



(21)申請案號：099127779

(22)申請日：中華民國 99 (2010) 年 08 月 19 日

(51)Int. Cl. : **C09K19/42 (2006.01)** **C09K19/20 (2006.01)**
 C09K19/14 (2006.01) **C09K19/12 (2006.01)**
 G02F1/13 (2006.01) **C09K19/52 (2006.01)**

(30)優先權：2009/09/18 日本 2009-216759

(71)申請人：捷恩智股份有限公司 (日本) JNC CORPORATION (JP)

日本

捷恩智石油化學股份有限公司 (日本) JNC PETROCHEMICAL CORPORATION

(JP)

日本

(72)發明人：小林雅秀 KOBAYASHI, MASAHIDE (JP) ; 山下淳一 YAMASHITA, JUNICHI (JP)

(74)代理人：詹銘文

(56)參考文獻：

TW 201033339A

JP 2002-193853A

JP 2008-285594A

審查人員：陳敏君

申請專利範圍項數：20 項 圖式數：0 共 164 頁

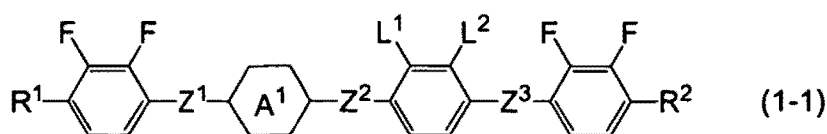
(54)名稱

液晶性化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件

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

(57)摘要

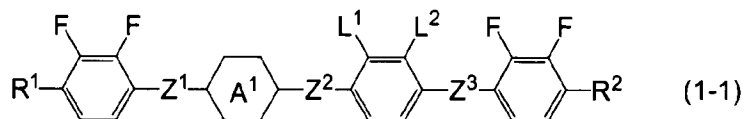
提供一種液晶性化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件。液晶性化合物具有對熱或光等的穩定性、寬廣溫度範圍內的向列相、小的黏度、大的光學異向性、適當的彈性常數 K_{33} 、大的負的介電異向性、及與其他液晶性化合物的優異相容性。液晶性化合物由式(1-1)表示：



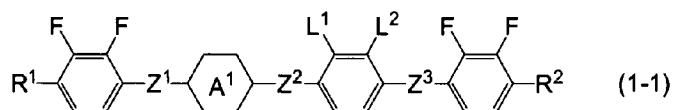
R^1 及 R^2 為氫、碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；環 A^1 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基或吡啶-2,5-二基； L^1 及 L^2 為氫或氟，且至少一個為氟； $Z^1 \sim Z^3$ 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-CH_2 O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

A liquid crystal compound is provided. The liquid crystal compound has stability against heat and light, nematic phase within a wide temperature range, low viscosity, large optical anisotropy, adequate elasticity

constant of K_{33} , large negative dielectric anisotropy, and good compatibility with other liquid crystal compounds. Furthermore, a liquid crystal composition that contains the compound and a liquid crystal display device that contains the composition is provided. The liquid crystal compound of this invention is represented by formula (1-1):



For example, R^1 and R^2 are independently hydrogen, alkyl having 1 to 10 carbons, alkenyl having 2 to 9 carbons, alkoxy having 1 to 9 carbons, alkoxyalkyl having 2 to 9 carbons or alkenyloxy having 2 to 9 carbons; ring A^1 is trans-1,4-cyclohexylene, 1,4-cyclohexenylene, 1,3-dioxane-2,5-diyl, pyrimidine-2,5-diyl or pyridine-2,5-diyl; L^1 and L^2 are independently hydrogen or fluorine, with at least one of them fluorine; and Z^1 , Z^2 and Z^3 are independently single bond, $-(CH_2)_2-$, $-CH=CH-$, $-C\equiv C-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-COO-$ or $-OCO-$.



公告本

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：99127779

※申請日：99.8.19

※IPC 分類：

C 09K 19/42 (2006.01)

C 09K 19/20 (2006.01)

C 09K 19/14 (2006.01)

C 09K 19/12 (2006.01)

C 09K 19/12 (2006.01)

G 02F 1/13 (2006.01)

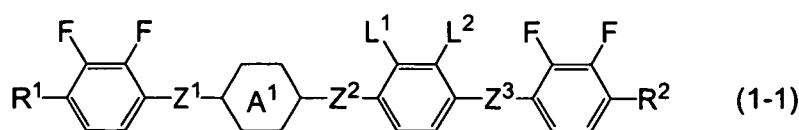
一、發明名稱：(中文/英文)

液晶性化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件

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

二、中文發明摘要：

提供一種液晶性化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件。液晶性化合物具有對熱或光等的穩定性、寬廣溫度範圍內的向列相、小的黏度、大的光學異向性、適當的彈性常數 K_{33} 、大的負的介電異向性、及與其他液晶性化合物的優異相容性。液晶性化合物由式 (1-1) 表示：

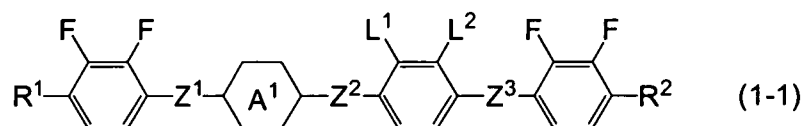


R^1 及 R^2 為氫、碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；環 A^1 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘓啶-2,5-二基或吡啶-2,5-二基； L^1 及 L^2 為氫或氟，且至少一個為氟； $\text{Z}^1 \sim \text{Z}^3$ 為單鍵、

$-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 或
 $-\text{OCO}-$ 。

三、英文發明摘要：

A liquid crystal compound is provided. The liquid crystal compound has stability against heat and light, nematic phase within a wide temperature range, low viscosity, large optical anisotropy, adequate elasticity constant of K_{33} , large negative dielectric anisotropy, and good compatibility with other liquid crystal compounds. Furthermore, a liquid crystal composition that contains the compound and a liquid crystal display device that contains the composition is provided. The liquid crystal compound of this invention is represented by formula (1-1):



For example, R^1 and R^2 are independently hydrogen, alkyl having 1 to 10 carbons, alkenyl having 2 to 9 carbons, alkoxy having 1 to 9 carbons, alkoxyalkyl having 2 to 9 carbons or alkenyloxy having 2 to 9 carbons; ring A^1 is trans-1,4-cyclohexylene, 1,4-cyclohexenylene, 1,3-dioxane-2,5-diyl, pyrimidine-2,5-diyl or pyridine-2,5-diyl; L^1 and L^2 are independently hydrogen or fluorine, with at least one of them fluorine; and Z^1 , Z^2 and Z^3 are independently single bond, $\text{-(CH}_2)_2\text{-}$, -CH=CH- , $\text{-C}\equiv\text{C-}$, $\text{-CH}_2\text{O-}$, $\text{-OCH}_2\text{-}$, -COO- or -OCO- .

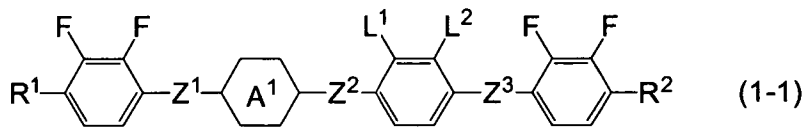
四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：無。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

無。

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：



六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明是有關於一種液晶性化合物、液晶組成物以及液晶顯示元件。更詳細而言，本發明是有關於一種作為液晶性化合物的在側位具有氟的氟苯衍生物、包含該化合物的具有向列相（nematic phase）的液晶組成物、以及包含該組成物的液晶顯示元件。

【先前技術】

以液晶顯示面板、液晶顯示模組等為代表的液晶顯示元件是利用液晶性化合物（本發明中，是指具有向列相、層列相（smectic phase）等液晶相的化合物以及不具有液晶相但可用作液晶組成物的成分的化合物的總稱）所具有的光學異向性、介電異向性等，該液晶顯示元件的運作模式已知有：相變（phase change, PC）模式、扭轉向列（twisted nematic, TN）模式、超扭轉向列（super twisted nematic, STN）模式、雙穩態扭轉向列（bistable twisted nematic, BTN）模式、電控雙折射（electrically controlled birefringence, ECB）模式、光學補償彎曲（optically compensated bend, OCB）模式、橫向電場切換（in-plane switching, IPS）模式、垂直配向（vertical alignment, VA）模式、聚合物穩定配向（Polymer sustained alignment, PSA）等各種模式。

已知，該些運作模式中，ECB 模式、IPS 模式、VA 模式等是利用液晶分子的垂直配向性的運作模式，尤其是

IPS 模式及 VA 模式可改善 TN 模式、STN 模式等先前顯示模式的視角狹窄的缺點。

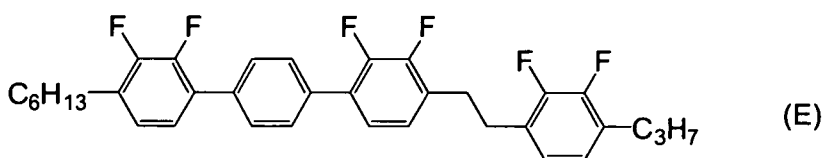
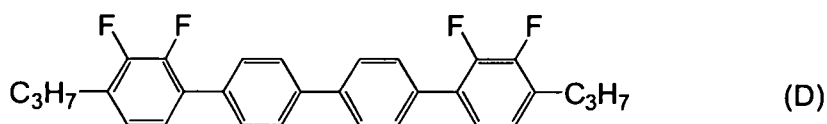
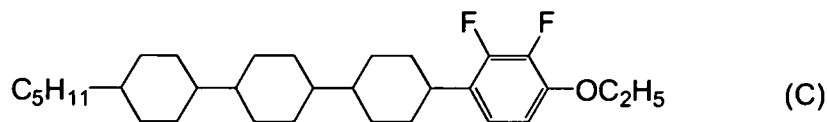
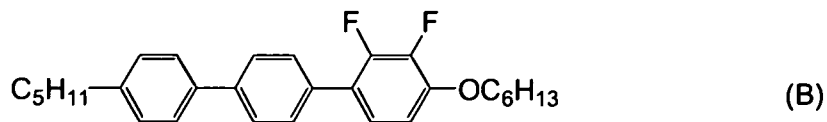
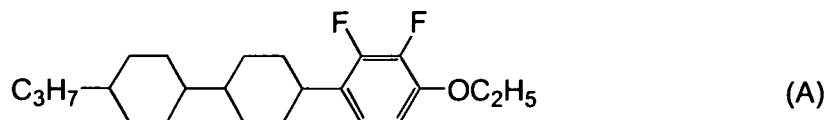
而且，自先前以來，關於該些運作模式的液晶顯示元件中可使用的具有負的介電異向性的液晶組成物的成分，已研究了大量苯環上的氫經氟取代而成的液晶性化合物。

例如研究了苯環上的氫經氟取代而成的化合物 (A) 及 (B) (參照專利文獻 1 及 2)。但是，此種化合物不具有滿足市場要求的程度的高的負的介電異向性。

另外，研究了具有經氟取代的苯的化合物 (C) (參照專利文獻 3)。但是，該化合物不具有滿足市場要求的程度的高的負的介電異向性。

此外，研究了具有兩個經氟取代的苯的四聯苯 (quaterphenyl) 化合物 (D) (參照專利文獻 4)。但是，該化合物的熔點非常高，且缺乏相容性。另外，該化合物不具有滿足市場的程度的高的負的介電異向性。

並且，研究了具有乙烯結合基、及具有三個經氟取代的苯的化合物 (E) (參照專利文獻 5)。但是，化合物 (E) 的熔點高，且缺乏相容性。另外，該化合物不具有滿足市場要求的程度的高的負的介電異向性。



[先前技術文獻]

[專利文獻]

[專利文獻 1]日本專利特表平 02-503441 號公報

[專利文獻 2]國際公開第 89/02425 號小冊子

[專利文獻 3]日本專利特表 2002-193853 號公報

[專利文獻 4]歐洲專利第 1346995 號說明書

[專利文獻 5]國際公開第 98/23564 號小冊子

因此，即使是 IPS 模式及 VA 模式等運作模式的液晶顯示元件，與陰極射線管（cathode ray tube，CRT）相比較，作為顯示元件尚存在問題，例如期望響應速度提高、對比度提高、驅動電壓降低。

以上述 IPS 模式或 VA 模式運作的顯示元件主要由具有負的介電異向性的液晶組成物所構成，為了進一步提高該些特性，該液晶組成物中所含的液晶性化合物必需具有以下 (1) ~ (8) 所述的特性。即：

(1) 化學性穩定以及物理性穩定；

(2) 具有高透明點（液晶相—各向同性相的轉移溫度）；

(3) 液晶相（向列相、層列相等）的下限溫度、尤其是向列相的下限溫度低；

(4) 黏度小；

(5) 具有適當的光學異向性；

(6) 具有高負的介電異向性；

(7) 具有適當的彈性常數 K_{33} (K_{33} ：彎曲彈性常數)；

(8) 與其他液晶性化合物的相容性優異。

若將包含如 (1) 所述化學性、物理性穩定的液晶性化合物的組成物用於顯示元件，則可增大電壓保持率。

另外，若為包含如 (2) 及 (3) 所述具有高透明點、或具有液晶相的低下限溫度的液晶性化合物的組成物，則可擴大向列相的溫度範圍，可於寬廣的溫度區域用作顯示元件。

進而，若將包含如 (4) 所述黏度小的化合物、以及如 (7) 所述具有大的彈性常數 K_{33} 的化合物的組成物用作顯示元件，則可提高響應速度，於使用包含如 (5) 所述具有適當光學異向性的化合物的組成物的顯示元件的情況，可

實現顯示元件的對比度的提高。根據元件的設計，光學異向性必需由小至大。最近，研究藉由使液晶單元厚度變薄來改善響應速度的方法，伴隨於此，具有大的光學異向性的液晶組成物亦成為必需。

此外，於液晶性化合物具有負的高介電異向性的情況，可降低包含該化合物的液晶組成物的臨限值電壓，因此於使用包含如(6)所述具有高的負的介電異向性的化合物的組成物的顯示元件的情況，可降低顯示元件的驅動電壓，亦可減少電力消耗。進而藉由將包含如(7)所述具有小的彈性常數 K_{33} 的化合物的組成物用作顯示元件，可減小顯示元件的驅動電壓，亦可減少電力消耗。

為了使液晶性化合物表現出單一化合物所難以發揮的特性，該液晶性化合物通常用作與其他很多液晶性化合物混合而製備的組成物。因此，用於顯示元件的液晶性化合物較佳為如(8)所述，與其他液晶性化合物等的相容性良好。另外，顯示元件亦有在包括冰點下的寬廣溫度區域內使用的情況，因此亦有較佳為自低溫度區域起具有良好相容性的化合物的情況。

【發明內容】

本發明的第一目的為提供一種液晶性化合物，其具有對熱、光等的穩定性，於寬廣的溫度範圍內成為向列相，黏度小，具有大的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} ，進而具有高的負的介電異向性及與其他液晶性化合物的優異相容性。

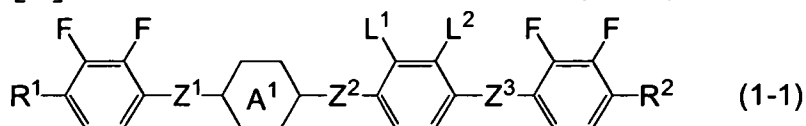
本發明的第二目的為提供一種液晶組成物，其具有對熱、光等的穩定性，黏度低，具有大的光學異向性及高的負的介電異向性，具有適當的彈性常數 K_{33} ，且臨限值電壓低，進而，包含上述化合物，向列相的上限溫度（向列相—各向同性相的相轉移溫度）高，向列相的下限溫度低。

本發明的第三目的為提供一種包含上述組成物的液晶顯示元件，其響應時間短，電力消耗及驅動電壓小，具有大的對比度，且可於寬廣的溫度範圍內使用。

本發明者們鑒於該些課題而進行銳意研究，結果發現，於具有苯環上的氫經氟取代而成的伸苯基的特定結構中，具有三個經氟取代的苯的四環液晶性化合物具有對熱、光等的穩定性，於寬廣的溫度範圍內成為向列相，黏度小，具有大的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} ，進而具有高的負的介電異向性及與其他液晶性化合物的優異相容性，另外發現，包含該化合物的液晶組成物具有對熱、光等的穩定性，黏度小，具有大的光學異向性、適當的彈性常數 K_{33} 及適當高的介電異向性，臨限值電壓低，進而，向列相的上限溫度高，向列相的下限溫度低；並且發現，包含該組成物的液晶顯示元件的響應時間短，電力消耗及驅動電壓小，對比度大，可於寬廣的溫度範圍內使用；從而完成本發明。

即，本發明包括如以下[1]~[20]所述的項目。

[1] 一種化合物，其是由式(1-1)表示：

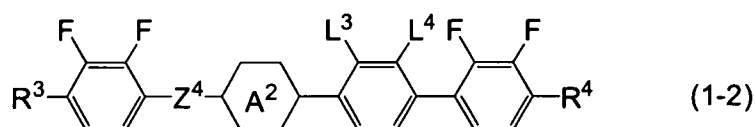


式 (1-1) 中， R^1 及 R^2 獨立地為氫、碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^1 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基或吡啶-2,5-二基；

L^1 及 L^2 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 獨立地為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

[2] 如項[1]所述的化合物，其是由式 (1-2) 表示：

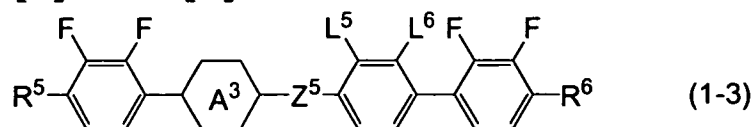


式 (1-2) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^2 為反式-1,4-伸環己基或 1,4-伸環己烯基；

L^3 及 L^4 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且 Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

[3] 如項[1]所述的化合物，其是由式 (1-3) 表示：



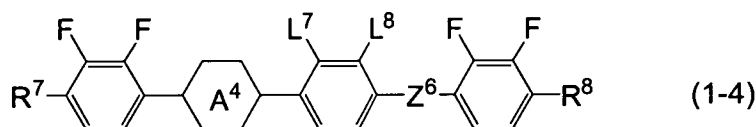
式 (1-3) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^3 為反式-1,4-伸環己基或 1,4-伸環己烯基；

L^5 及 L^6 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

[4] 如項[1]所述的化合物，其是由式 (1-4) 表示：



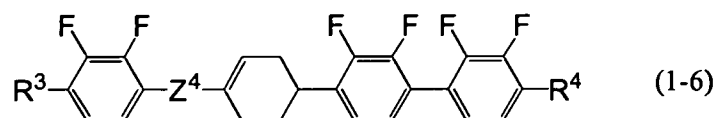
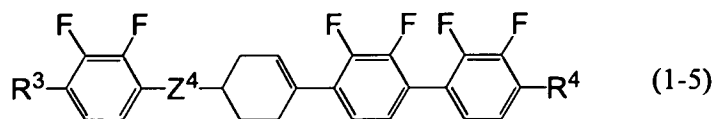
式 (1-4) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^4 為反式-1,4-伸環己基或 1,4-伸環己烯基；

L^7 及 L^8 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

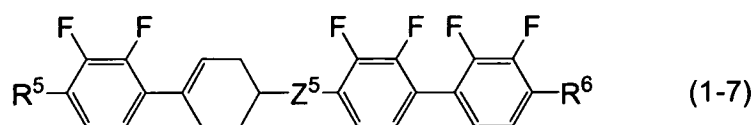
[5] 如項[2]所述的化合物，其是由式 (1-5) 及 (1-6) 中的任一個表示：



式 (1-5) 及 (1-6) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

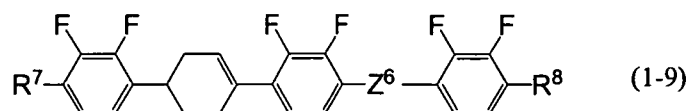
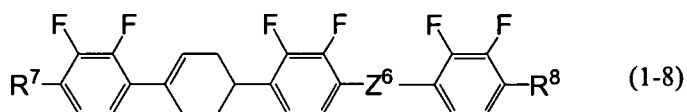
[6] 如項[3]所述的化合物，其是由式 (1-7) 表示：



式 (1-7) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

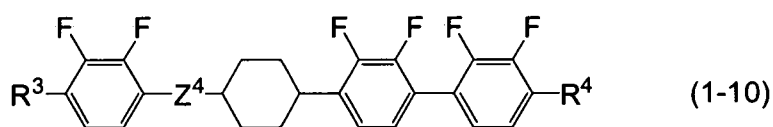
[7] 如項[4]所述的化合物，其是由式 (1-8) 及 (1-9) 中的任一個表示：



式 (1-8) 及 (1-9) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

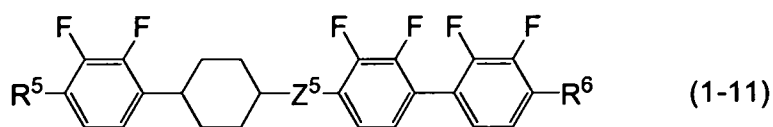
[8] 如項[2]所述的化合物，其是由式 (1-10) 表示：



式 (1-10) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

[9] 如項[3]所述的化合物，其是由式 (1-11) 表示：

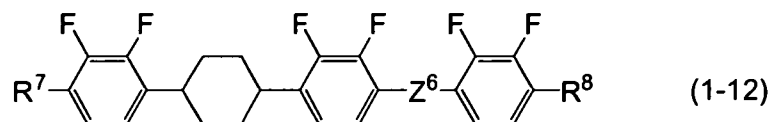


式 (1-11) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、

碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

[10] 如項[4]所述的化合物，其是由式 (1-12) 表示：

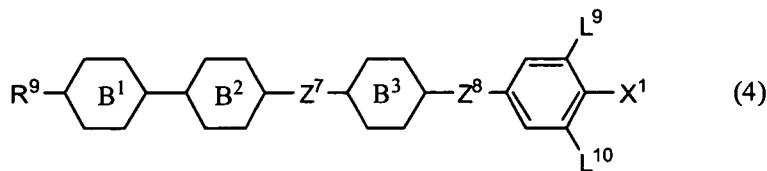
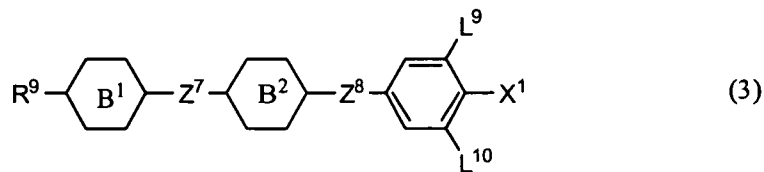
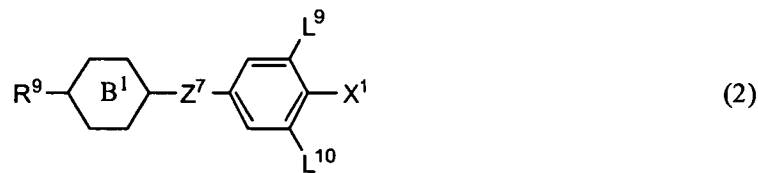


式 (1-12) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

[11] 一種液晶組成物，其包含項[1]~[10]中任一項所述的化合物。

[12] 如項[11]所述的液晶組成物，其更包含選自式 (2)、(3) 及 (4) 分別所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式 (2) ~ (4) 中， R^9 獨立地為碳數 1~10 的烷基或碳數 2~10 的烯基，烷基及烯基中任意的氫可經氟取代，任意的 $-\text{CH}_2-$ 可經 $-\text{O}-$ 取代；

