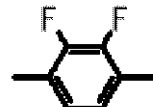
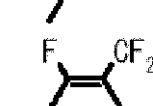
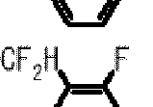

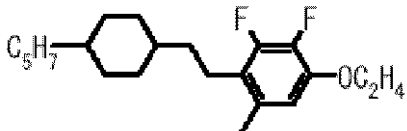
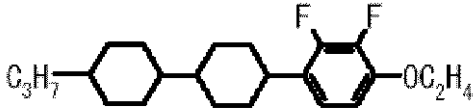
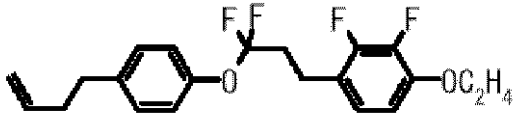
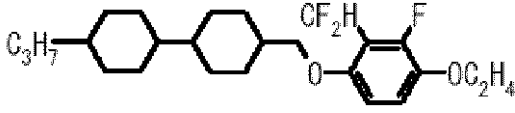
実施例により本発明を詳細に説明する。本発明は下記の実施例によって限定されない。実施例における化合物は、下記の表4の定義に基づいて記号により表した。表4において、1,4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。実施例において記号の後にあるかっこ内の番号は好ましい化合物の番号に対応する、(-)の記号はその他の化合物を意味する。化合物の割合(百分率)は、組成物の全重量に基づいた重量百分率(重量%)である。最後に、組成物の特性値をまとめる。

20

【0096】

表4. 記号を用いた化合物の表記方法



1) 左末端基 R-	記号	3) 結合基 -Z _n -	記号
$C_nH_{2n+1}-$	n-	$-COO-$	E
$CH_2=CH-$	V-	$-CF_2O-$	CF ₂ O
$C_nH_{2n+1}CH=CH-$	nV-	$-OCF_2-$	OCF ₂
$CH_2=CHC_nH_{2n+1}-$	Vn-	$-CF_2OC_2H_4-$	CF ₂ O2
		$-OCF_2C_2H_4-$	OCF ₂ 2
2) 観光増 -A _n -	記号	4) 右末端 -X	記号
	B	$-C_nH_{2n+1}$	-n
	B(2F)	$-OC_nH_{2n+1}$	-On
	B(3F)	$-C_nH_{2n}OC_mH_{2m+1}$	-nOm
	B(2F, 3F)	$-COOCH_3$	-EMe
	B(2F, 3F, 6Me)	$-CH=CH_2$	-V
	B(2F, 3CF ₂ H)	$-C_nH_{2n}CH=CH_2$	-nV
	B(2CF ₂ H, 3F)		
	H		
5) 表記例			
例1) 5-H2B(2F, 3F, 6Me)-O2		例2) 3-HHB(2F, 3F)-O2	
例3) V2-BOCF ₂ 2B(2F, 3F)-O2		例4) 3-HH1OB(2CF ₂ H, 3F)-O2	

組成物は、液晶性化合物などの成分の重量を測定してから混合することによって調製される。したがって、成分の重量%を算出するのは容易である。しかし、組成物をガスクロマト分析することによって成分の割合を正確に算出するのは容易でない。補正係数が液晶性化合物の種類に依存するからである。幸いなことに補正係数はほぼ1である。さらに、成分化合物における1重量%の差異が組成物の特性に与える影響は小さい。したがって、本発明においてはガスクロマトグラフにおける成分ピークの面積比を成分化合物の重量%と見なすことができる。つまり、ガスクロマト分析の結果(ピーク的面積比)は、補正することなしに液晶性化合物の重量%と等価であると考えてよいのである。

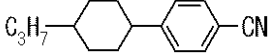
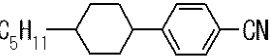
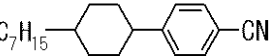
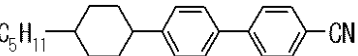
【0098】

試料が組成物のときはそのまま測定し、得られた値を記載した。試料が化合物のときは、15重量%の化合物および85重量%の母液晶を混合することによって試料を調製した。測定によって得られた値から外挿法によって化合物の特性値を算出した。外挿値 = (試料の測定値 - 0.85 × 母液晶の測定値) / 0.15。この割合でスメクチック相(または結晶)が25で析出するときは、化合物と母液晶の割合を10重量% : 90重量%、5重量% : 95重量%、1重量% : 99重量%の順に変更した。この外挿法によって化合物に関する上限温度、光学異方性、粘度、および誘電率異方性の値を求めた。