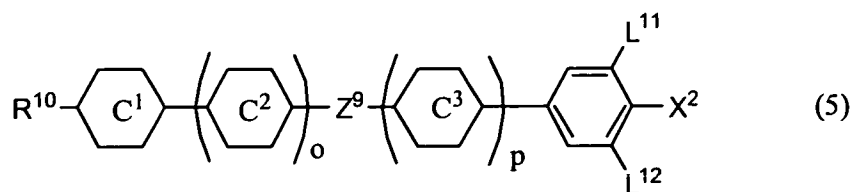
X^1 為氟、氯、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 或 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2\text{CF}_3$ ；

環 B^1 、環 B^2 及環 B^3 獨立地為 1,4-伸環己基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、1-吡喃-2,5-二基、1,4-伸苯基、2-氟-1,4-伸苯基、3-氟-1,4-伸苯基或 3,5-二氟-1,4-伸苯基；

Z^7 及 Z^8 獨立地為 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 或單鍵；並且

L^9 及 L^{10} 獨立地為氫或氟。

[13] 如項[11]所述的液晶組成物，其更包含選自式(5)所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式 (5) 中， R^{10} 為碳數 1~10 的烷基或碳數 2~10 的烯基，烷基及烯基中，任意的氫可經氟取代，任意的 $-CH_2-$ 可經 $-O-$ 取代；

X^2 為 $-C\equiv N$ 或 $-C\equiv C-C\equiv N$ ；

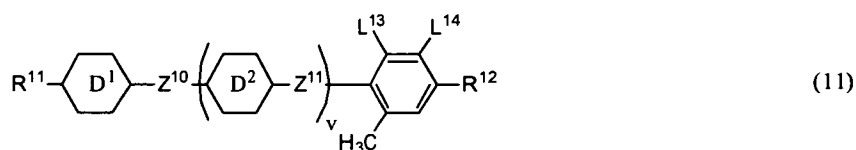
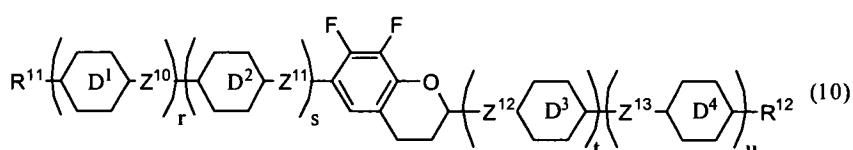
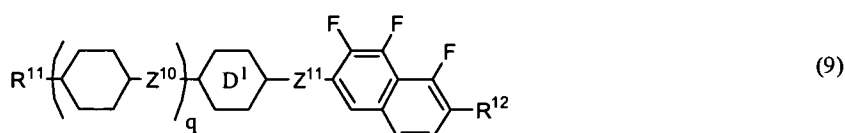
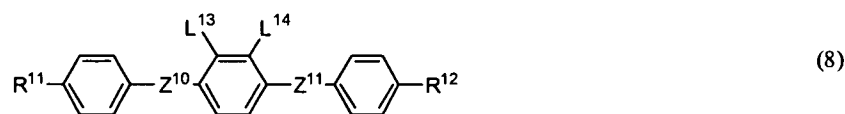
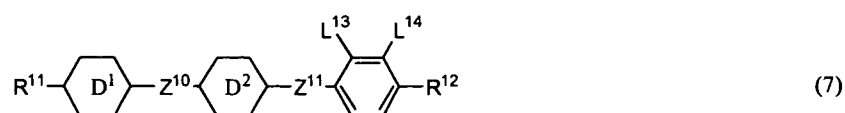
環 C^1 、環 C^2 及環 C^3 獨立地為 1,4-伸環己基、任意的氫可經氟取代的 1,4-伸苯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、1-吡喃-2,5-二基或嘧啶-2,5-二基；

Z^9 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 或單鍵；

L^{11} 及 L^{12} 獨立地為氫或氟；並且

o 為 0、1 或 2， p 為 0 或 1， $o+p$ 為 0、1、2 或 3。

[14] 如項[11]所述的液晶組成物，其更包含選自式 (6)、(7)、(8)、(9)、(10) 及 (11) 分別所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式 (6) ~ (11) 中， R^{11} 及 R^{12} 獨立地為碳數 1~10 的烷基或碳數 2~10 的烯基，烷基及烯基中，任意的氫可經氟取代，任意的- CH_2 -可經-O-取代；

環 D^1 、環 D^2 、環 D^3 及環 D^4 獨立地為 1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、任意的氫可經氟取代的 1,4-伸苯基、6-吡喃-2,5-二基或十氫-2,6-伸萘基；

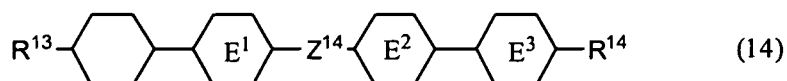
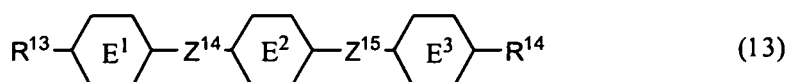
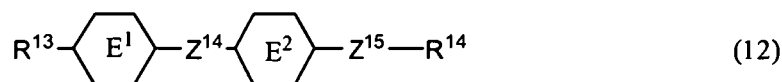
Z^{10} 、 Z^{11} 、 Z^{12} 及 Z^{13} 獨立地為 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ 或單鍵；

L^{13} 及 L^{14} 獨立地為氟或氯；並且

q 、 r 、 s 、 t 、 u 及 v 獨立地為 0 或 1， $r+s+t+u$ 為 1

或 2。

[15] 如項[11]所述的液晶組成物，其更包含選自式(12)、(13)及(14)分別所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式(12)~(14)中， R^{13} 及 R^{14} 獨立地為碳數1~10的烷基或碳數2~10的烯基，該烷基及烯基中，任意的-CH₂-可經-O-取代；

環E¹、環E²及環E³獨立地為1,4-伸環己基、嘧啶-2,5-二基、1,4-伸苯基、2-氟-1,4-伸苯基、3-氟-1,4-伸苯基或2,5-二氟-1,4-伸苯基；並且

Z^{14} 及 Z^{15} 獨立地為-C≡C-、-COO-、-(CH₂)₂-、-CH=CH-或單鍵。

[16] 如項[12]所述的液晶組成物，其更包含選自式(5)所表示的化合物組群中的至少一種化合物。

[17] 如項[14]所述的液晶組成物，其更包含選自式(12)、(13)及(14)分別所表示的化合物組群中的至少

一種化合物。

[18] 如項[11]~[17]中任一項所述的液晶組成物，其更包含至少一種光學活性化合物及/或可聚合的化合物。

[19] 如項[11]~[18]中任一項所述的液晶組成物，其更包含至少一種抗氧化劑及/或紫外線吸收劑。

[20] 一種液晶顯示元件，其包含如項[11]~[19]中任一項所述的液晶組成物。

本說明書中的用語的使用方法如下。液晶性化合物是具有向列相、層列相等液晶相的化合物以及不具有液晶相但可用作液晶組成物的成分的化合物的總稱。有時將液晶性化合物、液晶組成物、液晶顯示元件分別簡稱為化合物、組成物、元件。液晶顯示元件是液晶顯示面板及液晶顯示模組的總稱。向列相的上限溫度為向列相—各向同性相的相轉移溫度，而且有時僅簡稱為透明點或上限溫度。有時將向列相的下限溫度僅簡稱為下限溫度。有時將式(1)所表示的化合物簡稱為化合物(1)。該簡記有時亦應用於式(2)等所表示的化合物。式(1)至式(13)中，由六角形包圍的 B^1 、 D^1 、 E^1 等記號分別對應於環 B^1 、環 D^1 、環 E^1 等。以百分率表示的化合物的量是基於組成物總重量的重量百分率(wt%)。將環 B^1 、 X^1 、環 C^2 等多個相同記號記載於同一式化學或不同化學式中，該些可分別相同，或者亦可不同。

「任意的」是表示不僅位置為任意，而且個數亦為任意，但不包括個數為0的情況。任意的A可經B、C或D

取代的表述，是指除了任意的 A 經 B 取代的情況、任意的 A 經 C 取代的情況及任意的 A 經 D 取代的情況以外，亦包括多個 A 經 B~D 中至少兩個所取代的情況。例如，任意的 $-\text{CH}_2-$ 可經 $-\text{O}-$ 或 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 取代的烷基中，包括烷基、烯基、烷氧基、烷氧基烷基、烷氧基烯基、烯氧基烷基等。此外，本發明中，連續的兩個 $-\text{CH}_2-$ 經 $-\text{O}-$ 取代而成為 $-\text{O}-\text{O}-$ 的情況欠佳。而且，烷基的末端的 $-\text{CH}_2-$ 經 $-\text{O}-$ 取代的情況亦欠佳。以下對本發明進行進一步說明。

[發明的效果]

本發明的液晶性化合物具有對熱、光等的穩定性，於寬廣的溫度範圍內成為向列相，黏度小，具有大的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} (K_{33} ：彎曲彈性常數)，進而具有高的負的介電異向性及與其他液晶性化合物的優異相容性。另外，本發明的液晶性化合物於存在向列相的上限溫度不會降低，而且黏度不會變大而光學異向性變大的傾向的方面特別優異。

另外，本發明的液晶組成物的黏度小，具有大的光學異向性、適當的彈性常數 K_{33} 、以及高的負的介電異向性，且臨限值電壓低，進而，向列相的上限溫度高，向列相的下限溫度低。尤其，本發明的液晶組成物由於具有大的光學異向性，故而對需要大的光學異向性的元件而言有效。

進而，本發明的液晶顯示元件是以包含上述液晶組成物為特徵，響應時間短，電力消耗及驅動電壓小，對比度大，且可於寬廣的溫度範圍內使用，可適宜用於 PC 模式、

TN 模式、STN 模式、ECB 模式、OCB 模式、IPS 模式、VA 模式或 PSA 模式等顯示模式的液晶顯示元件，尤其可適宜用於 IPS 模式、VA 模式或 PSA 模式的液晶顯示元件。

為讓本發明之上述和其他目的、特徵和優點能更明顯易懂，下文特舉較佳實施例，並配合所附圖式，作詳細說明如下。

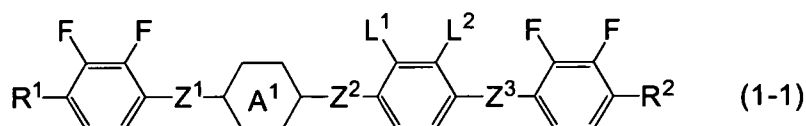
【實施方式】

以下，對本發明進行更具體的說明。

此外，以下說明中，只要無特別說明，則以百分率表示的化合物的量是指基於組成物的總重量的重量百分率 (wt%)。

[化合物 (1-1)]

本發明的液晶性化合物具有式(1-1)所表示的結構(以下，將該些化合物亦稱為「化合物 (1-1)」)。

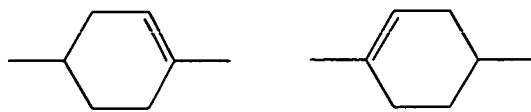


式 (1-1) 中， R^1 及 R^2 獨立地為氫、碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基。

環 A^1 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基或吡啶-2,5-二基。

此外，於本說明書中，1,4-伸環己烯基難以根據環中雙鍵的位置來區別化合物結構。因此，1,4-伸環己烯基的

表述中容許下述兩種化合物結構。



另外，對於 1,3-二噁烷-2,5-二基等而言亦同樣。

L^1 及 L^2 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；

Z^1 、 Z^2 及 Z^3 獨立地為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

化合物 (1-1) 具有三個 2 位或 3 位的氫經氟取代而成的 1,4-伸苯基。由於具有此種結構，而具有小的黏度、適當的光學異向性、適當的彈性常數 K_{33} 、高的負的介電異向性及與其他液晶性化合物的優異相容性。尤其於向列相的上限溫度不會降低，而且黏度不會變大而負的介電異向性高的方面特別優異。

式中， R^1 及 R^2 為氫、碳數 1~10 的烷基或碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基，例如為 $CH_3(CH_2)_3-$ 、 $-CH_2-$ 、 $CH_3(CH_2)_2O-$ 、 $CH_3-O-(CH_2)_2-$ 、 CH_3-O-CH_2-O- 、 $H_2C=CH-(CH_2)_2-$ 、 $CH_3-CH=CH-CH_2-$ 或 $CH_3-CH=CH-O-$ 。

但是，若考慮到化合物的穩定性，則如 $CH_3-O-O-CH_2-$ 等的氧與氧鄰接的基團、或 $CH_3-CH=CH-CH=CH-$ 等的雙鍵部位鄰接的基團欠佳。

該些基團中的碳-碳鍵的鏈較佳為直鏈。若碳-碳鍵的鏈為直鏈，則可擴大液晶相的溫度範圍，且可減小黏度。

另外，於 R^1 及 R^2 中的任一個為光學活性基團的情況，可用作手性摻雜劑 (chiral dopant)，藉由將該化合物添加於液晶組成物中，可防止液晶顯示元件所產生的反向扭轉域 (reverse twisted domain)。

該些 R^1 及 R^2 較佳為烷基、烷氧基、烷氧基烷基及烯基，更佳為烷基、烷氧基或烯基。

於 R^1 及 R^2 為烷基、烷氧基或烯基的情況，可擴大液晶性化合物的液晶相的溫度範圍。

烯基中，依存於烯基中的雙鍵的位置而有 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 的較佳立體構型。

如 $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_4\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 或 $-\text{C}_2\text{H}_4\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 等這樣在奇數位具有雙鍵的烯基中，立體構型較佳為反式構型。

另一方面，如 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHC}_3\text{H}_7$ 等這樣在偶數位具有雙鍵的烯基中，立體構型較佳為順式構型。具有如上所述的較佳立體構型的烯基化合物，其液晶相的溫度範圍廣，具有大的彈性常數比 K_{33}/K_{11} (K_{33} ：彎曲彈性常數， K_{11} ：展曲彈性常數)，可減小化合物的黏度，進而，若將該液晶性化合物添加於液晶組成物中，則可提高向列相的上限溫度 (T_{NI})。

烷基的具體例可列舉： $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{C}_5\text{H}_{11}$ 、 $-\text{C}_6\text{H}_{13}$ 、 $-\text{C}_7\text{H}_{15}$ 、 $-\text{C}_8\text{H}_{17}$ 、 $-\text{C}_9\text{H}_{19}$ 或 $-\text{C}_{10}\text{H}_{21}$ ；

烷氧基的具體例可列舉： $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{OC}_5\text{H}_{11}$ 、 $-\text{OC}_6\text{H}_{13}$ 、 $-\text{OC}_7\text{H}_{15}$ 、 $-\text{OC}_8\text{H}_{17}$ 或 $-\text{OC}_9\text{H}_{19}$ ；

烷氧基烷基的具體例可列舉： $-\text{CH}_2\text{OCH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CH}_2\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_4\text{OCH}_3$ 或 $-(\text{CH}_2)_5\text{OCH}_3$ ；

烯基的具體例可列舉： $-\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 或 $-(\text{CH}_2)_3\text{CH}=\text{CH}_2$ ；

烯氧基的具體例可列舉： $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 或 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 。

R^1 及 R^2 的具體例中，較佳為 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{C}_5\text{H}_{11}$ 、 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{OC}_5\text{H}_{11}$ 、 $-\text{CH}_2\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{OCH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{CH}=\text{CHC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ ，更佳為 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OC}_4\text{H}_9$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 或 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CHC}_3\text{H}_7$ 。

環 A^1 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基或吡啶-2,5-二基。

該些環中，更佳為 1,4-伸環己烯基及反式-1,4-伸環己基，最佳為反式-1,4-伸環己基。

其中，當該些環中的至少一個環為反式-1,4-伸環己基

時，可減小黏度，進而，若將該液晶性化合物添加於液晶組成物中，則可提高向列相的上限溫度 (T_{NI})。

L^1 及 L^2 分別獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟。

若 L^1 及 L^2 中的其中一個為氟，則可降低化合物的熔點，故而較佳。

若 L^1 及 L^2 中全部為氟，則可負地增大化合物的介電異向性，故而最佳。

Z^1 、 Z^2 及 Z^3 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

於 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 或 $-CH=CH-$ 的情況，可減小化合物的黏度，故而較佳。於 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 為 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 的情況，可提高化合物的向列相的上限溫度 (T_{NI})，故而更佳。進而，於 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 為 $-CH_2O-$ 或 $-OCH_2-$ 的情況，可負地提高化合物的介電異向性，故而更佳。

若考慮到化合物的穩定性，則較佳為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 或 $-OCH_2-$ ，更佳為單鍵及 $-(CH_2)_2-$ 。另外，若考慮到提高化合物的向列相的上限溫度，則當 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 中的一個為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 時，其餘較佳為單鍵，更佳為 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 全部為單鍵。

於 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 為 $-CH=CH-$ 的情況，其他基團相對於雙鍵的立體構型較佳為反式構型。由於為此種立體構型，可擴大該液晶性化合物的液晶相的溫度範圍，進而，若將該液晶性化合物添加於液晶組成物中，則可提高向列相的

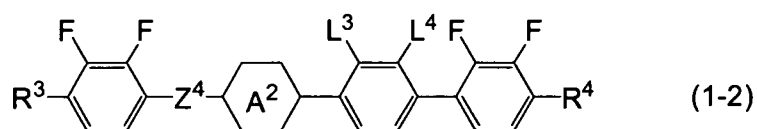
上限溫度 (T_{NI})。

另外，於 Z^1 、 Z^2 及 Z^3 中包含 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 的情況，可擴大液晶相的溫度範圍，增大彈性常數比 K_{33}/K_{11} (K_{33} ：彎曲彈性常數， K_{11} ：展曲彈性常數)，以及減小化合物的黏度，進而，當將該液晶性化合物添加於液晶組成物時，可提高向列相的上限溫度 (T_{NI})。

此外，由於化合物的物性並無大的差異，故而化合物 (1-1) 可含有比同位素相對豐度 (relative isotopic abundance) 的量更多的 ^2H (氘)、 ^{13}C 等的同位素。

該些化合物 (1-1) 中，藉由適當選擇 R^1 、 R^2 、環 A^1 、 Z^1 、 Z^2 以及 Z^3 、 L^1 及 L^2 ，可將介電異向性等物性調整為所需物性。

化合物 (1-1) 所表示的化合物中較佳的化合物可列舉化合物 (1-2) ~ (1-12)。

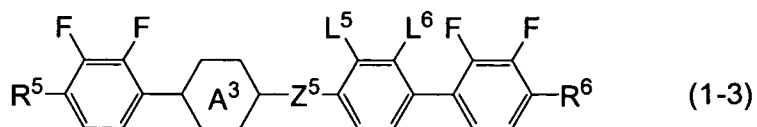


式 (1-2) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^2 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基；

L^3 及 L^4 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；

Z^4 為單鍵、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{OCO}-$ 。

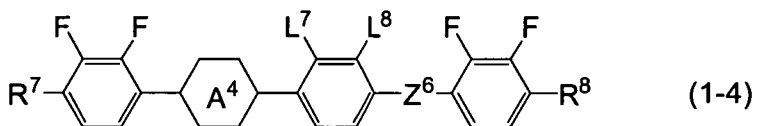


式 (1-3) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^3 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基；

L^5 及 L^6 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。



式 (1-4) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

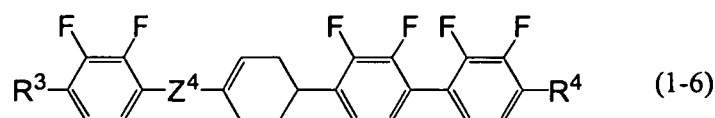
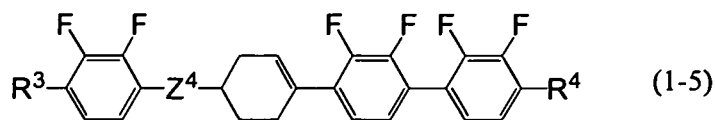
環 A^4 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基；

L^7 及 L^8 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

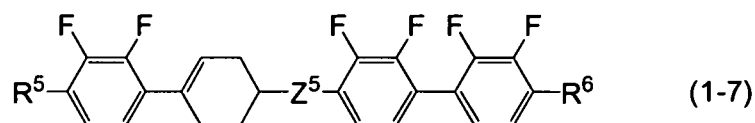
化合物 (1-2) ~ (1-4) 除了具有三個經氟取代的苯，亦具有反式-1,4-伸環己基或 1,4-伸環己烯基，且相對於化合物整體而結構非對稱地具有結合基，因此就可具有對熱或光的穩定性，更降低液晶相的下限溫度，提高向列相的

上限溫度，具有大的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} ，且減小黏度的觀點而言更佳。



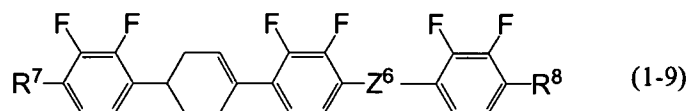
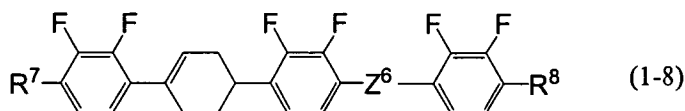
式 (1-5) 及 (1-6) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。



式 (1-7) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

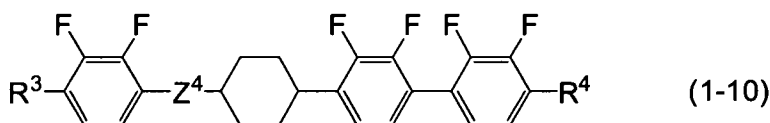
Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。



式 (1-8) 及 (1-9) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

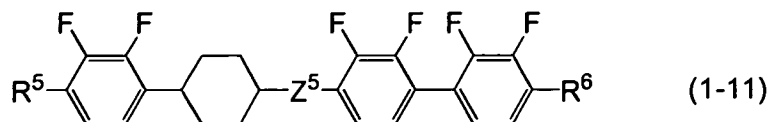
Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

化合物 (1-8) 及 (1-9) 除了具有三個經氟取代的苯，亦具有 1,4-伸環己烯基，且相對於化合物整體而結構非對稱地具有結合基，因此就可具有對熱或光的穩定性，更降低液晶相的下限溫度，更提高向列相的上限溫度，具有大的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} ，且可減小黏度的觀點而言更佳。



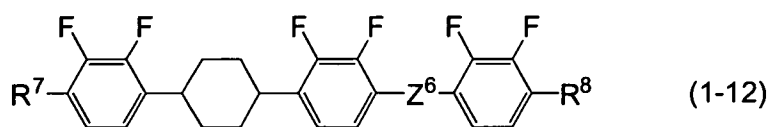
式 (1-10) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。



式 (1-11) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。



式 (1-12) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

化合物 (1-11) 及 (1-12) 除了具有三個經氟取代的苯，亦具有反式-1,4-伸環己基，且相對於化合物整體而結構非對稱地具有結合基，因此就可具有對熱或光的穩定性，更降低液晶相的下限溫度，更提高向列相的上限溫度，具有大的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} ，且可減小黏度的觀點而言更佳。

化合物 (1-2) ~ (1-12) 具有高的負的介電異向性，具有對熱或光的穩定性，於寬廣的溫度範圍內成為向列相，且具有適當的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} 。其中， Z^4 、 Z^5 及 Z^6 為 $-CH=CH-$ 的化合物就可更降低液晶相的

下限溫度，且基本不降低向列相的上限溫度而更減小黏度的觀點而言較佳。另外， Z^4 、 Z^5 及 Z^6 為-COO-或-OCO-的化合物可提高化合物的向列相的上限溫度，故而更佳。另外， Z^4 、 Z^5 及 Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 的化合物就可更降低液晶相的下限溫度，更提高相容性，且更減小黏度的觀點而言更佳。進而， Z^4 、 Z^5 及 Z^6 為-CH₂O-或-OCH₂-的化合物就可更提高負的介電異向性，且更減小黏度的觀點而言最佳。

於液晶性化合物具有該些化合物(1-2)～(1-12)所表示的結構的情況，具有高的負的介電異向性，與其他的液晶性化合物的相容性極其良好。進而，具有對熱、光等的穩定性，黏度小，具有大的光學異向性及適當的彈性常數 K_{33} 。另外，含有該化合物(1-1)的液晶組成物在液晶顯示元件通常使用的條件下穩定，即使在低溫下保管，亦無該化合物析出為結晶(或層列相)的情況。

因此，化合物(1-1)可適宜應用於PC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、VA、PSA等顯示模式的液晶顯示元件中使用的液晶組成物，尤其可適宜應用於IPS、VA或PSA等顯示模式的液晶顯示元件中使用的液晶組成物。

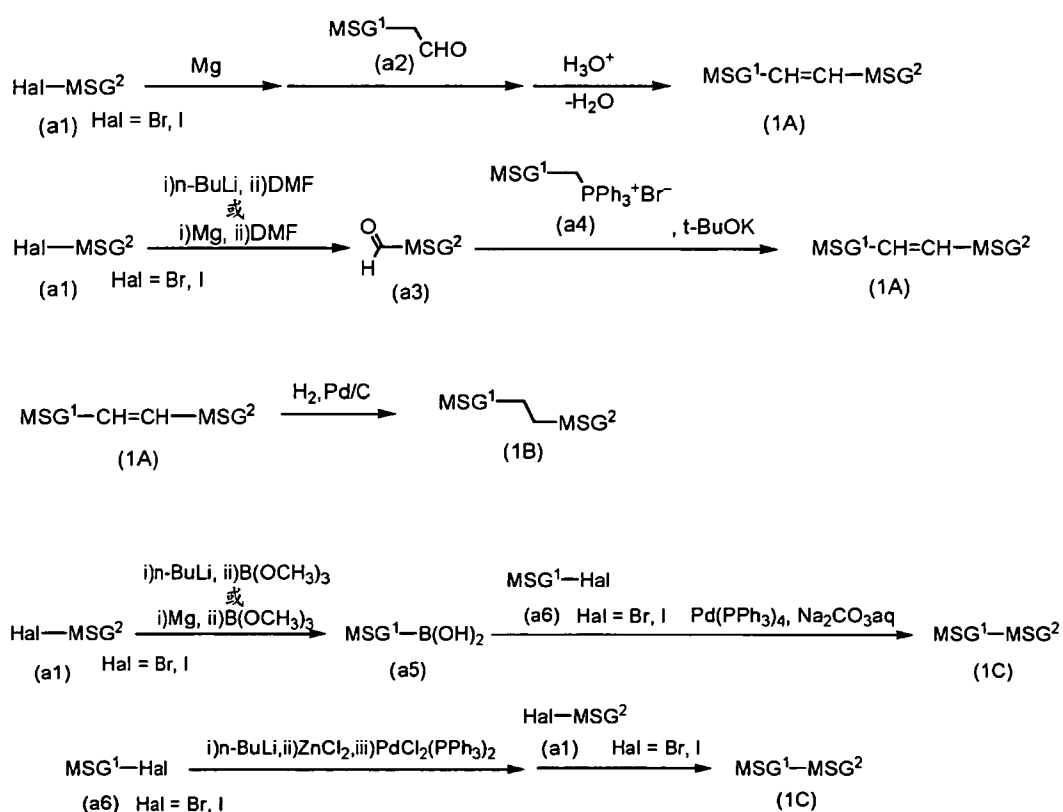
[化合物(1-1)的合成]

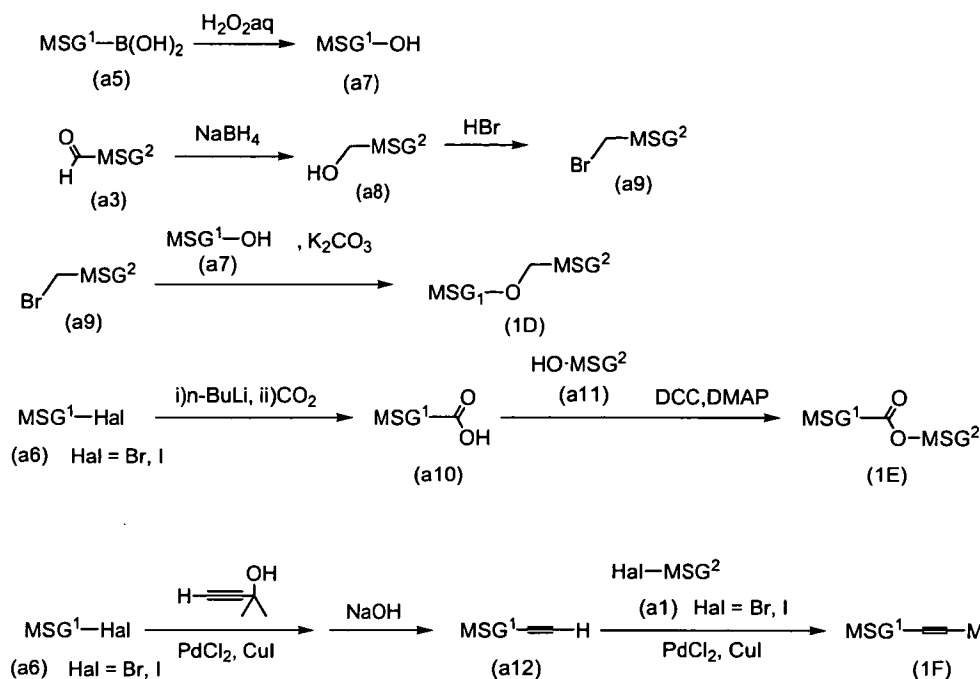
化合物(1-1)可藉由將有機合成化學的合成方法適當組合而合成。於起始物質中導入目標末端基、環及結合基的方法，例如記載於有機合成(Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc)、有機反應(Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc)、綜合有機合成(Comprehensive

Organic Synthesis, Pergamon Press)、新實驗化學講座(丸善)等的成書中。

〈結合基 Z^1 、 Z^2 或 Z^3 的形成〉

列出形成結合基 Z^1 、 Z^2 或 Z^3 的方法的一例。形成結合基的流程示於以下。該流程中， MSG^1 或 MSG^2 為一價有機基團。流程中使用多個 MSG^1 (或 MSG^2) 可相同，或亦可不同。化合物 (1A) 至 (1E) 相當於化合物 (1-1)。





〈雙鍵的生成〉

使具有一價有機基團 MSG^2 的有機鹵素化合物 (a1) 與鎂反應來製備格任亞試劑 (Grignard reagent)。藉由使該些所製備的格任亞試劑或鋰鹽、與醛衍生物 (a2) 反應來合成所對應的醇衍生物。接著，使用對甲苯磺酸等酸觸媒，進行所得醇衍生物的脫水反應，藉此可合成所對應的化合物 (1A)。

使將有機鹵素化合物 (a1) 以丁基鋰、或鎂加以處理所得的化合物，與 N,N-二甲基甲醯胺 (DMF) 等甲醯胺反應，而獲得醛衍生物 (a3)。接著，可使所得的醛 (a3) 與將磷鹽 (a4) 以第三丁醇鉀等鹼加以處理所得的磷葉立德 (phosphorus ylide) 反應，而合成所對應的具有雙鍵的化合物 (1A)。此外，該反應中，根據反應條件亦有生成順式體的情況，因此於需要獲得反式體的情況，視需要利用

公知的方法將順式體異構化為反式體。

〈 $-(\text{CH}_2)_2-$ 的生成〉

藉由將化合物 (1A) 於如碳載鈀 (Pd/C) 等的觸媒的存在下進行氫化，可合成化合物 (1B)。

〈單鍵的生成〉

使有機鹵素化合物 (a1) 與鎂或丁基鋰反應，來製備格任亞試劑或鋰鹽。使該所製備的格任亞試劑或鋰鹽與硼酸三甲酯等硼酸酯反應，以鹽酸等酸加以水解，藉此合成二羥基硼烷衍生物 (a5)。藉由使該二羥基硼烷衍生物 (a5) 與有機鹵素化合物 (a6)，例如於由碳酸鹽水溶液與四(三苯基膦)鈀 (Pd(PPh₃)₄) 所構成的觸媒的存在下反應，可合成化合物 (1C)。

另外，使丁基鋰與具有一價有機基團 MSG¹ 的有機鹵素化合物 (a6) 反應，進而使氯化鋅反應，然後使所得化合物，例如在雙三苯基膦二氯鈀 (Pd(PPh₃)₂Cl₂) 觸媒的存在下與化合物 (a1) 反應，藉此亦可合成化合物 (1C)。

〈 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 或 $-\text{OCH}_2-$ 的生成〉

將二羥基硼烷衍生物 (a5) 利用過氧化氫等氧化劑加以氧化，獲得醇衍生物 (a7)。另外，將醛衍生物 (a3) 以硼氫化鈉等還原劑加以還原而獲得醇衍生物 (a8)。將所得的醇衍生物 (a8) 以氫溴酸等加以鹵化而獲得有機鹵素化合物 (a9)。然後使以上述方式獲得的醇衍生物 (a8) 與有機鹵素化合物 (a9) 在碳酸鉀等的存在下反應，藉此可合成化合物 (1D)。

〈-COO-與-OCO-的生成〉

使正丁基鋰與化合物 (a6) 反應，接著使二氧化碳反應而獲得羧酸衍生物 (a10)。使羧酸衍生物 (a10) 與苯酚衍生物 (a11) 在 1,3-二環己基碳二醯亞胺 (1,3-dicyclohexylcarbodiimide, DCC) 與 4-二甲基胺基吡啶 (4-dimethylamino pyridine, DMAP) 的存在下進行脫水，可合成具有 -COO- 的化合物 (1E)。利用該方法亦可合成具有 -OCO- 的化合物。

〈-C≡C-的生成〉

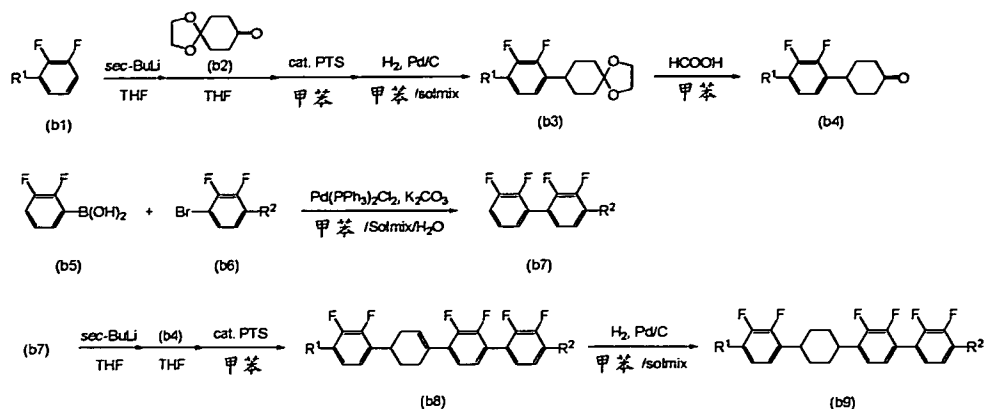
在二氯鈣與鹵化銅的觸媒存在下，使 2-甲基-3-丁炔-2-醇 (2-methyl-3-butyne-2-ol) 與化合物 (a6) 反應後，在鹼性條件下去保護而獲得化合物 (a12)。然後於二氯鈣與鹵化銅的觸媒存在下，使化合物 (a12) 與化合物 (a1) 反應而合成化合物 (1F)。

〈環 A¹ 的形成〉

關於反式-1,4-伸環己基、環己烯-1,4-二基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基及吡啶-2,5-二基等的環，起始物質已有市售，或者合成法已熟知。

[化合物 (1-1) 的製造方法]

以下，列出化合物 (1-1) 的製造例。



首先，使二氟苯衍生物 (b1) 與第二丁基鋰 (sec-butyllithium, sec-BuLi) 反應來製備鋰鹽。接著使該鋰鹽與羰基衍生物 (b2) 反應，進而，在對甲苯磺酸等酸觸媒的存在下，進行所得醇衍生物的脫水反應，然後在 Pd/C 等觸媒的存在下進行氫化反應，藉此獲得化合物 (b3)。使所得化合物 (b3) 以甲酸等進行反應而獲得羰基衍生物 (b4)。另外，使二氟苯基硼酸 (b5) 與溴二氟苯衍生物 (b6) 在碳酸鉀、Pd(PPh₃)₂Cl₂ 等觸媒的存在下反應而獲得化合物 (b7)。

使上述操作中所獲得的化合物 (b7) 與 sec-BuLi 反應來製備鋰鹽。接著使該鋰鹽與羰基衍生物 (b4) 反應，進而，在對甲苯磺酸等酸觸媒的存在下，進行所得醇衍生物的脫水反應，可製造作為本發明化合物 (1-1) 的一例的 (b8)。進而，在 Pd/C 等觸媒的存在下進行氫化反應，藉此可製造作為本發明化合物 (1-1) 的一例的 (b9)。

[液晶組成物]

以下，對本發明的液晶組成物進行說明。該液晶組成物的成分的特徵為包含至少一種化合物 (1-1)，但亦可包

含兩種以上的化合物 (1-1)，亦可僅由化合物 (1-1) 所構成。另外，當製備本發明的液晶組成物時，例如亦可考慮到化合物 (1-1) 的介電異向性來選擇成分。經選擇成分的液晶組成物，其黏度低，具有高的負的介電異向性，具有適當的彈性常數 K_{33} ，且臨限值電壓低，進而，向列相的上限溫度（向列相—各向同性相的相轉移溫度）高，向列相的下限溫度低。

[液晶組成物 (1)]

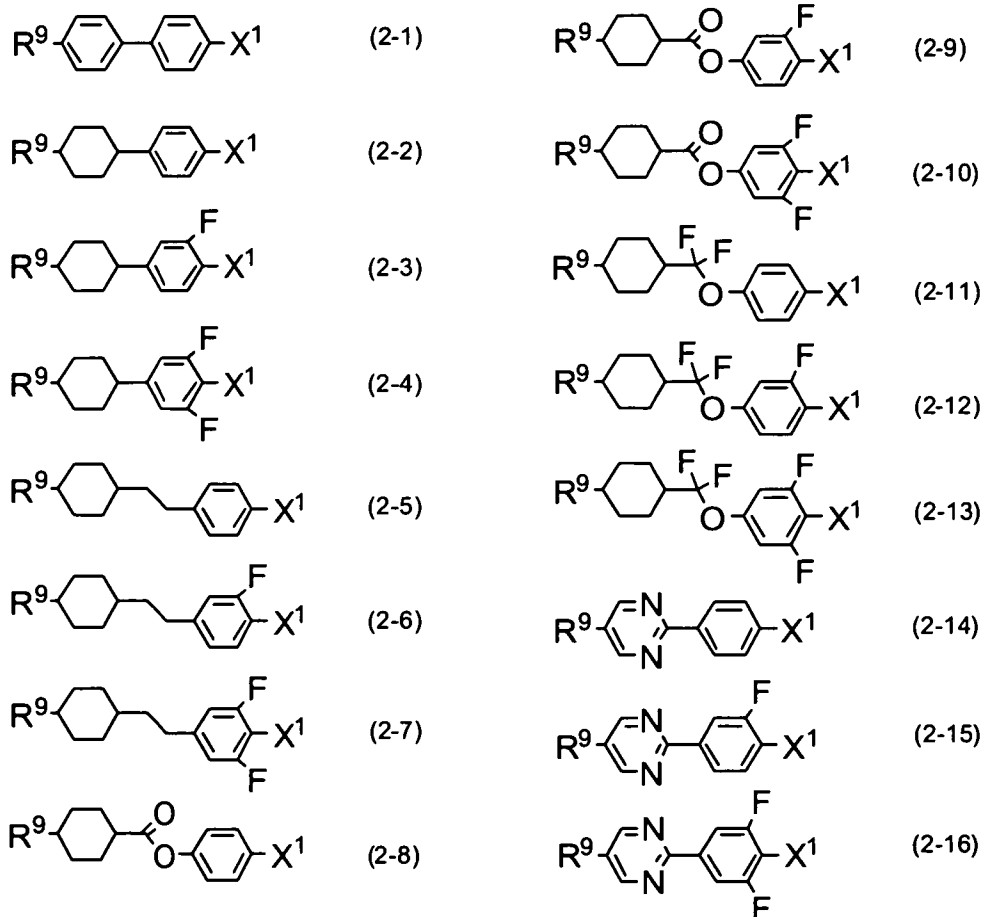
本發明的液晶組成物必需包含本發明的式 (1) 所表示的化合物作為成分 A。可為僅包含該成分 A 的組成物、或者成分 A 與本說明書中未特別表示成分名的其他成分的組成物，藉由在該成分 A 中添加選自以下所示的成分 B、C、D 及 E 中的成分，可提供具有各種特性的本發明液晶組成物。

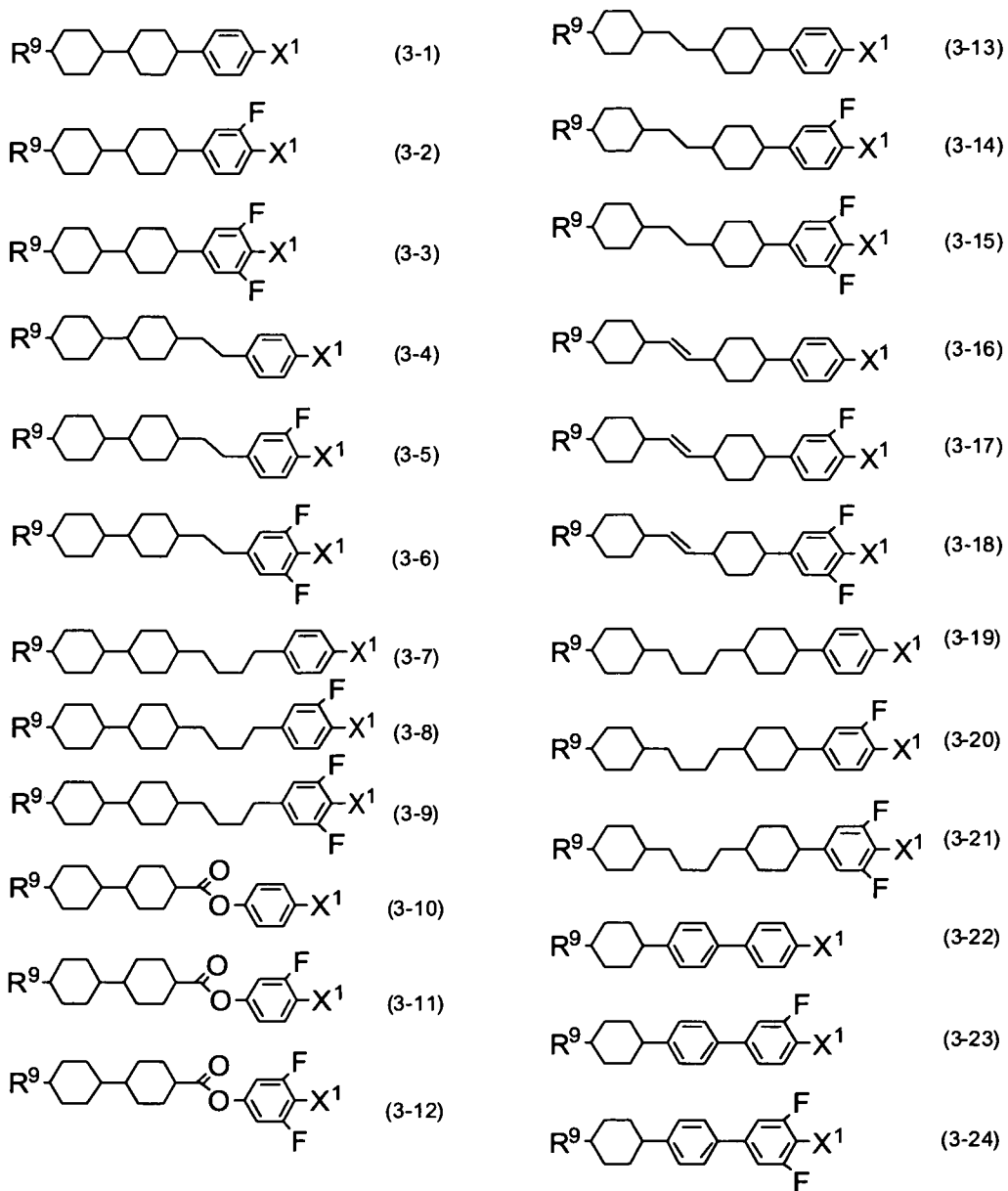
添加於成分 A 中的成分較佳為將以下成分混合而成：由選自由式 (2)、(3) 及 (4) 所組成的組群中的至少一種化合物所構成的成分 B，及/或由選自由上述式 (5) 所組成的組群中的至少一種化合物所構成的成分 C，及/或由選自由式 (6)、(7)、(8)、(9)、(10) 及 (11) 所組成的組群中的至少一種化合物所構成的成分 D。進而，藉由混合由選自由式 (12)、(13) 及 (14) 所組成的組群中的至少一種化合物所構成的成分 E，可調整臨限值電壓、液晶相溫度範圍、折射率異向性值、介電異向性值及黏度等。