【0099】

母液晶の組成は下記のとおりである。

【0100】

	24%	
	36%	
	25%	
	15%	

【0101】

特性値の測定は下記の方法にしたがった。それらの多くは、日本電子機械工業会規格(Standard of Electric Industries Association of Japan) E I A J · E D - 2 5 2 1 A に記載された方法、またはこれを修飾した方法である。測定に用いた T N 素子には、T F T を取り付けなかった。

【0102】

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

【0103】

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

【0104】

粘度(; 20 で測定 ; m P a · s) : 測定にはE型回転粘度計を用いた。

【0105】

回転粘度(1 ; 25 で測定 ; m P a · s) : 測定はM. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。2枚の

10

20

30

40

50

ガラス基板の間隔（セルギャップ）が $20\ \mu\text{m}$ の VA 素子に試料を入れた。この素子に 30 ボルトから 50 ボルトの範囲で 1 ボルト毎に段階的に印加した。0.2 秒の無印加のあと、ただ 1 つの矩形波（矩形パルス；0.2 秒）と無印加（2 秒）の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流（transient current）のピーク電流（peak current）とピーク時間（peak time）を測定した。これらの測定値と M. Imai らの論文、40 頁の計算式（8）とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性は、下記の誘電率異方性で測定した値を用いた。

【0106】

光学異方性（屈折率異方性； n ；25 で測定）：測定は、波長 $589\ \text{nm}$ の光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッペ屈折計により行なった。主プリズムの表面を一方
10
向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率 n は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率 n は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学異方性の値は、 $n = n - n$ 、の式から計算した。

【0107】

誘電率異方性（；25 で測定）：2 枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $20\ \mu\text{m}$ である VA 素子に試料を入れた。この素子にサイン波（0.5 V、1 kHz）を印加し、2 秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率（）を測定した。2 枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $9\ \mu\text{m}$ であり、ツイスト角が 80 度である TN 素子に試料を入れた。この素子にサイン波（0.5 V、1 kHz）を印加し、2 秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率（）を測定した。誘電率異方性の値は、 $= -$ 、の式
20
から計算した。

【0108】

しきい値電圧（ V_{th} ；25 で測定；V）：測定には大塚電子株式会社製の LCD 5100 型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。2 枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $5.0\ \mu\text{m}$ であり、ツイスト角が 80 度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）の TN 素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧（32 Hz、矩形波）は 0 V から 10 V まで 0.02 V ずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率 100% であり、この光量が最小であったときが透過率 0% である電圧 - 透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が 90% になったときの電圧である。
30

【0109】

電圧保持率（VHR；25 と 100 で測定；%）：測定に用いた TN 素子はポリイミド配向膜を有し、そして 2 枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）は $6\ \mu\text{m}$ である。この素子は試料を入れたあと紫外線によって重合する接着剤で密閉した。この TN 素子にパルス電圧（5 V で 60 マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で 16.7 ミリ秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積 A を求めた。面積 B は減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積 B に対する面積 A の百分率である。25 で測定して得られた電圧保持率を VHR - 1 で表した。100 で測定して得られた電圧保持率を VHR - 2 で表した。次に、この TN 素子を 100、250 時間加熱した。VHR - 3 は、加熱後の素子を 25 で測定して得られた電圧保持率である。
40
VHR - 4 は、加熱後の素子を 100 で測定して得られた電圧保持率である。VHR - 1 および VHR - 2 は、初期段階における評価に相当する。VHR - 3 および VHR - 4 は、素子を長時間使用した後の評価に相当する。

【0110】

応答時間（；25 で測定；ミリ秒）：測定には大塚電子株式会社製の LCD 5100 型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。ローパス・フィルター（Low-pass filter）は 5 kHz に設定した。2 枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $5.0\ \mu\text{m}$ であり、ツイスト角が 80 度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）の TN 素子に試料を入れた。この素子に矩形波（60 Hz、5 V、0.5 秒）を印加した。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量
50

が最大になったときが透過率100%であり、この光量が最小であったときが透過率0%である。立ち上がり時間(r : rise time)は、透過率が90%から10%に変化するのに要した時間である。立下がり時間(f : fall time)は透過率10%から90%に変化するのに要した時間である。応答時間は、このようにして求めた立ち上がり時間と立下がり時間との和である。

【0111】

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

10

【0112】

試料を希釈するための溶媒は、クロロホルム、ヘキサンなどを用いてもよい。成分化合物を分離するために、次のキャピラリカラムを用いてもよい。Agilent Technologies Inc.製のHP-1(長さ30m、内径0.32mm、膜厚0.25μm)、Restek Corporation製のRtx-1(長さ30m、内径0.32mm、膜厚0.25μm)、SGE International Pty. Ltd製のBP-1(長さ30m、内径0.32mm、膜厚0.25μm)。化合物ピークの重なりを防ぐ目的で島津製作所製のキャピラリカラムCBP1-M50-025(長さ50m、内径0.25mm、膜厚0.25μm)を用いてもよい。ガスクロマトグラムにおけるピークの面積比は成分化合物の割合に相当する。成分化合物の重量%は各ピークの面積比と完全には同一ではない。しかし、本発明においては、これらのキャピラリカラムを用いるときは、成分化合物の重量%は各ピークの面積比と同一であると見なしてよい。成分化合物における補正係数に大きな差異がないからである。

20

(比較例)

【0113】

3-HH-4	(2-1-1)	7%	30
3-HH-4	(2-1-1)	6%	
3-HB-O1	(2-1-2)	8%	
5-HB-3	(2-1-2)	9%	
3-HB(2F, 3F)-O2	(3-1-1)	14%	
5-HB(2F, 3F)-O2	(3-1-1)	12%	
2-HHB(2F, 3F)-1	(3-2-1)	14%	
3-HHB(2F, 3F)-1	(3-2-1)	14%	
3-HHB(2F, 3F)-O2	(3-2-1)	8%	
5-HHB(2F, 3F)-O2	(3-2-1)	8%	
NI = 67.9 ; Tc < -10 ; n = 0.080 ; μ = -3.0 ; η = 19.9 mPa·s ; VHR-1 = 99.3%			40

【実施例1】

【0114】

3-H2B(2F, 3F, 6Me)-O2	(1-1-1)	14%	
5-H2B(2F, 3F, 6Me)-O2	(1-1-1)	14%	
5-H1OB(2F, 3F, 6Me)-O2	(1-1-2)	5%	
5-HB(2F, 3F, 6Me)-O2	(1-1-4)	3%	
3-HH2B(2F, 3F, 6Me)-O2	(1-2-1)	11%	
5-HH2B(2F, 3F, 6Me)-O2	(1-2-1)	11%	
3-HH1OB(2F, 3F, 6Me)-O2	(1-2-2)	11%	50

5 - HH1OB (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 2) 1 1 %
 V 2 - HHVB (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 3) 4 %
 3 - HHVB (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 3) 8 %
 5 - HHVB (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 3) 8 %
 NI = 7 3 . 2 ; T c < - 2 0 ; n = 0 . 0 8 6 ; = - 4 . 6 ; V H R - 1 = 9 9 . 2 %

【実施例 2】

【 0 1 1 5 】

3 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 1 - 1) 1 5 %
 5 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 1 - 1) 1 5 %
 3 - HH 2 B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 1) 1 1 %
 5 - HH 2 B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 1) 1 1 %
 3 - HH 1 O B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 2) 1 1 %
 5 - HH 1 O B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 2) 1 1 %
 3 - HH - V 1 (2 - 1 - 1) 6 %
 V - HHB - 1 (2 - 2 - 1) 1 0 %
 V 2 - HHB - 1 (2 - 2 - 1) 1 0 %
 NI = 8 1 . 6 ; T c < - 2 0 ; n = 0 . 0 8 3 ; = - 3 . 4 ; V H R - 1 = 9 9 . 4 %

10

【実施例 3】

【 0 1 1 6 】

3 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 1 - 1) 1 0 %
 5 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 1 - 1) 1 0 %
 3 - HH 1 O B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 2) 8 %
 5 - HH 1 O B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 2) 8 %
 3 - HB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 1 - 1) 1 2 %
 5 - HB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 1 - 1) 1 2 %
 2 - HHB (2 F , 3 F) - 1 (3 - 2 - 1) 1 0 %
 3 - HHB (2 F , 3 F) - 1 (3 - 2 - 1) 1 0 %
 3 - HHB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 2 - 1) 1 0 %
 5 - HHB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 2 - 1) 1 0 %
 NI = 7 1 . 3 ; T c < - 3 0 ; n = 0 . 0 8 6 ; = - 4 . 5 ; = 3 6 . 6
 m P a · s ; V H R - 1 = 9 9 . 2 %