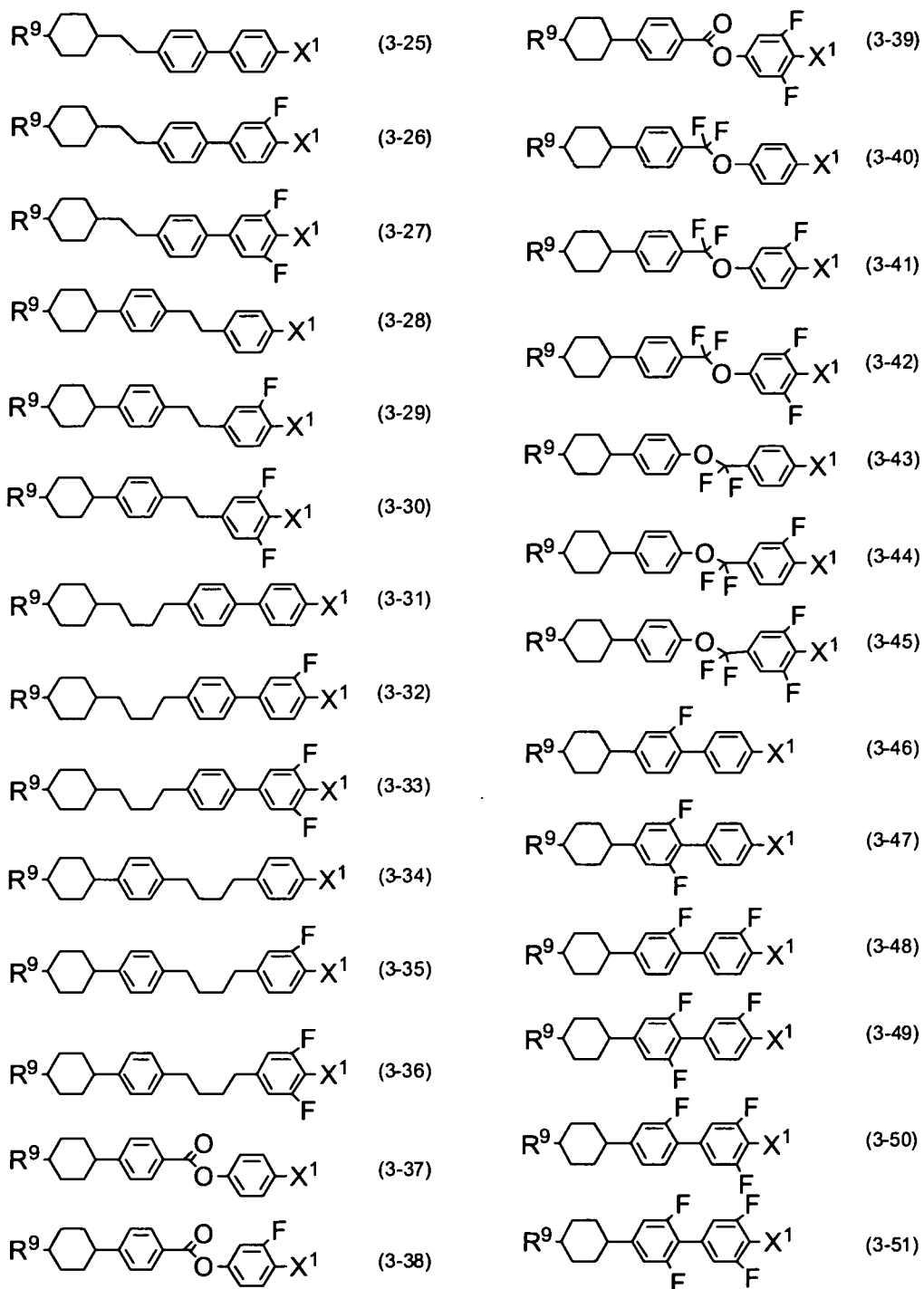
另外，本發明中使用的液晶組成物的各成分即使為由

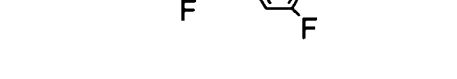
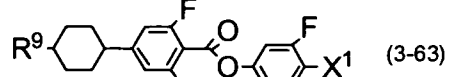
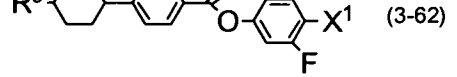
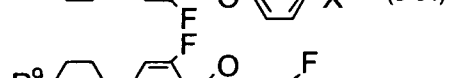
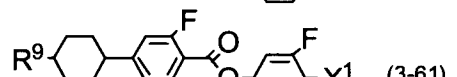
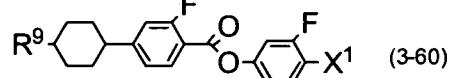
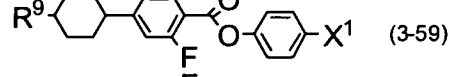
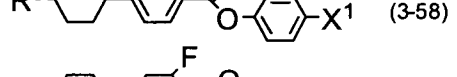
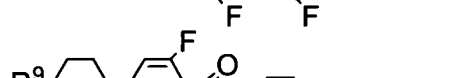
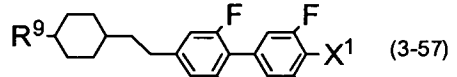
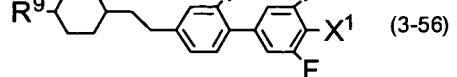
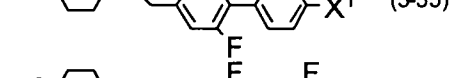
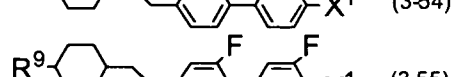
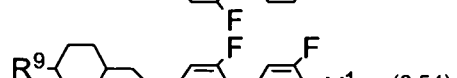
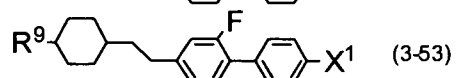
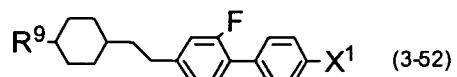
各元素的同位素所構成的類似物，其物理特性亦無大的差異。

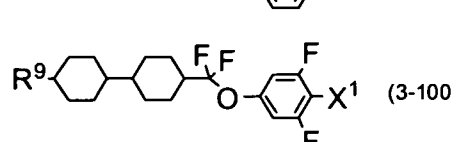
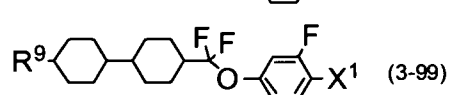
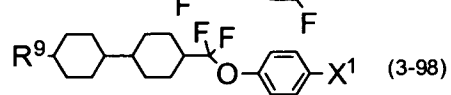
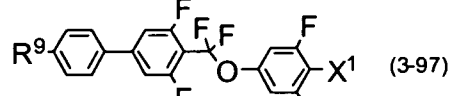
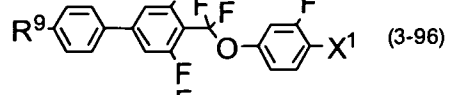
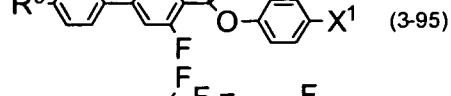
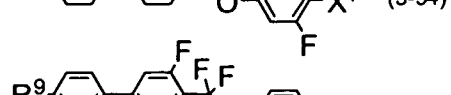
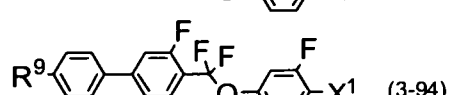
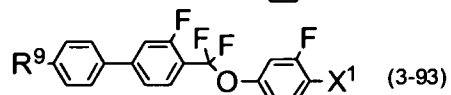
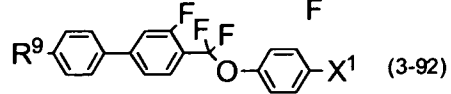
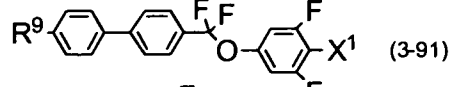
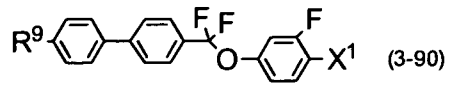
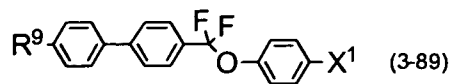
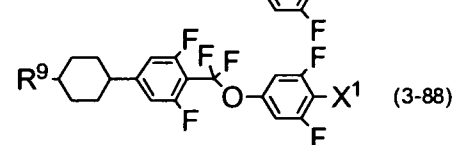
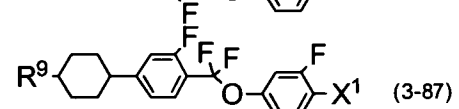
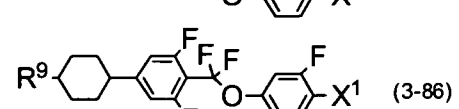
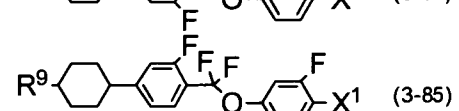
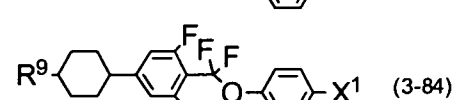
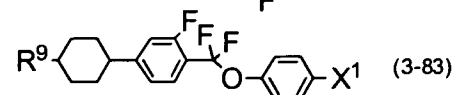
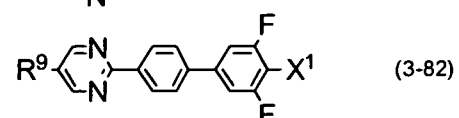
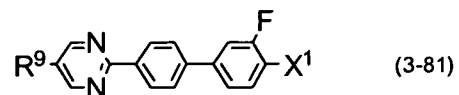
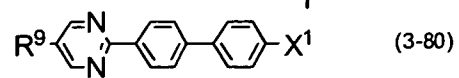
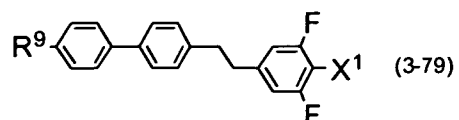
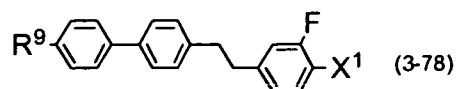
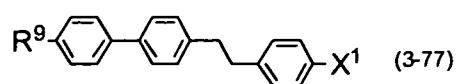
上述成分 B 中，式 (2) 所示化合物的較佳例可列舉式 (2-1) ~ (2-16)，式 (3) 所示化合物的較佳例可列舉式 (3-1) ~ (3-112)，式 (4) 所示化合物的較佳例可列舉式 (4-1) ~ (4-54)。

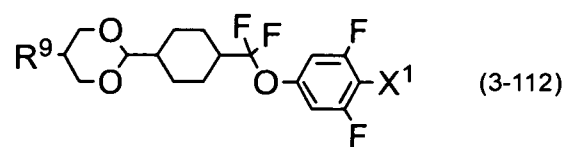
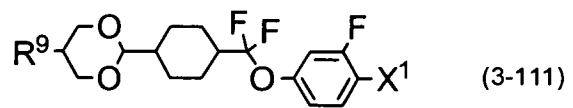
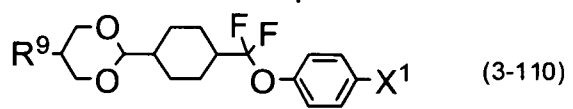
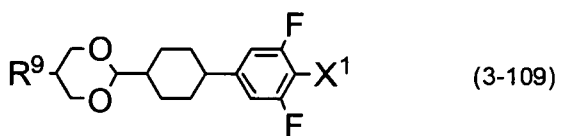
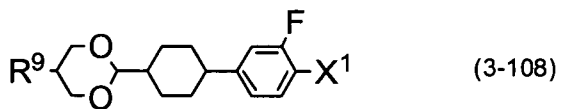
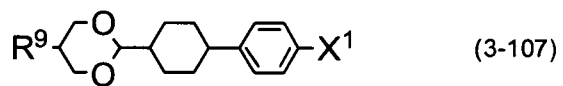
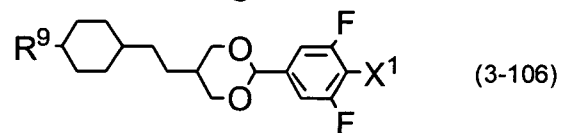
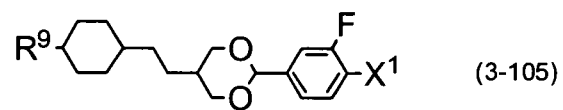
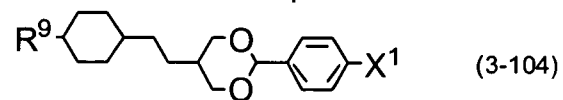
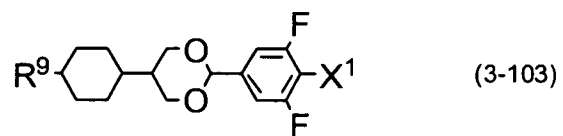
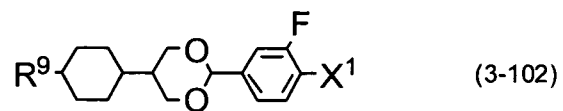
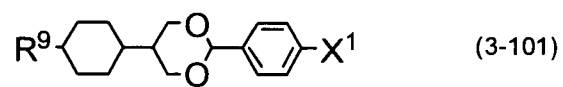


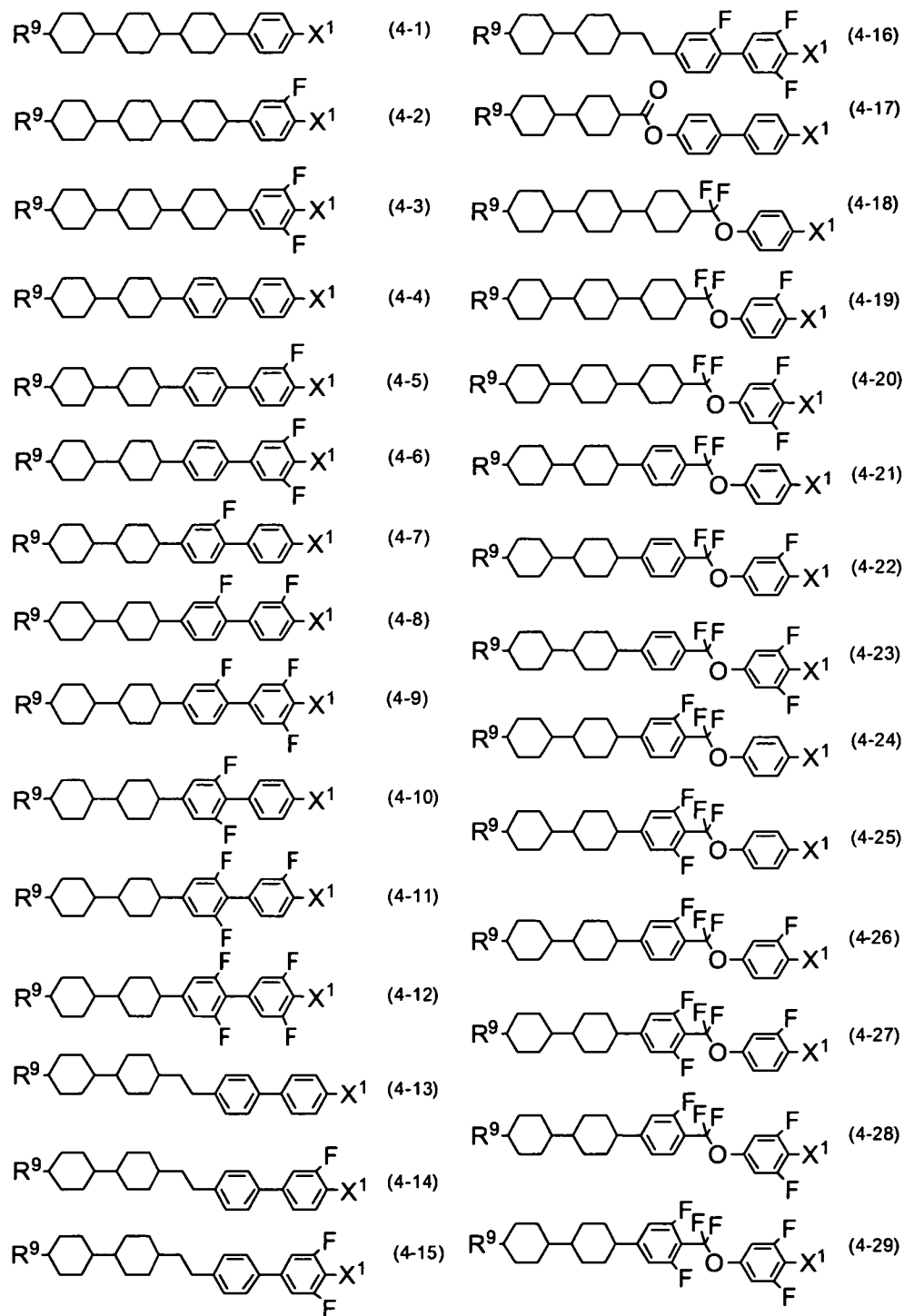


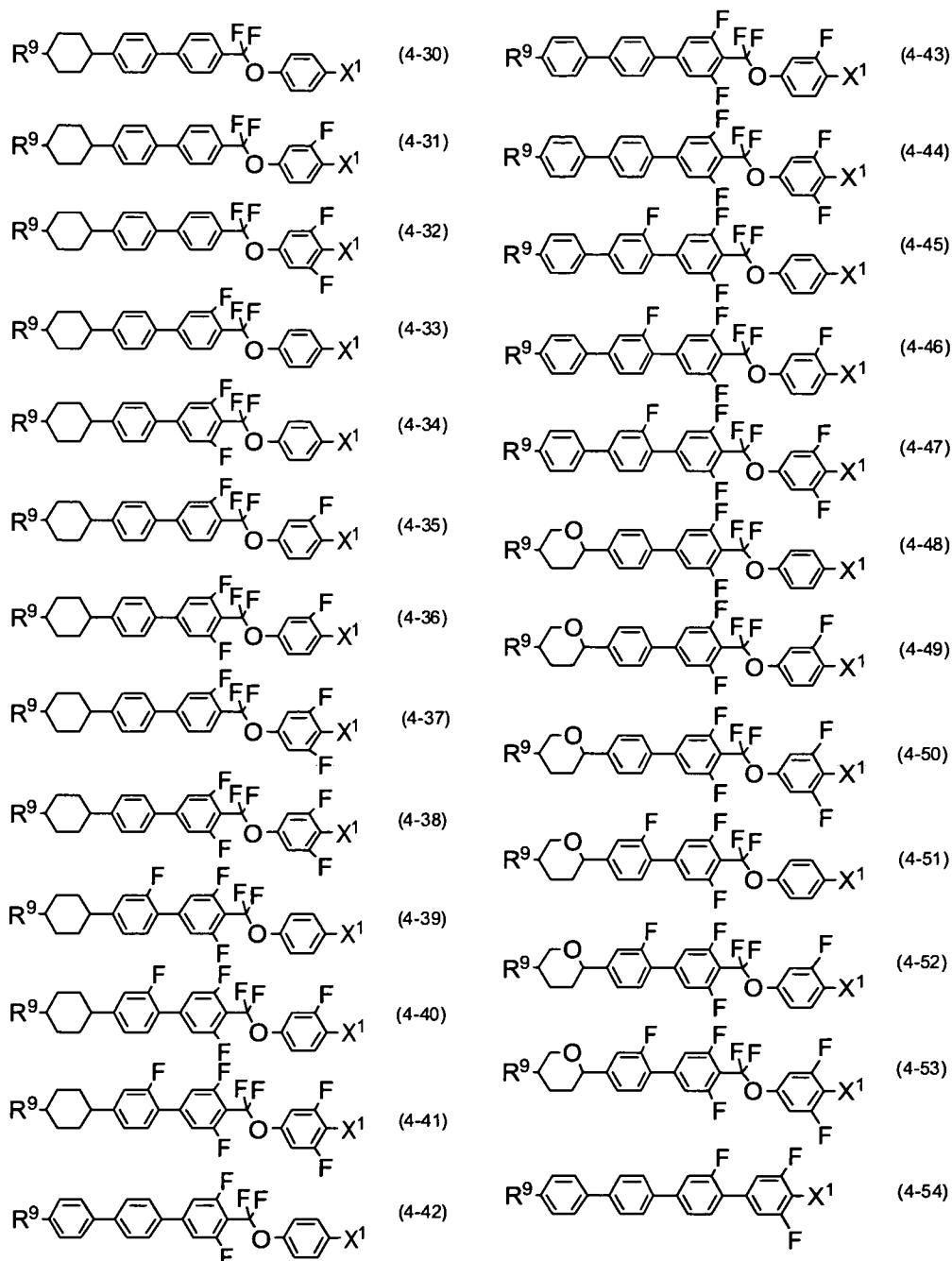










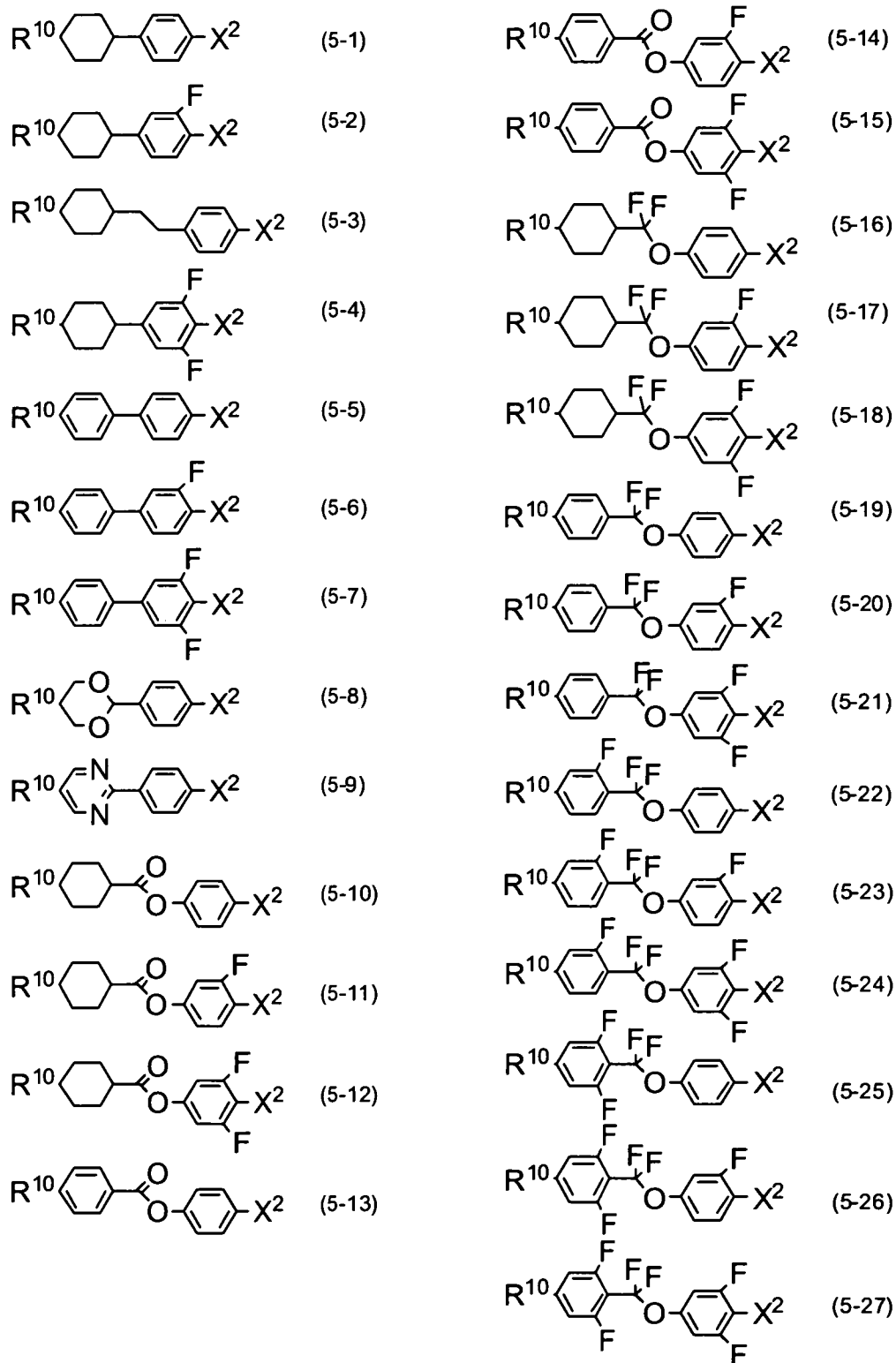


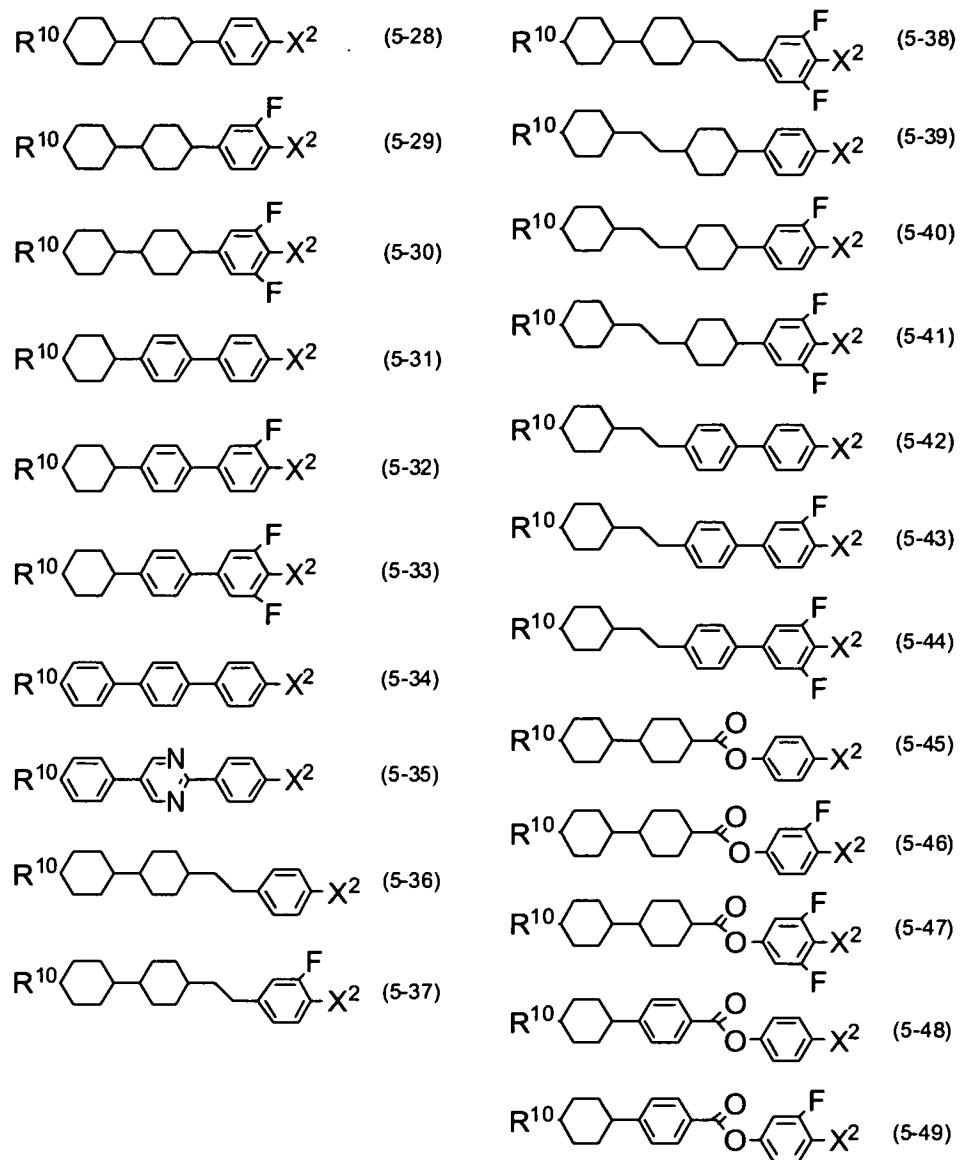
(式中， R^9 、 X^1 表示與上述相同的含義)

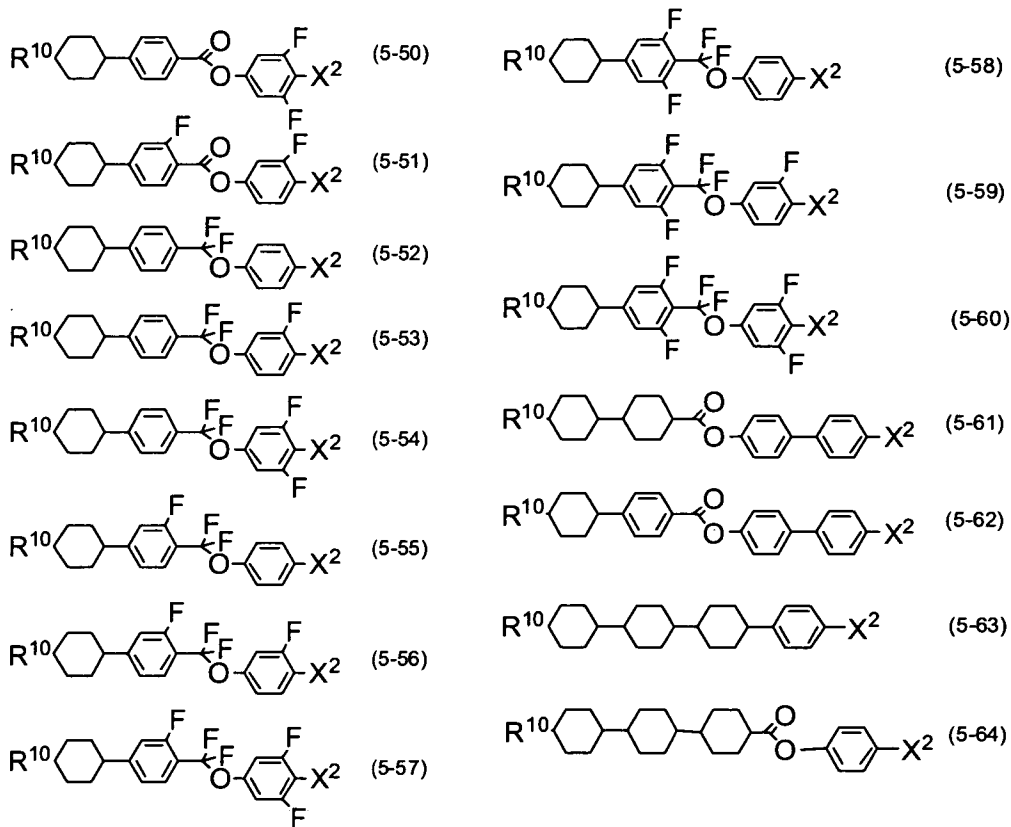
該些式(2)~(4)所表示的化合物即成分B由於介電異向性值為正，且熱穩定性或化學穩定性非常優異，故而用於製備薄膜電晶體(thin film transistor, TFT)用以及PSA用的液晶組成物的情況。本發明的液晶組成物中的成

分 B 的含量相對於液晶組成物的總重量，較適合為 1 wt% ~ 99 wt% 的範圍，較佳為 10 wt% ~ 97 wt%，更佳為 40 wt% ~ 95 wt%。另外，藉由更包含式 (12) ~ (14) 所表示的化合物 (成分 E)，可調整黏度。

式 (5) 所表示的化合物即成分 C 中的較佳例可列舉式 (5-1) ~ (5-64)。







(式中， R^{10} 及 X^2 表示與上述相同的含義)

式 (5) 中，當 \circ 為 2 時，兩個環 C^2 可相同，亦可不同。

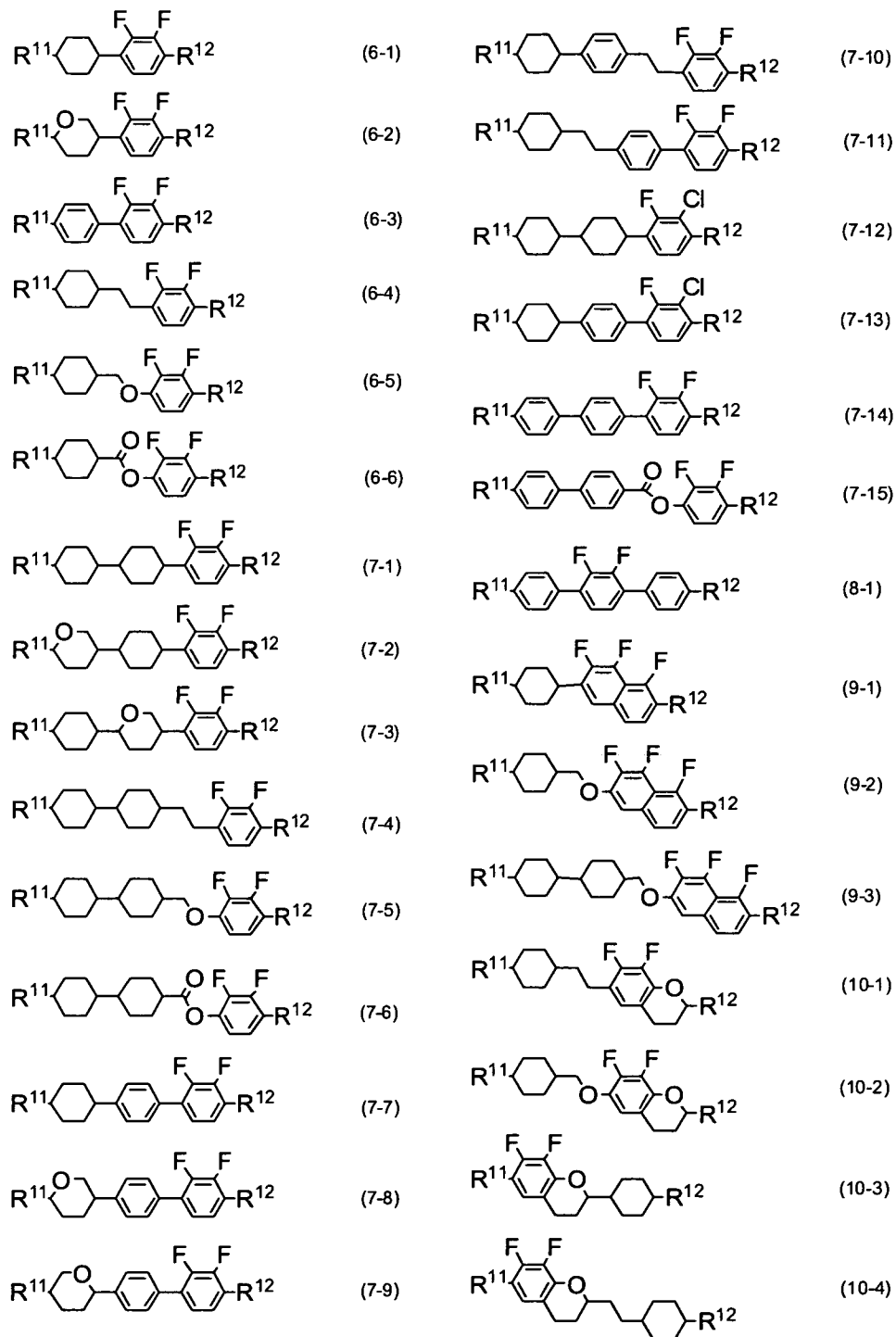
該些式 (5) 所表示的化合物即成分 C 由於介電異向性值為正且其值非常大，故而主要用於製備 STN 用、TN 用或 PSA 用的液晶組成物的情況。藉由含有該成分 C，可減小組成物的臨限值電壓。另外，可調整黏度、調整折射率異向性值以及擴大液晶相溫度範圍。進而亦可用於改良急峻性。

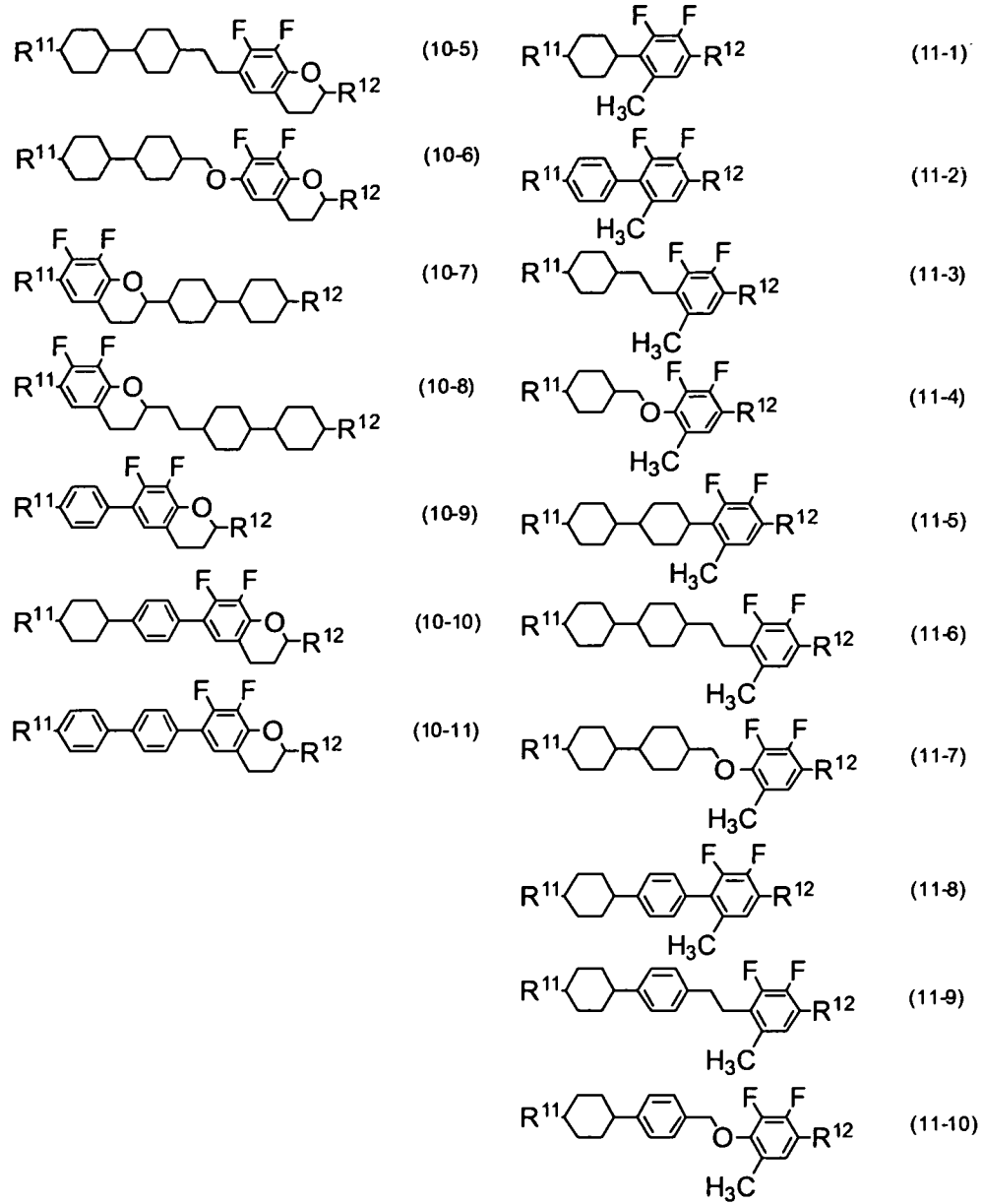
於製備 STN 或 TN 用的液晶組成物的情況，成分 C 的含量可應用 0.1 wt%~99.9 wt% 的範圍，較佳為 10 wt%~

97 wt%，更佳為 40 wt%~95 wt%。另外，藉由混合後述成分，可調整臨限值電壓、液晶相溫度範圍、折射率異向性值、介電異向性值及黏度等。

於製備用於垂直配向模式（VA 模式）、聚合物穩定配向模式（PSA 模式）等的介電異向性為負的本發明液晶組成物的情況，由選自由式（6）~（11）所組成的組群中的至少一種化合物所構成的成分 D 為較佳成分。

該式（6）~（11）所示化合物（成分 D）的較佳例分別可列舉式（6-1）~（6-6）、（7-1）~（7-15）、（8-1）、（9-1）~（9-3）、（10-1）~（10-11）及（11-1）~（11-10）。





(式中， R^{11} 、 R^{12} 表示與上述相同的含義)

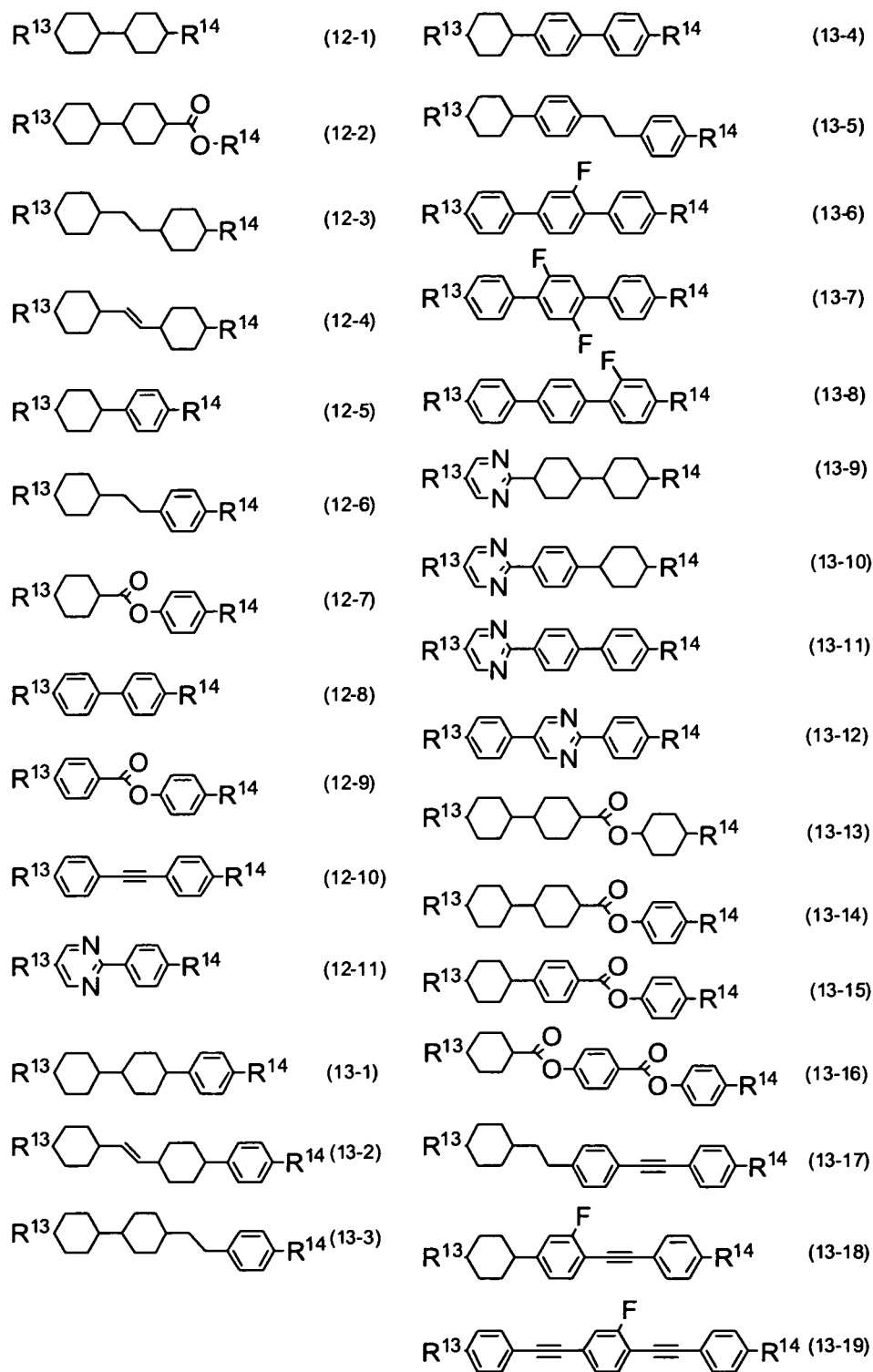
該些成分D的化合物主要用於介電異向性的值為負的VA 模式、PSA 模式用的液晶組成物。若增加該化合物的含量，則組成物的臨限值電壓降低，但黏度增大，因此較佳為只要滿足臨限值電壓的要求值，則減少該化合物的含量。然而，由於介電異向性值的絕對值為5左右，故而若

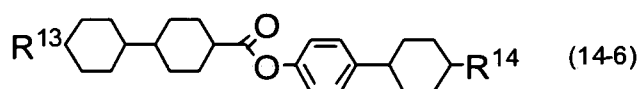
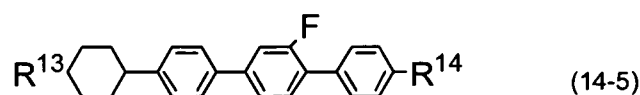
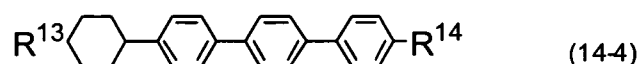
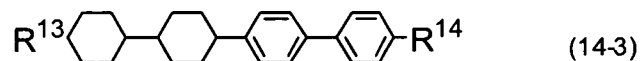
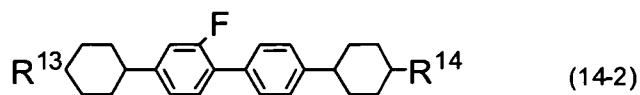
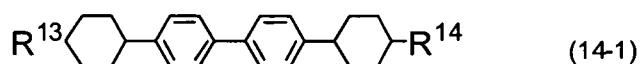
含量變得少於 40 wt%，則有無法進行電壓驅動的情況。

成分 D 中式 (6) 所表示的化合物為二環化合物，因此主要具有調整臨限值電壓、調整黏度或調整折射率異向性值的效果。另外，式 (7) 及式 (8) 所表示的化合物為三環化合物，因此獲得提高透明點、擴大向列範圍 (nematic range)、降低臨限值電壓、及增大折射率異向性值等的效果。另外，式 (9)、(10) 及 (11) 獲得降低臨限值電壓等的效果。

於製備 VA 模式、PSA 模式用的組成物的情況，成分 D 的含量相對於組成物總量，較佳為 40 wt% 以上，更佳為 50 wt%~95 wt%。另外，藉由混合成分 D，可控制彈性常數，控制組成物的電壓穿透率曲線。於將成分 D 混合於介電異向性值為正的組成物中的情況，相對於組成物總量，該成分 D 的含量較佳為 30 wt% 以下。

式 (12)、(13) 及 (14) 所示化合物 (成分 E) 的較佳例分別可列舉式 (12-1)~(12-11)、(13-1)~(13-19) 及 (14-1)~(14-6)。





(式中， R^{13} 及 R^{14} 表示與上述相同的含義)

式(12)~(14)所表示的化合物(成分E)是介電異向性值的絕對值小，且接近中性的化合物。式(12)所表示的化合物主要具有調整黏度或調整折射率異向性值的效果，另外，式(13)及(14)所表示的化合物具有提高透明點等擴大向列範圍的效果、或者調整折射率異向性值的效果。

若增加成分E所表示的化合物的含量，則液晶組成物的臨限值電壓提高，黏度降低，因此只要滿足液晶組成物的臨限值電壓的要求值，則成分E含量越多越好。於製備TFT用、PSA用的液晶組成物的情況，相對於組成物總量，