20

30

【実施例 4】

【 0 1 1 7 】

3 - HH 1 O B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 2) 1 0 %
 5 - HH 1 O B (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 2) 1 0 %
 3 - HHVB (2 F , 3 F , 6 Me) - O 2 (1 - 2 - 3) 8 %
 3 - HH - 4 (2 - 1 - 1) 7 %
 3 - HH - 4 (2 - 1 - 1) 6 %
 3 - HB - O 1 (2 - 1 - 2) 8 %
 5 - HB - 3 (2 - 1 - 2) 9 %
 3 - HB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 1 - 1) 1 4 %
 5 - HB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 1 - 1) 1 2 %
 3 - HHB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 2 - 1) 8 %
 5 - HHB (2 F , 3 F) - O 2 (3 - 2 - 1) 8 %
 NI = 7 4 . 2 ; T c < - 2 0 ; n = 0 . 0 8 2 ; = - 3 . 4 ; = 2 6 . 3
 m P a · s ; V H R - 1 = 9 9 . 4 %

40

【実施例 5】

【 0 1 1 8 】

50

3 - H ₂ B (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 1 - 1)	5 %	
5 - H ₂ B (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 1 - 1)	5 %	
3 - HH ₂ B (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 1)	5 %	
5 - HH ₂ B (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 1)	5 %	
3 - HH ₁ OB (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 2)	8 %	
5 - HH ₁ OB (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 2)	8 %	
5 - HH - V	(2 - 1 - 1)	20 %	
3 - HB - O ₂	(2 - 1 - 2)	8 %	
3 - HH ₁ OB (2 CF ₂ H , 3 F) - O ₂	(4 - 2 - 5)	8 %	
5 - HH ₁ OB (2 CF ₂ H , 3 F) - O ₂	(4 - 2 - 5)	8 %	10
3 - HBOCF ₂ 2 B (2 F , 3 F) - O ₂	(5 - 2 - 1)	10 %	
5 - HBOCF ₂ 2 B (2 F , 3 F) - O ₂	(5 - 2 - 1)	10 %	
NI = 80 . 3 ; Tc < - 30 ; n = 0 . 089 ; = - 3 . 7 ; = 33 . 3			
mPa · s ; VHR - 1 = 99 . 3 %			

【実施例 6】

【0119】

3 - HH ₂ B (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 1)	10 %	
5 - HH ₂ B (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 1)	10 %	
5 - HH - V	(2 - 1 - 1)	18 %	
3 - HH - V ₁	(2 - 1 - 1)	7 %	20
3 - HB - O ₂	(2 - 1 - 2)	6 %	
V - HHB - 1	(2 - 2 - 1)	10 %	
V ₂ - HHB - 1	(2 - 2 - 1)	8 %	
5 - HBB (3 F) B - 2	(2 - 3 - 1)	3 %	
5 - HB (2 F , 3 CF ₂ H) - O ₂	(4 - 1 - 1)	5 %	
5 - HB (2 F , 3 CF ₂ H) - O ₄	(4 - 1 - 1)	3 %	
3 - HHB (2 F , 3 CF ₂ H) - O ₂	(4 - 2 - 1)	10 %	
5 - HHB (2 F , 3 CF ₂ H) - O ₂	(4 - 2 - 1)	10 %	
NI = 90 . 1 ; Tc < - 20 ; n = 0 . 080 ; = - 3 . 2 ; = 39 . 1			
mPa · s ; VHR - 1 = 99 . 4 %			