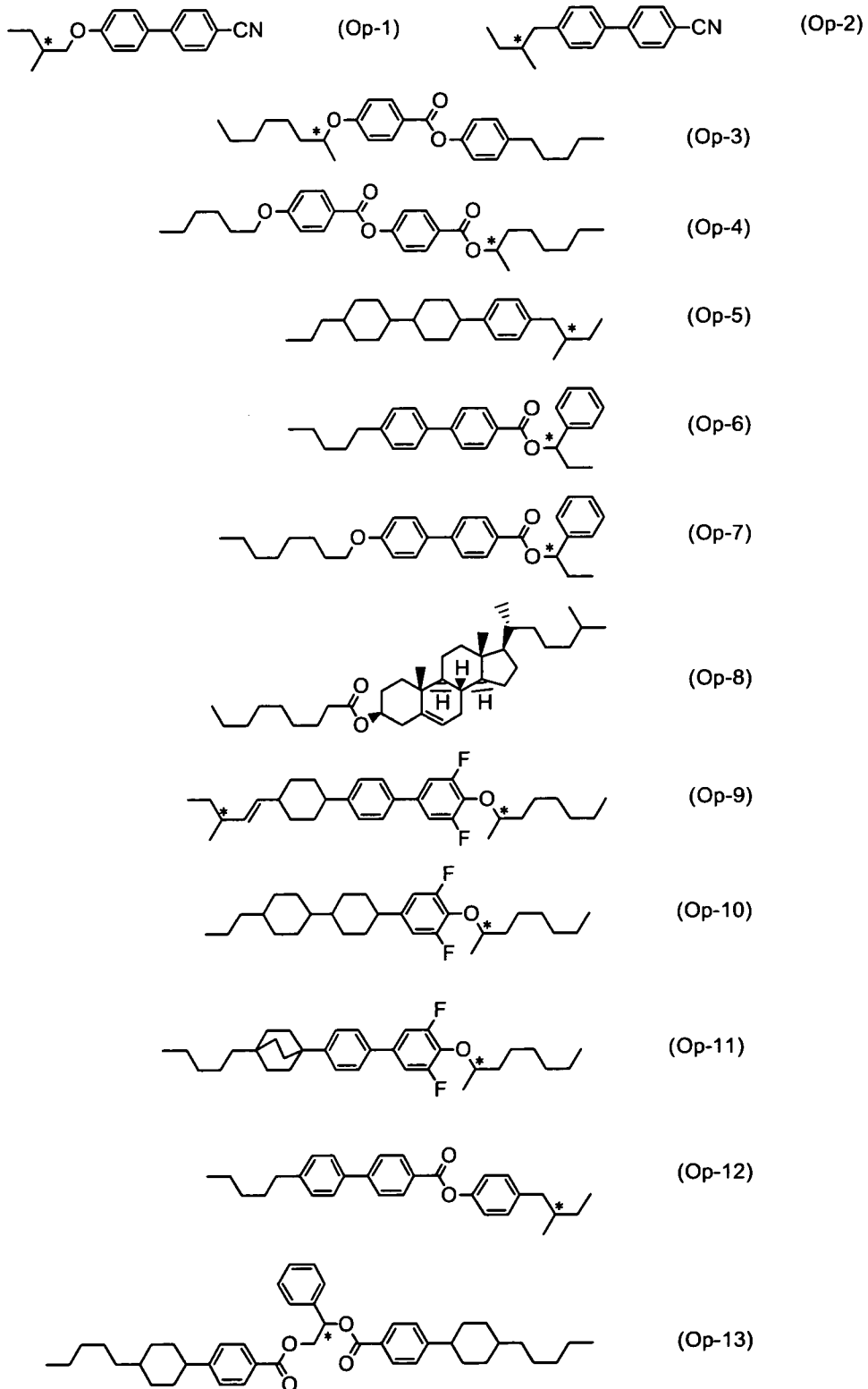
成分 E 的含量較佳為 30 wt% 以上，更佳為 50 wt% 以上。另外，於製備 TN 用、STN 用或 PSA 用的液晶組成物的情況，相對於組成物總量，成分 E 的含量較佳為 30 wt% 以上，更佳為 40 wt% 以上。

為了表現出優良的特性，本發明的液晶組成物較佳為以 0.1 wt%~99 wt% 的比例含有本發明的式 (1) 所表示的化合物的至少一種。

本發明的液晶組成物的製備通常是利用公知的方法，例如使必需成分在高溫下溶解的方法等來製備。另外，視用途而添加本領域技術人員所熟知的添加物，來製備包含例如以下所述的光學活性化合物、或可聚合的化合物、聚合起始劑的本發明的液晶組成物，及添加有染料的賓主 (guest host, GH) 型用的液晶組成物。通常，添加物為本領域技術人員所熟知，並詳細記載於文獻等中。

本發明的液晶組成物可於上述本發明的液晶組成物中更含有一種以上的光學活性化合物。

添加公知的手性摻雜劑作為光學活性化合物。該手性摻雜劑具有引起液晶的螺旋結構來調整必需的扭轉角，以防止逆扭轉的效果。手性摻雜劑的例子可列舉以下的光學活性化合物 (Op-1) ~ (Op-13)。



本發明的液晶組成物可添加該些光學活性化合物來調整扭轉的間距。若為 TFT 用及 TN 用的液晶組成物，則扭

轉的間距較佳為調整為 40 μm ~200 μm 的範圍。若為 STN 用的液晶組成物，則扭轉的間距較佳為調整為 6 μm ~20 μm 的範圍。另外，於雙穩定 TN (Bistable TN) 模式用的情況，較佳為調整為 1.5 μm ~4 μm 的範圍。另外，為了調整間距的溫度依存性，可添加兩種以上的光學活性化合物。

本發明的液晶組成物若添加部花青素 (merocyanine) 系、苯乙烯基 (styryl) 系、偶氮 (azo) 系、偶氮次甲基 (azomethine) 系、氧偶氮基 (azoxy) 系、喹啉黃 (quinophthalone) 系、蔥醌 (anthraquinone) 系、四嗪 (tetrazine) 系等二色性色素，亦可用作 GH 型用的液晶組成物。

本發明的液晶組成物亦可用作將向列液晶加以微膠囊化 (microencapsulation) 而製作的向列曲線排列相 (nematic curvilinear aligned phase, NCAP)、或在液晶中形成三維網狀高分子而製作的聚合物分散型液晶顯示元件 (polymer dispersed liquid crystal display, PDLCD) 例如聚合物網絡液晶顯示元件 (polymer network liquid crystal display, PNLCD) 用為代表的雙折射控制 (ECB) 型或動態散射 (dynamic scattering, DS) 型用的液晶組成物。

另外，本發明的液晶組成物亦可添加可聚合的化合物而用作 PSA 型用的液晶組成物。可聚合的化合物的例子為丙烯酸酯、甲基丙烯酸酯、乙烯基、乙烯氧基、丙烯基醚、環氧基、乙烯基酮及氧雜環丁烷 (oxetane) 等的具有可聚合基團的化合物。可聚合的化合物較佳為在光聚合起始劑

等適當的起始劑存在下藉由紫外線 (ultraviolet, UV) 照射等來聚合。用以進行聚合的適當條件、起始劑的適當類型以及適當的量已為本領域技術人員所熟知，並記載於文獻中。例如作為光聚合起始劑的 Irgacure 651 (註冊商標)、Irgacure 184 (註冊商標)、或 Darocure 1173 (註冊商標) (Ciba Japan K.K.) 適合於自由基聚合。

[液晶組成物的製造方法]

例如於構成各成分的化合物為液體的情況，本發明的液晶組成物可藉由使各化合物混合振盪而製備；另外，於包含固體的情況，本發明的液晶組成物可藉由將各化合物混合，加熱溶解而彼此形成液體後使其振盪而製備。另外，本發明的液晶組成物亦可利用其他公知的方法來製備。

[液晶組成物的特性]

本發明的液晶組成物中，可將向列相的上限溫度設為 70°C 以上，且將向列相的下限溫度設為 -20°C 以下，向列相的溫度範圍廣。因此，包含該液晶組成物的液晶顯示元件可於寬廣的溫度區域內使用。

本發明的液晶組成物中，藉由適當調整組成等，例如可將光學異向性調整為 0.10~0.13 的範圍，或者調整 0.05~0.18 的範圍等，可調整為任意的範圍。

另外，本發明的液晶組成物中，通常可獲得具有 -5.0~-2.0 範圍的介電異向性、較佳為 -4.5~-2.5 範圍的介電異向性的液晶組成物。具有 -4.5~-2.5 範圍的介電異向性的液晶組成物可適宜用作以 IPS 模式、VA 模式、或 PSA 模式

運作的液晶顯示元件。

[液晶顯示元件]

本發明的液晶組成物不僅可用於具有 PC 模式、TN 模式、STN 模式、OCB 模式、PSA 模式等運作模式且以主動矩陣 (active matrix, AM) 方式驅動的液晶顯示元件，而且可用於具有 PC 模式、TN 模式、STN 模式、OCB 模式、VA 模式、IPS 模式等運作模式且以被動矩陣 (passive matrix, PM) 方式驅動的液晶顯示元件。

該些 AM 方式及 PM 方式的液晶顯示元件亦可應用於反射型、穿透型、半穿透型、任一種液晶顯示器等。

另外，本發明的液晶組成物亦可用於：使用添加有導電劑的液晶組成物的 DS 模式元件、或將液晶組成物加以微膠囊化而製作的 NCAP 元件、或使液晶組成物中形成有三維網狀高分子的聚合物分散 (polymer dispersed, PD) 元件，例如聚合物網絡 (polymer network, PN) 元件。

其中，本發明的液晶組成物中，由於具有如上所述的特性，故而可適宜用於以 VA 模式、IPS 模式或 PSA 模式等利用具有負的介電異向性的液晶組成物的運作模式來驅動的 AM 方式的液晶顯示元件，尤其可適宜用於以 VA 模式驅動的 AM 方式的液晶顯示元件。

此外，於以 TN 模式、VA 模式等驅動的液晶顯示元件中，電場的方向與液晶層垂直。另一方面，於以 IPS 模式等驅動的液晶顯示元件中，電場的方向與液晶層平行。此外，以 VA 模式驅動的液晶顯示元件的結構報告於 K.

Ohmuro, S. Kataoka, T. Sasaki and Y. Koike, SID '97 Digest of Technical Papers, 28, 845 (1997)中，以 IPS 模式驅動的液晶顯示元件的結構報告於國際公開 91/10936 號小冊子 (Family : US5576867) 中。

[實例]

[化合物 (1-1) 的實例]

以下，藉由實例，對本發明進行更詳細的說明，但本發明不受該些實例的限制。此外，只要無特別說明，則「%」是指「wt%」。

所得化合物是跟 $^1\text{H-NMR}$ 分析所獲得的核磁共振波譜、氣體層析法 (gas chromatography, GC) 分析所獲得的氣相層析圖等來鑑定，因此首先對分析方法進行說明。

$^1\text{H-NMR}$ 分析

測定裝置是使用 DRX-500 (Bruker BioSpin (股) 公司製造)。測定是將實例等中製造的樣品溶解於 CDCl_3 等可溶解樣品的氘化溶劑中，於室溫下以 500 MHz、累計次數為 32 次的條件進行。此外，於所得核磁共振波譜的說明中，s 是指單峰 (singlet)，d 是指雙重峰 (doublet)，t 是指三重峰 (triplet)，q 是指四重峰 (quartet)，quin 是指五重峰 (quintet)，sex 是指六重峰 (sextet)，m 是指多重峰 (multiplet)，br 是指寬峰 (broad)。另外，化學位移 δ 值的零點的基準物質是使用四甲基矽烷 (tetramethylsilane, TMS)。

GC 分析

測定裝置是使用島津製作所製造的 GC-14B 型氣相層析儀。管柱是使用島津製作所製造毛細管柱 CBP1-M25-025 (長度 25 m, 內徑 0.22 mm, 膜厚 0.25 μm ; 固定液相是使用二甲基聚矽氧烷; 無極性)。載氣是使用氦氣, 流量調整為 1 ml/min。將試料氣化室的溫度設定為 280°C, 將檢測器 (火焰離子檢測器, flame ionization detector, FID) 部分的溫度設定為 300°C。

試料是以溶解於甲苯 (toluene) 中而成為 1 wt% 的溶液的方式來製備, 將所得溶液 1 μl 注入至試料氣化室中。

記錄計是使用島津製作所製造的 C-R6A 型 Chromatopac 或其同等品。所得氣相層析圖中顯示與成分化合物相對應的波峰的保持時間及波峰的面積值。

此外, 試料的稀釋溶劑可使用例如氯仿 (chloroform)、己烷 (hexane)。另外, 管柱可使用 Agilent Technologies Inc. 製造的毛細管柱 DB-1 (長度 30 m, 內徑 0.32 mm, 膜厚 0.25 μm)、Agilent Technologies Inc. 製造的 HP-1 (長度 30 m, 內徑 0.32 mm, 膜厚 0.25 μm)、Restek Corporation 製造的 Rtx-1 (長度 30 m, 內徑 0.32 mm, 膜厚 0.25 μm)、SGE International Pty. Ltd 製造的 BP-1 (長度 30 m, 內徑 0.32 mm, 膜厚 0.25 μm) 等。

氣相層析圖中的波峰的面積比相當於成分化合物的比例。通常, 分析樣品的成分化合物的重量百分比並非與分析樣品的各波峰的面積百分比完全相同, 本發明中使用上述管柱的情況, 由於實質上修正係數為 1, 故而分析樣品

中的成分化合物的重量百分比與分析樣品中的各波峰的面積百分比大致對應。其原因在於成分的液晶性化合物的修正係數無大的差異。為了根據氣相層析圖來更正確地求出液晶組成物中的液晶性化合物的組成比，而使用氣相層析圖的內部標準法。對正確稱量一定量的各液晶性化合物成分（被檢成分）與成為基準的液晶性化合物（基準物質）同時進行氣相層析測定，預先算出被檢成分的波峰與基準物質的波峰的面積比的相對強度。若使用各成分相對於基準物質的波峰面積的相對強度進行修正，則可根據氣相層析分析來更正確地求出液晶組成物中的液晶性化合物的組成比。

[液晶性化合物等的物性值的測定試料]

測定液晶性化合物的物性值的試料有將化合物其本身作為試料的情況、將化合物與母液晶混合而作為試料的情況此兩種。

於使用將化合物與母液晶混合而成的試料的後者情況，是以下述方法進行測定。首先，將 15 wt% 的所得液晶性化合物與 85 wt% 的母液晶混合而製作試料。而且，依據下述式所示的外推法，由所得試料的測定值計算出外推值。將該外推值作為該化合物的物性值。

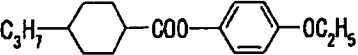
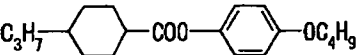
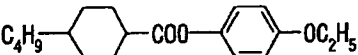
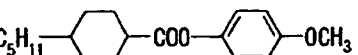
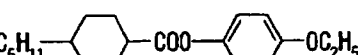
$$\langle \text{外推值} \rangle = (100 \times \langle \text{試料的測定值} \rangle - \langle \text{母液晶的重量百分比} \rangle \times \langle \text{母液晶的測定值} \rangle) / \langle \text{液晶性化合物的重量百分比} \rangle$$

即使液晶性化合物與母液晶的比例為該比例，於層列

相、或結晶於 25°C 下析出的情況，亦將液晶性化合物與母液晶的比例依序變更為 10 wt% : 90 wt%、5 wt% : 95 wt%、1 wt% : 99 wt%，以層列相、或結晶於 25°C 下不析出的組成來測定試料的物性值，依據該式而求出外推值，將其作為液晶性化合物的物性值。

本測定中使用的母液晶存在各種的種類，例如，母液晶 i 的組成如下所述。

母液晶 i :

	17.2%
	27.6%
	20.7%
	20.7%
	13.8%

此外，測定液晶組成物的物性值的試料是使用液晶組成物其本身。

[液晶性化合物等的物性值的測定方法]

物性值的測定是以後述方法進行。該些測定方法多為記載於日本電子機械工業會規格 (Standard of Electric Industries Association of Japan) EIAJ·ED-2521A 中的方法、

或將其修飾而成的方法。另外，在用於測定的 TN 元件或 VA 元件上未安裝 TFT。

測定值中，將以液晶性化合物單體其本身作為試料而獲得的值、與以液晶組成物其本身作為試料而獲得的值直接記載為實驗資料。於將化合物混合於母液晶中而獲得為試料的情況，將以外推法獲得的值作為外推值。

相結構及轉移溫度 (°C)

利用以下 (1) 及 (2) 的方法進行測定。

(1) 於具備偏光顯微鏡的熔點測定裝置的加熱板 (Mettler 公司, FP-52 型高溫載台 (hot stage)) 上放置化合物，一邊以 3°C/min 的速度加熱，一邊以偏光顯微鏡觀察相狀態及其變化，以指定相的種類。

(2) 使用 Perkin Elmer 公司製造的掃描熱量計 DSC-7 系統、或 Diamond DSC 系統，以 3°C/min 的速度升降溫，藉由外推而求出伴隨試料的相變化的吸熱波峰、或發熱波峰的起始點 (on set)，以決定轉移溫度。

以下，結晶是表示為 C。於對結晶加以區別的情況，分別表示為 C₁ 或 C₂。另外，層列相表示為 S，向列相表示為 N。液體 (各向同性 (isotropic)) 表示為 I。層列相中，於對層列 B 相、或層列 A 相加以區別的情況，分別表示為 S_B、或 S_A。轉移溫度的表述，例如所謂「C 50.0 N 100.0 I」，是表示由結晶至向列相的轉移溫度 (CN) 為 50.0°C，由向列相至液體的轉移溫度 (NI) 為 100.0°C。其他表述亦同樣。

向列相的上限溫度 (T_{NI} : °C)

於具備偏光顯微鏡的熔點測定裝置的加熱板 (Mettler 公司, FP-52 型高溫載台) 上, 放置試料 (液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物), 一邊以 $1^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的速度加熱, 一邊觀察偏光顯微鏡。將試料的一部分由向列相變化為各向同性液體時的溫度作為向列相的上限溫度。以下, 有時將向列相的上限溫度僅稱為「上限溫度」。

低溫相容性

製作以液晶性化合物成為 20 wt%、15 wt%、10 wt%、5 wt%、3 wt% 及 1 wt% 的量的方式將母液晶與液晶性化合物混合而成的試料, 將試料放入玻璃瓶中。然後將該玻璃瓶在 -10°C 或 -20°C 的冷凍器 (freezer) 中保管一定時期後, 觀察結晶或層列相是否析出。

黏度 (整體黏度, η , 於 20°C 下測定, $\text{mPa}\cdot\text{s}$)

具有若黏度 (整體黏度) 小則響應時間減少的特徵。
測定是使用 E 型旋轉黏度計。

黏度 (旋轉黏度, γ_1 , 於 25°C 下測定, $\text{mPa}\cdot\text{s}$)

具有若黏度 (旋轉黏度) 小則響應時間減少的特徵。

測定是依據 M. Imai et al., *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, Vol. 259, 37 (1995) 中記載的方法。在兩片玻璃基板的間隔 (液晶單元間隙) 為 $20\ \mu\text{m}$ 的 VA 元件中放入試料 (液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物)。在 30 伏特至 50 伏特的範圍以 1 伏特為單位階段性地施加於該元件。不施加電壓 0.2 秒後, 以僅一個矩形波 (矩

形脈衝，0.2 秒）與無施加（2 秒）的條件反覆施加。測定由該施加所產生的暫態電流（transient current）的峰值電流（peak current）與峰值時間（peak time）。根據該些測定值與 M. Imai 等人的論文第 40 頁的計算式（8）來獲得旋轉黏度的值。此外，該計算所必需的介電異向性是使用下述介電異向性測定而得的值。

光學異向性（折射率異向性，於 25°C 下測定， Δn ）

測定是於 25°C 的溫度下，使用波長 589 nm 的光，且利用目鏡上安裝有偏光板的阿貝折射計（abbe refractometer）而進行。對主稜鏡的表面向一方向摩擦後，將試料（液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物）滴加於主稜鏡上。折射率（ n_{\parallel} ）是在偏光方向與摩擦方向平行時測定。折射率（ n_{\perp} ）是在偏光方向與摩擦方向垂直時測定。光學異向性（ Δn ）的值是根據 $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$ 的式子計算出。

介電異向性（ $\Delta \epsilon$ ，於 25°C 下測定）

介電異向性是利用以下方法測定。

於經充分清洗的玻璃基板上塗佈十八烷基三乙氧基矽烷（0.16 mL）的乙醇（20 mL）溶液。以旋轉器使玻璃基板後，於 150°C 下加熱 1 小時。由兩片玻璃基板來組裝成間隔（液晶單元間隙）為 20 μm 的 VA 元件。

利用相同的方法，於玻璃基板上製備聚醯亞胺的配向膜。對所得玻璃基板的配向膜進行摩擦處理後，組裝成兩片玻璃基板的間隔為 9 μm ，且扭轉角為 80 度的 TN 元件。

於所得的 VA 元件中放入試料（液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物），施加 0.5 V（1 kHz，正弦波），測定液晶分子的長軸方向的介電常數（ ϵ_{\parallel} ）。

另外，於所得 TN 元件中放入試料（液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物），施加 0.5 V（1 kHz，正弦波），測定液晶分子的短軸方向的介電常數（ ϵ_{\perp} ）。

介電異向性的值是根據 $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 的式子計算出。

電壓保持率（VHR，於 25°C 下測定，%）

用於測定的 TN 元件具有聚醯亞胺配向膜，並且兩片玻璃基板的間隔（液晶單元間隙）為 6 μm 。該元件是在放入試料（液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物）後以藉由紫外線而聚合的接著劑加以密封。對該 TN 元件施加脈衝電壓（5 V，60 微秒）進行充電。利用高速電壓計每隔 16.7 毫秒來測定所衰減的電壓，求出單位週期中的電壓曲線與橫軸之間的面積 A。面積 B 是未衰減時的面積。電壓保持率是以面積 A 相對於面積 B 的百分率（%）表示。

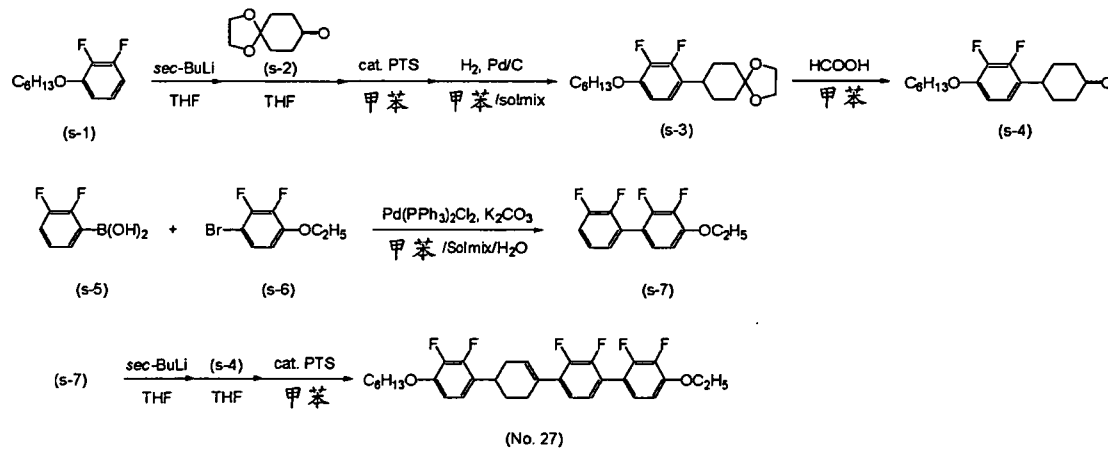
彈性常數（ K_{11} 、 K_{33} ，於 25°C 下測定）

測定時使用 Toyo Technica 股份有限公司製造的 EC-1 型彈性常數測定器。在兩片玻璃基板的間隔（液晶單元間隙）為 20 μm 的垂直配向液晶單元中放入試料。對該液晶單元施加 20 伏特至 0 伏特的電荷，測定靜電容量及施加電壓。使用『液晶裝置手冊』（日刊工業新聞公司）第 75 頁的式（2.98）、式（2.101），將所測定的靜電容量（C）與