【実施例 7】

【0120】

3 - HH ₁ OB (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 2)	8 %	
5 - HH ₁ OB (2 F , 3 F , 6 Me) - O ₂	(1 - 2 - 2)	8 %	
2 - HH - 5	(2 - 1 - 1)	5 %	
3 - HH - 4	(2 - 1 - 1)	15 %	
3 - HH - 5	(2 - 1 - 1)	8 %	
3 - HHB - 1	(2 - 2 - 1)	5 %	
3 - HHB - 3	(2 - 2 - 1)	5 %	
3 - HHB - O ₁	(2 - 2 - 1)	3 %	40
3 - HB (2 F , 3 F) - O ₂	(3 - 1 - 1)	10 %	
3 - HB (2 F , 3 F) - O ₄	(3 - 1 - 1)	10 %	
3 - HHB (2 F , 3 F) - O ₂	(3 - 2 - 1)	5 %	
3 - HBB (2 F , 3 F) - O ₂	(3 - 2 - 2)	5 %	
3 - HH ₁ OH - 3	(-)	3 %	
3 - HB (3 F) B (2 F , 3 F) - O ₂	(-)	5 %	
3 - HB (2 F) B (2 F , 3 F) - O ₂	(-)	5 %	
NI = 88 . 1 ; Tc < - 20 ; n = 0 . 078 ; = - 3 . 4 ; = 24 . 7			
mPa · s ; VHR - 1 = 99 . 4 %			

【実施例 8】

【 0 1 2 1 】

3 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 1 - 1)	4 %	
3 - H H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 2 - 1)	8 %	
3 - H H - 4	(2 - 1 - 1)	6 %	
3 - H H - 5	(2 - 1 - 1)	6 %	
3 - H H B - 3	(2 - 2 - 1)	2 %	
3 - H B (2 F , 3 F) - O 2	(3 - 1 - 1)	1 4 %	
5 - H B (2 F , 3 F) - O 2	(3 - 1 - 1)	1 2 %	
2 - H H B (2 F , 3 F) - 1	(3 - 2 - 1)	1 3 %	
3 - H H B (2 F , 3 F) - 1	(3 - 2 - 1)	1 3 %	10
3 - H B O C F ₂ 2 B (2 F , 3 F) - O 2	(5 - 2 - 1)	1 1 %	
5 - H B O C F ₂ 2 B (2 F , 3 F) - O 2	(5 - 2 - 1)	1 1 %	
N I = 7 3 . 2 ; T c < - 2 0 ; n = 0 . 0 8 7 ; = - 3 . 7 ; = 2 9 . 0			
m P a · s ; V H R - 1 = 9 9 . 3 %			

【 实施例 9 】

【 0 1 2 2 】

3 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 1 - 1)	6 %	
V 2 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 1 - 1)	6 %	
3 - H H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - 3	(1 - 2 - 1)	8 %	
3 - H H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 2 - 1)	8 %	20
3 - H H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 4	(1 - 2 - 1)	8 %	
3 - H H - V 1	(2 - 1 - 1)	8 %	
5 - H H - V	(2 - 1 - 1)	2 6 %	
3 - H B - O 2	(2 - 1 - 2)	8 %	
V - H H B - 1	(2 - 2 - 1)	8 %	
V 2 - H H B - 1	(2 - 2 - 1)	8 %	
3 - H H B - 3	(2 - 2 - 1)	6 %	
N I = 8 0 . 2 ; T c < - 2 0 ; n = 0 . 0 7 0 ; = - 1 . 7 ; V H R - 1 =			
9 9 . 4 %			

【 实施例 1 0 】

【 0 1 2 3 】

3 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 1 - 1)	1 0 %	
5 - H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 1 - 1)	1 0 %	
3 - H H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 2 - 1)	8 %	
5 - H H 2 B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 2 - 1)	8 %	
3 - H H 1 O B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 2 - 2)	8 %	
5 - H H 1 O B (2 F , 3 F , 6 M e) - O 2	(1 - 2 - 2)	8 %	
3 - H H - V 1	(2 - 1 - 1)	6 %	
5 - H H - V	(2 - 1 - 1)	1 3 %	
3 - H H - O 2	(2 - 1 - 2)	6 %	40
V - H H B - 1	(2 - 2 - 1)	1 0 %	
V 2 - H H B - 1	(2 - 2 - 1)	1 0 %	
3 - H H B - O 1	(2 - 2 - 1)	3 %	
N I = 8 3 . 7 ; T c < - 2 0 ; n = 0 . 0 7 8 ; = - 2 . 4 ; V H R - 1 =			
9 9 . 3 %			

フロントページの続き

(56)参考文献 特開昭57-114532(JP,A)
特開平10-291945(JP,A)
特開2003-002858(JP,A)
国際公開第00/039063(WO,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C09K 19/30
CAplus(STN)
REGISTRY(STN)