施加電壓 (V) 的值進行擬合，並由式 (2.100) 獲得彈性常數的值。

[實例 1]

4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己-1-烯基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.27) 的合成



第 1 步驟

向氮氣環境下的反應器中加入 100.0 g 的 1,2-二氟-3-己氧基苯 (**s-1**) 及 1000 ml 的四氫呋喃 (tetrahydrofuran, THF)，冷卻至 -74°C。於 -74°C 至 -70°C 的溫度範圍，向其中滴加 1.00 M 第二丁基鋰、正己烷、環己烷溶液 357 ml，進而攪拌 2 小時。接著，於 -75°C 至 -70°C 的溫度範圍滴加含有 72.9 g 的 1,4-二氧雜螺[4.5]癸烷-8-酮 (**s-2**) 的 THF 的 500 ml 溶液，一邊恢復至 25°C，一邊攪拌 8 小時。將所得的反應混合物添加於加入有 1000 ml 的氯化銨水溶液及

1000 ml 的乙酸乙酯的容器中並混合，然後靜置，使其分離為有機層與水層而進行萃取操作。分取所得的有機層，以水、飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，在減壓下蒸餾去除溶劑。接著，於其中混合 4.5 g 的對甲苯磺酸及 300 ml 的甲苯，一邊將該混合物去除所餾出的水，一邊使其加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C，然後向所得的溶液中添加 500 ml 的水及 900 ml 的甲苯並混合後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。接著以甲苯作為展開溶劑，將所得溶液以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。然後使其溶解於 250 ml 的甲苯與 250 ml 的 Solmix A-11 的混合溶劑中，進而添加 0.5 g 的 Pd/C，於氫氣環境下，在室溫下攪拌至不再吸收氫氣為止。反應完畢後，去除 Pd/C，進而蒸餾去除溶劑，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，進而藉由自庚烷中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 144.5 g 的 8-(2,3-二氟-4-己氧基苯基)-1,4-二氧雜螺[4.5]癸烷 (s-3)。來自化合物 (s-1) 的產率為 87.3%。

第 2 步驟

將 144.5 g 的化合物 (s-3)、188.0 ml 的 87% 甲酸、以及 400 ml 的甲苯混合，使該混合物加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C，然後向所得的溶液中添加 500 ml

的水及 1000 ml 的甲苯並混合後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水、飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，進而藉由自庚烷中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 1-(2,3-二氟-4-乙氧基苯基)-環己烷-4-酮 (s-4) 123.0 g。來自化合物 (s-3) 的產率為 97.2%。

第 3 步驟

於氮氣環境下，向反應器中添加 45.2 g 的 4-溴-2,3-二氟乙氧基苯 (s-5)、36.1 g 的 2,3-二氟苯基硼酸 (s-6)、79.1 g 的碳酸鉀、4.0 g 的 $\text{Pd}(\text{Ph}_3\text{P})_2\text{Cl}_2$ 、200 ml 的甲苯、200 ml 的 Solmix A-11 以及 200 ml 的水，使其加熱回流 2 小時。將反應液冷卻至 25°C 後，注入至 200 ml 的水及 200 ml 的甲苯中，並混合。然後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯與庚烷的混合溶劑（體積比為甲苯：庚烷=2：1）作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而，藉由自 Solmix A-11 中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 40.1 g 的 4-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯 (s-7)。來自化合物 (s-5) 的產率為 77.8%。

第 4 步驟

向氮氣環境下的反應器中加入 10.0 g 的化合物 (s-7) 及 200 ml 的 THF，冷卻至 -74°C 。於 -74°C 至 -70°C 的溫度範圍，向其中滴加 1.00 M 的第二丁基鋰、正己烷、環己烷溶液 44 ml，進而攪拌 2 小時。接著，於 -75°C 至 -70°C 的溫度範圍，滴加含有 11.5 g 化合物 (s-4) 的 THF 的 100 ml 溶液，一邊恢復至 25°C 一邊攪拌 8 小時。將所得的反應混合物添加於加入有 300 ml 的氯化銨水溶液及 300 ml 的乙酸乙酯的容器中並混合，然後靜置，使其分離為有機層及水層而進行萃取操作。分取所得的有機層，以水、飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，在減壓下蒸餾去除溶劑。接著，於其中混合 0.67 g 的對甲苯磺酸及 300 ml 的甲苯，一邊將該混合物去除所餾出的水，一邊使其加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C ，然後向所得的溶液中添加 300 ml 的水及 500 ml 的甲苯並混合後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。接著以甲苯作為展開溶劑，將所得溶液以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而，藉由自乙酸乙酯與 Solmix A-11 的混合溶劑 (體積比為乙酸乙酯 : Solmix A-11 = 2:1) 中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 16.3 g 的 4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己-1-烯基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.27)。來自化合物 (s-7) 的產率為

79.5%。

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己-1-烯基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.27)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.07 (m, 3H), 6.91 (t, 1H), 6.81 (t, 1H), 6.71 (t, 1H), 6.12 (m, 1H), 4.17 (q, 2H), 4.02 (q, 2H), 3.22 (m, 1H), 2.70-2.59 (m, 1H), 2.59-2.44 (m, 2H), 2.38-2.30 (m, 1H), 2.08-2.01 (m, 1H), 2.01-1.91 (m, 1H), 1.81 (quin, 2H), 1.51-1.43 (m, 5H), 1.34 (m, 4H), 0.91 (t, 3H).

轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.27) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 103.9 N 207.7 I

$T_{\text{NI}} = 169.3^\circ\text{C}$ ， $\Delta\epsilon = -10.55$ ， $\Delta n = 0.205$ 。

[實例 2]

4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.7) 的合成



第 1 步驟

於 150 ml 的甲苯、150 ml 的 Solmix A-11 的混合溶劑中溶解 14.4 g 的化合物 (No.27)，進而添加 1.44 g 的雷氏鎳 (Raney nickel)，於氫氣環境下，在室溫下攪拌至不再吸收氫氣為止。反應完畢後，去除雷氏鎳，進而蒸餾去除溶劑，接著以庚烷與甲苯的混合溶劑 (體積比為庚烷：甲苯=1：2) 作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，進而將所得的殘渣藉由自乙酸乙酯與 Solmix A-11 的混合溶劑 (體積比為乙酸乙酯：Solmix=1：2) 中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 6.1 g 的 4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.7)。來自化合物 (No.27) 的產率為 42.3%。

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.7)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.11-7.02 (m, 3H), 6.90 (td, 1H), 6.81 (td, 2H), 6.70 (td, 1H), 6.78 (td, 1H), 4.16 (q, 2H), 4.02 (t, 2H), 3.02 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 2.03 (m, 4H), 1.82 (quin, 2H), 1.77-1.62 (m, 4H), 1.51-1.43 (m, 5H), 1.38-1.31 (m, 4H), 0.91 (t, 3H).

轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、

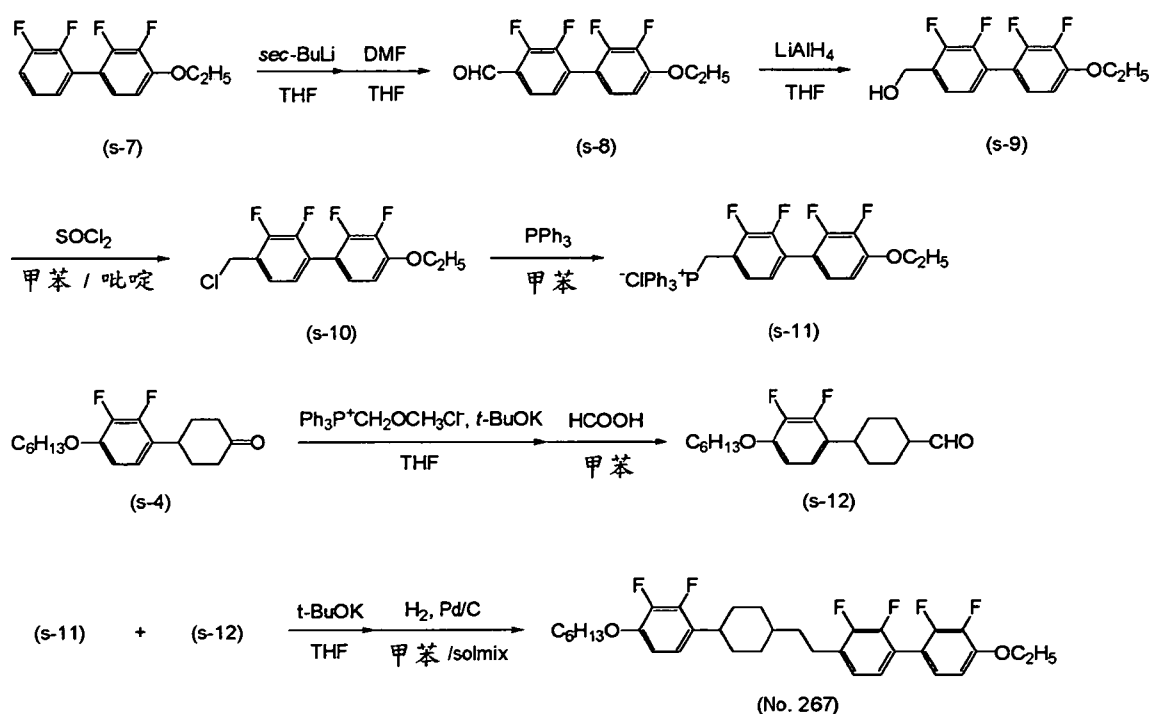
介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.7) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 116.4 N 239.0 I

$T_{NI} = 175.6^\circ\text{C}$ ， $\Delta\epsilon = -7.95$ ， $\Delta n = 0.180$ 。

[實例 3]

4-(2-(反式-4-(2,3-二氟-4-(乙氧基)苯基)環己基)乙基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.267) 的合成



第 1 步驟

向氮氣環境下的反應器中加入 28.0 g 的 4-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯 (s-7) 及 500 ml 的 THF，冷卻至

-74°C。於-74°C至-70°C的溫度範圍，向其中滴加 1.00 M 的第二丁基鋰、正己烷、環己烷溶液 109 ml，進而攪拌 2 小時。接著，於-75°C至-70°C的溫度範圍滴加含有 8.0 g 的 N,N-二甲基甲醯胺的 THF 的 200 ml 溶液，一邊恢復至 25°C 一邊攪拌 8 小時。將所得的反應混合物添加於加入有 300 ml 的 1 N HCl 水溶液及 300 ml 的乙酸乙酯的容器中並混合，然後靜置，使其分離為有機層及水層而進行萃取操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。接著以甲苯作為展開溶劑，將所得溶液以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而，藉由自 THF 與庚烷的混合溶劑（體積比為 THF：庚烷=1：5）中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 28.0 g 的 4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯-4-甲醛 (s-8)。來自化合物 (s-7) 的產率為 90.6%。

第 2 步驟

使 0.76 g 的氫化鋰鋁懸浮於 100 ml 的 THF 中。於-20°C 至-10°C 的溫度範圍，向該懸浮液中滴加 10.0 g 的化合物 (s-8)，進而於該溫度範圍攪拌 2 小時。藉由 GC 分析而確認反應完畢後，於冰浴冷卻下，向反應混合物中依序添加乙酸乙酯、飽和氨水溶液，藉由矽藻土過濾而去除析出物。然後利用乙酸乙酯萃取濾液。將所得的有機層以水、飽和食鹽水依序清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。進而藉由自庚烷中的再結晶而純化，使其乾燥並於減壓下濃縮，從而獲得 9.9 g 的(4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯-4-基)甲醇

(s-9)。來自化合物 (s-8) 的產率為 98.3%。

第 3 步驟

於氮氣環境下，向反應器中添加 9.9 g 的化合物 (s-9)、100 ml 的甲苯及 0.1 ml 的吡啶，於 45°C 下攪拌 1 小時。然後，於 45°C 至 55°C 的溫度範圍添加 2.9 ml 的亞硫酸氯，使其加熱回流 2 小時。將反應液冷卻至 25°C 後，注入至 200 ml 的水及 200 ml 的甲苯中，並混合。然後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水清洗 2 次，以水清洗 3 次，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯與庚烷的混合溶劑（體積比為甲苯：庚烷=1：1）作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而藉由自 Solmix A-11 中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 8.6 g 的 4-氯甲基-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯 (s-10)。來自化合物 (s-9) 的產率為 81.6%。

第 4 步驟

於氮氣環境下，向反應器中添加 8.6 g 的化合物 (s-10)、100 ml 的甲苯及 14.2 g 的三苯基磷，使其加熱回流 1 小時。將反應液冷卻至 25°C 後，過濾析出物，將未反應的原料以甲苯沖洗 3 次後，使所得的白色固體乾燥而獲得 11.8 g 的((4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯-4-基)甲基)三苯基氯化磷(s-11)。來自化合物(s-10)的產率為 75.3%。

第 5 步驟

於氮氣環境下，將 39.8 g 經充分乾燥的甲氧基甲基三苯基氯化磷與 500 ml 的 THF 混合，冷卻至 -30°C 。然後，於 $-30^{\circ}\text{C} \sim -20^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍，將 13.0 g 的第三丁醇鉀 (t-BuOK) 分 2 次投入。於 -20°C 下攪拌 30 分鐘後，於 $-30^{\circ}\text{C} \sim -20^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍滴加溶解於 100 ml 的 THF 中的化合物 (s-4) 30 g。於 -10°C 下攪拌 30 分鐘後，將反應液注入至 200 ml 的水與 200 ml 的甲苯的混合液中並混合，然後靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。將所得的溶離液於減壓下濃縮，獲得 2,3-二氟-1-(己氧基)-4-(4-(甲氧基亞甲基)環己基)苯。然後，將 38.9 g 的 87% 甲酸及 200 ml 的甲苯混合，使該混合物加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C ，然後向所得的溶液中添加 100 ml 的水及 200 ml 的甲苯並混合後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水、飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，獲得淡黃色固體。將該殘渣溶解於 100 ml 的甲苯中，添加於冷卻至 7°C 的 0.5 g 的 95% 氫氧化鈉與 400 ml 的甲醇的混合液中，於 10°C 下攪拌 2 小時。然後，添加 200 ml 的 2 N 氫氧化鈉水溶液，於 5°C 下攪拌 2 小時。將所得的反應液注入至 500 ml 的水及 500

ml 的甲苯的混合液中並混合，然後靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，將所得的殘渣濃縮，以甲苯作為展開溶劑，且以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，使其乾燥而獲得 28.8 g 的反式-4-(2,3-二氟苯基-4-己氧基)-環己烷甲醛 (s-12)。來自化合物 (s-4) 的產率為 81.6%。

第 6 步驟

於氮氣環境下，將 5.0 g 經充分乾燥的((4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯-4-基)甲基)三苯基氯化磷 (s-11) 與 100 ml 的 THF 混合，冷卻至 -10°C 。然後，於 $-10^{\circ}\text{C} \sim -5^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍，將 0.97 g 的第三丁醇鉀 (t-BuOK) 分 2 次投入。於 -10°C 下攪拌 60 分鐘後，於 $-10^{\circ}\text{C} \sim -5^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍滴加溶解於 30 ml 的 THF 中的化合物 (s-12) 2.3 g。於 0°C 下攪拌 30 分鐘後，將反應液注入至 100 ml 的水與 50 ml 的甲苯的混合液中並混合，然後靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，將溶離液於減壓下濃縮。然後使其溶解於 150 ml 的甲苯與 150 ml 的 Solmix A-11 的混合溶劑中，進而添加 0.1 g 的 Pd/C，於氮氣環境下，在室溫下攪拌至不

再吸收氫氣為止。反應完畢後，去除 Pd/C，進而蒸餾去除溶劑，將所得的殘渣藉由自乙酸乙酯與 Solmix A-11 的混合溶劑（體積比為乙酸乙酯：Solmix=1：4）中的再結晶而純化，獲得 1.4 g 的 4-(2-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)乙基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.267)。來自化合物 (s-12) 的產率為 34.0%。

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4-(2-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)乙基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.267)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 6.99 (m, 3H), 6.82 (m, 2H), 6.65 (t, 1H), 4.17 (q, 2H), 4.01 (t, 2H), 2.73 (m, 3H), 1.95 (m, 2H), 1.88 (m, 2H), 1.80 (quin, 2H), 1.60 (q, 2H), 1.52-1.42 (m, 7H), 1.42-1.30 (m, 5H), 1.21-1.12 (m, 2H), 0.91 (t, 3H).

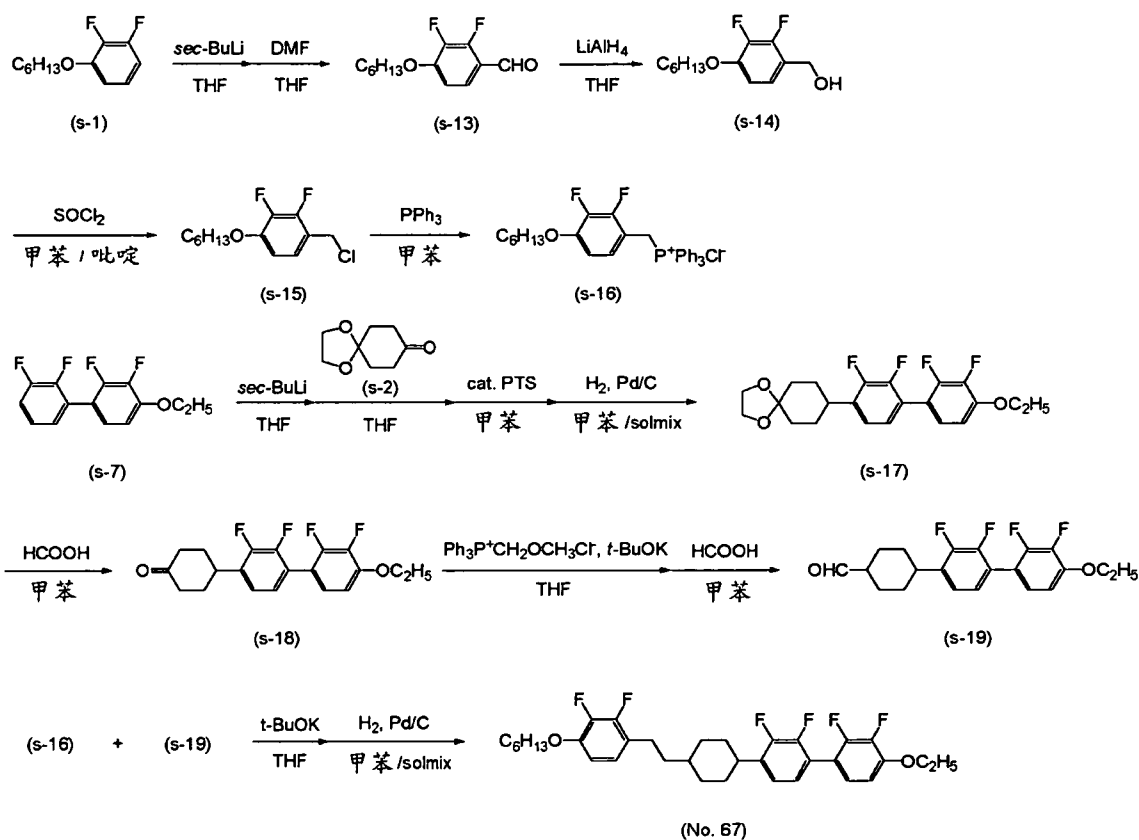
轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.267) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 109.8 N 184.6 I

$T_{\text{NI}}=165.6^\circ\text{C}$ ， $\Delta\epsilon=-8.17$ ， $\Delta n=0.149$ 。

[實例 4]

4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯乙基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.67) 的合成



第 1 步驟

向氮氣環境下的反應器中加入 28.0 g 的 2,3-二氟己氧基苯(s-1)及 500 ml 的 THF，冷卻至 -74°C 。於 -74°C 至 -70°C 的溫度範圍，向其中滴加 1.00 M 的第二丁基鋰、正己烷、環己烷溶液 109 ml，進而攪拌 2 小時。接著，於 -75°C 至 -70°C 的溫度範圍滴加含有 8.0 g 的 N,N-二甲基甲醯胺的 THF 的 200 ml 溶液，一邊恢復至 25°C 一邊攪拌 8 小時。將所得的反應混合物添加於加入有 300 ml 的 1 N HCl 水溶液及 300 ml 的乙酸乙酯的容器中並混合，然後靜置，使其分離為有機層及水層而進行萃取操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。接著以

甲苯作為展開溶劑，將所得溶液以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而，藉由自 THF 與庚烷的混合溶劑（體積比為 THF：庚烷=1：5）中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 28.0 g 的 2,3-二氟-4-己氧基苯甲醛（s-13）。來自化合物（s-1）的產率為 90.6%。

第 2 步驟

將 0.76 g 的氫化鋰鋁懸浮於 100 ml 的 THF 中。於 -20°C 至 -10°C 的溫度範圍，向該懸浮液中滴加 10.0 g 的化合物（s-13），進而於該溫度範圍攪拌 2 小時。藉由 GC 分析而確認反應完畢後，於冰浴冷卻下，向反應混合物中依序添加乙酸乙酯、飽和氨水溶液，藉由矽藻土過濾而去除析出物。然後利用乙酸乙酯萃取濾液。將所得的有機層以水、飽和食鹽水依序清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。進而藉由自庚烷中的再結晶而純化，使其乾燥並於減壓下濃縮，從而獲得 9.9 g 的(2,3-二氟-4-己氧基)苜基醇（s-14）。來自化合物（s-13）的產率為 98.3%。

第 3 步驟

於氮氣環境下，向反應器中添加 9.9 g 的化合物（s-14）、100 ml 的甲苯及 0.1 ml 的吡啶，於 45°C 下攪拌 1 小時。然後，於 45°C 至 55°C 的溫度範圍添加 2.9 ml 的亞硫醯氯，使其加熱回流 2 小時。將反應液冷卻至 25°C 後，注入至 200 ml 的水及 200 ml 的甲苯中，並混合。然後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水清洗

2 次，以水清洗 3 次，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯與庚烷的混合溶劑（體積比為甲苯：庚烷=1：1）作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而藉由自 Solmix A-11 中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 8.6 g 的(4-氯甲基-2,3-二氟)己氧基苯 (s-15)。來自化合物 (s-14) 的產率為 81.6%。

第 4 步驟

於氮氣環境下，向反應器中添加 8.6 g 的化合物 (s-15)、100 ml 的甲苯及 14.2 g 的三苯基磷，使其加熱回流 1 小時。將反應液冷卻至 25°C 後，過濾析出物，將未反應的原料以甲苯沖洗 3 次後，使所得的白色固體乾燥而獲得 11.8 g 的(2,3-二氟-4-己氧基苄基)三苯基氯化磷 (s-16)。來自化合物 (s-15) 的產率為 75.3%。

第 5 步驟

向氮氣環境下的反應器中加入 8.0 g 的 4-乙氧基-2,2',3,3'-四氟-1,1'-聯苯 (s-7) 及 100 ml 的 THF，冷卻至 -74°C。於 -74°C 至 -70°C 的溫度範圍，向其中滴加 1.00 M 的第二丁基鋰、正己烷、環己烷溶液 31 ml，進而攪拌 2 小時。接著，於 -75°C 至 -70°C 的溫度範圍滴加含有 4.9 g 的 1,4-二氧雜螺[4.5]癸烷-8-酮 (s-2) 的 THF 的 50 ml 溶液，一邊恢復至 25°C 一邊攪拌 8 小時。將所得的反應混合物添加於加入有 100 ml 的 1 N HCl 水溶液及 100 ml 的乙酸乙酯的容器中並混合，然後靜置，使其分離為有機層及水層而

進行萃取操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，在減壓下蒸餾去除溶劑。接著，於其中混合 0.27 g 的對甲苯磺酸及 100 ml 的甲苯，一邊將該混合物去除所餾出的水，一邊使其加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C，然後向所得的溶液中添加 200 ml 的水及 100 ml 的甲苯並混合後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。接著以甲苯作為展開溶劑，將所得溶液以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。然後使其溶解於 100 ml 的甲苯與 100 ml 的 Solmix A-11 的混合溶劑中，進而添加 0.1 g 的 Pd/C，於氫氣環境下，在室溫下攪拌至不再吸收氫氣為止。反應完畢後，去除 Pd/C，進而蒸餾去除溶劑，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，進而藉由自庚烷中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 6.5 g 的 8-(4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯-4-基)-1,4-二氧雜螺[4.5]癸烷 (s-17)。來自化合物 (7) 的產率為 53.2%。

第 6 步驟

將 6.5 g 的化合物 (s-17)、7.3 ml 的 87% 甲酸及 100 ml 的甲苯混合，使該混合物加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C，然後向所得的溶液中添加 100 ml 的水與 100 ml 的甲苯並混合，然後靜置而使其分離為有機層及水層此

兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水、飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，進而藉由自庚烷中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 5.8 g 的 4-(4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯-4-基)環己酮 (s-18)。來自化合物 (s-17) 的產率為 99.5%。

第 7 步驟

於氮氣環境下，將 6.5 g 經充分乾燥的甲氧基甲基三苯基氯化磷與 100 ml 的 THF 混合，冷卻至 -30°C 。然後，於 $-30^{\circ}\text{C} \sim -20^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍投入 2.1 g 的第三丁醇鉀 (t-BuOK)。於 -20°C 下攪拌 30 分鐘後，於 $-30^{\circ}\text{C} \sim -20^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍滴加溶解於 50 ml 的 THF 中的化合物 (s-18) 5.8 g。於 -10°C 下攪拌 30 分鐘後，將反應液注入至 200 ml 的水與 200 ml 的甲苯的混合液中並混合，然後靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。將所得的溶離液於減壓下濃縮。然後，將 38.9 g 的 87% 甲酸及 200 ml 的甲苯混合，使該混合物加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C ，然後向所得的溶液中添加 100 ml 的水及 200 ml 的甲苯並混合

後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水、飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，獲得淡黃色固體。接著將該殘渣溶解於 50 ml 的甲苯中，添加於經冷卻至 7°C 的 0.5 g 的 95% 氫氧化鈉與 200 ml 的甲醇的混合液中，於 10°C 下攪拌 2 小時。然後，添加 100 ml 的 2 N 氫氧化鈉水溶液，於 5°C 下攪拌 2 小時。將所得的反應液注入至 100 ml 的水與 100 ml 的甲苯的混合液中並混合，然後靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，將所得的殘渣濃縮，以甲苯為展開溶劑，且以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，使其乾燥而獲得 6.0 g 的反式-4-(4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯-4-基)環己烷甲醛 (s-19)。來自化合物 (s-18) 的產率為 96.1%。

第 8 步驟

於氮氣環境下，將 4.6 g 經充分乾燥的(2,3-二氟-4-己氧基苄基)三苯基氯化磷 (s-16) 與 100 ml 的 THF 混合，冷卻至 -10°C。然後，於 -10°C ~ -5°C 的溫度範圍投入 1.0 g 的第三丁醇鉀 (t-BuOK)。於 -10°C 下攪拌 60 分鐘後，於 -10°C ~ -5°C 的溫度範圍滴加溶解於 30 ml 的 THF 中的化合物 (s-19) 2.8 g。於 0°C 下攪拌 30 分鐘後，將反應液注入至 100 ml 的水與 100 ml 的甲苯的混合液中並混合，然後

靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，將溶離液於減壓下濃縮。然後使其溶解於 100 ml 的甲苯與 100 ml 的 Solmix A-11 的混合溶劑中，進而添加 0.1 g 的 Pd/C，於氫氣環境下，在室溫下攪拌至不再吸收氫氣為止。反應完畢後，去除 Pd/C，進而蒸餾去除溶劑，將所得的殘渣藉由自乙酸乙酯與 Solmix A-11 的混合溶劑（體積比為乙酸乙酯：Solmix = 1：4）中的再結晶而純化，獲得 1.9 g 的反式-4-(4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯乙基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.67)。來自化合物 (s-19) 的產率為 42.4%。

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為反式-4-(4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯乙基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.67)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.05 (m, 3H), 6.82 (m, 2H), 6.68 (t, 1H), 4.18 (q, 2H), 4.03 (t, 2H), 2.91 (m, 1H), 2.66 (t, 2H), 1.96 (m, 4H), 1.82 (quin, 2H), 1.58-1.43 (m, 9H), 1.36 (m, 5H), 1.24-1.14 (m, 2H), 0.92 (t, 3H).

轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進

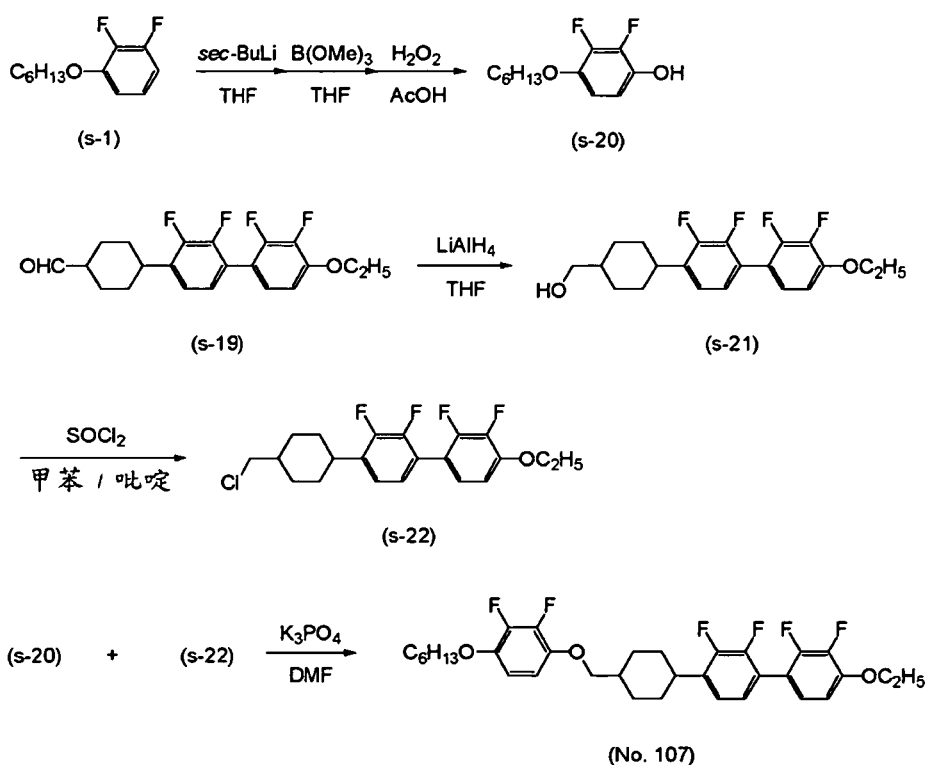
行換算而得的外推值，化合物 (No.67) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 78.9 N 192.2 I

$T_{NI} = 165.9^{\circ}\text{C}$ ， $\Delta\varepsilon = -9.87$ ， $\Delta n = 0.175$ 。

[實例 5]

反式-4-(4-((2,3-二氟-4-(己氧基)苯氧基)甲基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.107) 的合成



第 1 步驟

向氮氣環境下的反應器中加入 17.8 g 的 1,2-二氟-3-己氧基苯 (s-1) 及 500 ml 的 THF，冷卻至 -74°C 。於 -74°C 至 -70°C 的溫度範圍，向其中滴加 1.57 M 的正丁基鋰，正己

烷、環己烷溶液 58.0 ml，進而攪拌 2 小時。接著，於 -74°C 至 -65°C 的溫度範圍，滴加於 9.5 g 硼酸三甲酯的 THF 的 50 ml 溶液中，一邊恢復至 25°C ，一邊進而攪拌 8 小時。然後，將反應混合物注入至加入有 100 ml 的 1 N 鹽酸的冰水 500 ml 的容器中，並混合。添加 300 ml 的乙酸乙酯，分離為有機層及水層而進行萃取操作。分取所得的有機層，以水、飽和碳酸氫鈉水溶液、食鹽水依序清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，在減壓下蒸餾去除溶劑。將其與 100 ml 的乙酸一起添加於氮氣環境下的反應器中，於室溫下，於 25°C 至 30°C 的溫度範圍滴加 10.1 ml 的 31% 過氧化氫水，進而攪拌 2 小時。然後，將反應混合物注入至加入有 100 ml 的亞硫酸氫鈉水溶液、300 ml 的乙酸乙酯的容器中，並混合。然後，靜置而使其分離為有機層及水層，進行萃取操作。分取所得的有機層，以水、食鹽水依序清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，獲得 12.8 g 的 1,2-二氟-3-己氧基苯酚 (s-20)。來自化合物 (s-1) 的產率為 66.6%。

第 2 步驟

將 0.20 g 的氫化鋰鋁懸浮於 100 ml 的 THF 中。於 -20°C 至 -10°C 的溫度範圍，向該懸浮液中滴加 3.0 g 的化合物 (s-19)，進而於該溫度範圍下攪拌 2 小時。藉由 GC 分析而確認反應完畢後，於冰浴冷卻下，向反應混合物中依序添加乙酸乙酯、飽和氫水溶液，藉由矽藻土過濾而去除析出物。然後利用乙酸乙酯萃取濾液。將所得的有機層以水、

飽和食鹽水依序清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。進而藉由自庚烷中的再結晶而純化，使其乾燥並於減壓下濃縮，從而獲得 2.7 g 的(反式-4-(4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯-4-基)環己基)甲醇 (s-21)。來自化合物 (s-19) 的產率為 89.5%。

第 3 步驟

於氮氣環境下，向反應器中添加 2.7 g 的化合物 (s-21)、50 ml 的甲苯及 0.1 ml 的吡啶，於 45°C 下攪拌 1 小時。然後，於 45°C 至 55°C 的溫度範圍添加 0.56 ml 的亞硫酸氯，使其加熱回流 2 小時。將反應液冷卻至 25°C 後，注入至 100 ml 的水及 100 ml 的甲苯中，並混合。然後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水清洗 2 次，以水清洗 3 次，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯與庚烷的混合溶劑（體積比為甲苯：庚烷=1：1）作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而藉由自 Solmix A-11 中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 2.6 g 的(反式-4-(4-(氯甲基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (s-22)。來自化合物 (s-21) 的產率為 91.9%。

第 4 步驟

於氮氣環境下，向 100 ml 的 DMF 中添加 1.8 g 的 1,2-二氟-3-己氧基苯酚 (s-20)、及 13.8 g 的磷酸三鉀 (K_3PO_4)，於 80°C 下攪拌。向其中添加 2.6 g 的化合物 (s-22)，於 80°C

下攪拌 7 小時。將所得的反應混合物冷卻至 30°C，藉由過濾而與固形物分離後，添加 100 ml 的甲苯及 100 ml 的水並混合。然後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以食鹽水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然後，於減壓下蒸餾去除溶劑，接著以庚烷與甲苯的混合溶劑（體積比為庚烷：甲苯=1：2）作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而藉由自 Solmix A-11 與庚烷的混合溶劑（體積比為 Solmix A-11：庚烷=1：2）中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 1.2 g 的反式-4-(4-((2,3-二氟-4-(己氧基)苯氧基)甲基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯（No.107）。來自化合物（s-22）的產率為 31.1%。

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為反式-4-(4-((2,3-二氟-4-(己氧基)苯氧基)甲基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯（No.107）。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.05 (m, 3H), 6.81 (t, 1H), 6.63 (d, 2H), 4.17 (q, 2H), 3.98 (t, 2H), 3.84 (d, 2H), 2.93 (m, 1H), 2.07 (m, 2H), 1.99 (m, 2H), 1.92 (m, 1H), 1.79 (quin, 2H), 1.64-1.42 (m, 7H), 1.38-1.24 (m, 6H), 0.91 (t, 3H).

轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進

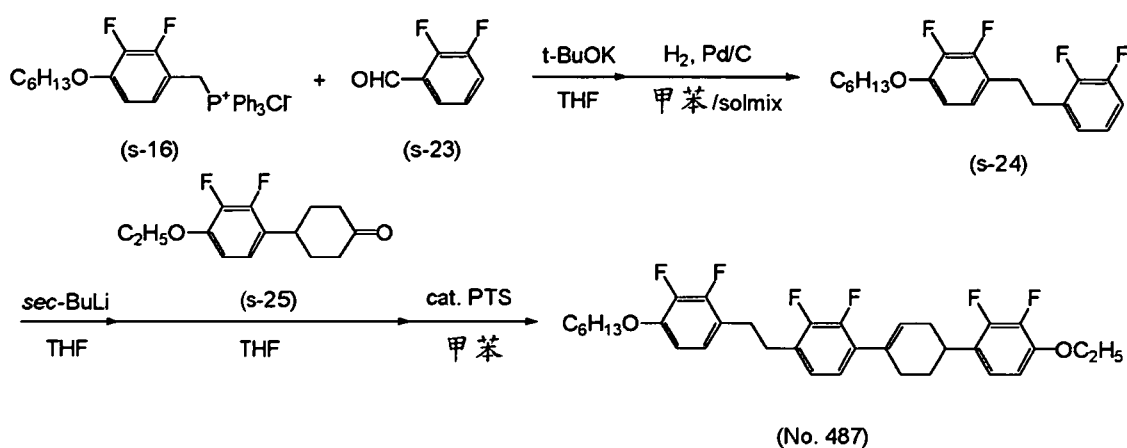
行換算而得的外推值，化合物 (No.107) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 89.3 N 185.2 I

$T_{NI} = 165.6^{\circ}\text{C}$ ， $\Delta\varepsilon = -9.26$ ， $\Delta n = 0.179$ 。

[實例 6]

1-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯乙基)-4-(4-(4-乙氧基-2,3-二氟苯基)環己基-1-烯基)-2,3-二氟苯 (No.487) 的合成



第 1 步驟

於氮氣環境下，將 7.5 g 經充分乾燥的(2,3-二氟-4-己氧基苄基)三苯基氯化鎘 (s-16) 與 100 ml 的 THF 混合，冷卻至 -10°C 。然後，於 $-10^{\circ}\text{C} \sim -5^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍投入 1.6 g 的第三丁醇鉀 ($t\text{-BuOK}$)。於 -10°C 下攪拌 60 分鐘後，於 $-10^{\circ}\text{C} \sim -5^{\circ}\text{C}$ 的溫度範圍滴加溶解於 30 ml 的 THF 中的 2,3-二氟苯甲醛 (s-23) 1.9 g。於 0°C 下攪拌 30 分鐘後，將反應液注入 100 ml 的水與 100 ml 的甲苯的混合液中並混合，然後靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃

取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。將所得的溶液於減壓下濃縮，接著以甲苯作為展開溶劑，將所得的殘渣以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化，將溶離液於減壓下濃縮。然後使其溶解於 100 ml 的甲苯與 100 ml 的 Solmix A-11 的混合溶劑中，進而添加 0.1 g 的 Pd/C，於氫氣環境下，在室溫下攪拌至不再吸收氫氣為止。反應完畢後，去除 Pd/C，進而蒸餾去除溶劑，將所得的殘渣藉由自乙酸乙酯與 Solmix A-11 的混合溶劑（體積比為乙酸乙酯：Solmix = 1：4）中的再結晶而純化，獲得 3.6 g 的 1-(2,3-二氟苯乙基)-2,3-二氟-4-(己氧基)苯 (s-24)。來自化合物 (s-23) 的產率為 76.0%。

第 2 步驟

向氫氣環境下的反應器中加入 3.6 g 的 1-(2,3-二氟苯乙基)-2,3-二氟-4-(己氧基)苯 (s-24) 及 100 ml 的 THF，冷卻至 -74°C 。於 -74°C 至 -70°C 的溫度範圍，向其中滴加 1.00 M 的第二丁基鋰、正己烷、環己烷溶液 12 ml，進而攪拌 2 小時。接著，於 -75°C 至 -70°C 的溫度範圍，滴加含有 2.6 g 的 1-(2,3-二氟-4-乙氧基苯基)-環己烷-4-酮 (s-25) 的 THF 的 50 ml 溶液，一邊恢復至 25°C 一邊攪拌 8 小時。將所得的反應混合物添加於加入有 100 ml 的 1 N HCl 水溶液及 100 ml 的乙酸乙酯的容器中並混合，然後靜置，使其分離為有機層及水層而進行萃取操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。然

後，在減壓下蒸餾去除溶劑。接著，於其中混合 0.19 g 的對甲苯磺酸及 100 ml 的甲苯，一邊將該混合物去除所餾出的水，一邊使其加熱回流 2 小時。將反應混合物冷卻至 30°C，然後向所得的溶液中添加 200 ml 的水與 100 ml 的甲苯並混合後，靜置而使其分離為有機層及水層此兩層，進行萃取至有機層中的操作。分取所得的有機層，以飽和碳酸氫鈉水及水加以清洗，再以無水硫酸鎂乾燥。接著以甲苯作為展開溶劑，將所得溶液以使用二氧化矽凝膠作為填充劑的管柱層析法的分取操作加以純化。進而藉由自 Solmix A-11 與庚烷的混合溶劑（體積比為 Solmix A-11：庚烷=1：2）中的再結晶而純化，使其乾燥而獲得 3.1 g 的 1-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯乙基)-4-(4-(4-乙氧基-2,3-二氟苯基)環己基-1-烯基)-2,3-二氟苯（No.487）。來自化合物（s-24）的產率為 33.8%。

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 1-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯乙基)-4-(4-(4-乙氧基-2,3-二氟苯基)環己基-1-烯基)-2,3-二氟苯（No.487）。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 6.90 (t, 2H), 6.81 (t, 1H), 6.76 (t, 1H), 6.70 (t, 1H), 6.63 (td, 1H), 6.03 (m, 1H), 4.11 (q, 2H), 4.00 (t, 2H), 3.19 (m, 1H), 2.91 (m, 4H), 2.65-2.39 (m, 3H), 2.35-2.26 (m, 1H), 2.04-1.98 (m, 1H), 1.98-1.88 (m, 1H), 1.80 (quin, 2H), 1.45 (m, 5H), 1.34 (m, 4H), 0.91 (t, 3H).

轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、

介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.487) 的物性值為如下所述。

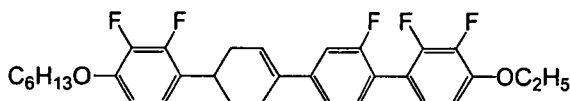
轉移溫度：C 81.8 N 148.1 I

$T_{NI}=133.9^{\circ}\text{C}$ ， $\Delta\epsilon=-9.04$ ， $\Delta n=0.174$ 。

[實例 7]

利用實例 1~6 所示的方法，使用相對應的起始原料來合成各種化合物，並確認其為目標化合物。

4'-(4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基-1-烯基)-4-乙氧基-2,2',3-三氟聯苯 (No.33)



(No.33)

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4'-(4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基-1-烯基)-4-乙氧基-2,2',3-三氟聯苯 (No.33)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.31 (t, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.20 (d, 1H), 7.06 (td, 1H), 6.90 (td, 1H), 6.80 (td, 1H), 6.70 (td, 1H), 6.29 (m, 1H), 4.17 (q, 2H), 4.02 (t, 2H), 3.18 (m, 1H), 2.66-2.50 (m, 3H), 2.38-2.29 (m, 1H), 2.12-2.04 (m, 1H), 1.99-1.90 (m, 1H), 1.81 (quin, 2H), 1.52-1.43 (m, 5H), 1.34

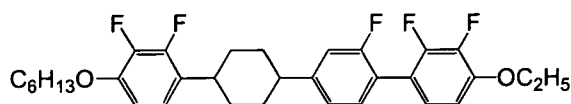
(m, 4H), 0.91 (t, 3H).

轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.33) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 108.9 S_A 136.2 N 214.2 I

$T_{NI} = 178.6^{\circ}\text{C}$ ， $\Delta\epsilon = -8.54$ ， $\Delta n = 0.219$ 。

4'-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4-乙氧基-2,2',3-三氟聯苯 (No.13)



(No.13)

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4'-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4-乙氧基-2,2',3-三氟聯苯 (No.13)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.30 (t, 1H), 7.09 (d, 1H), 7.03 (m, 2H), 6.89 (td, 1H), 6.80 (td, 1H), 6.70 (td, 1H), 4.16 (q, 2H), 4.02 (t, 2H), 2.88 (m, 1H), 2.64 (m, 1H), 2.10-1.96 (m, 4H), 1.81 (quin, 2H), 1.65 (m, 4H), 1.52-1.43 (m, 5H), 1.34 (m, 4H), 0.91 (t, 3H).

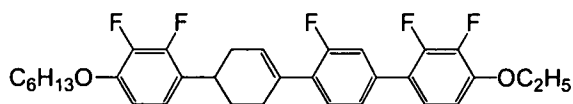
轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、

介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.13) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 101.4 S_A 121.4 N 232.7 I

$T_{NI} = 170.6^\circ\text{C}$ ， $\Delta\epsilon = -8.85$ ， $\Delta n = 0.201$ 。

4'-(4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基-1-烯基)-4-乙氧基-2,3,3'-三氟聯苯 (No.38)



(No.38)

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4'-(4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基-1-烯基)-4-乙氧基-2,3,3'-三氟聯苯 (No.38)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.32 (t, 1H), 7.25 (d, 2H), 7.21 (d, 1H), 7.11 (t, 1H), 6.91 (t, 1H), 6.80 (t, 1H), 6.70 (t, 1H), 6.08 (m, 1H), 4.16 (q, 2H), 4.02 (t, 2H), 3.20 (m, 1H), 2.64 (m, 1H), 2.51 (m, 2H), 2.33 (m, 1H), 2.06-1.91 (m, 2H), 1.81 (quin, 2H), 1.52-1.43 (m, 4H), 1.38-1.30 (m, 4H), 0.90 (m, 3H).

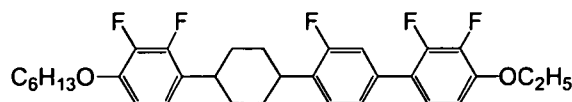
轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合

於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.38) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 106.3 N 218.6 I

$T_{NI} = 180.6^{\circ}\text{C}$ ， $\Delta\epsilon = -8.64$ ， $\Delta n = 0.226$ 。

4'-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4-乙氧基-2,3,3'-三氟聯苯 (No.18)



(No.18)

$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4'-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4-乙氧基-2,3,3'-三氟聯苯 (No.18)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.30 (t, 1H), 7.09 (d, 1H), 7.03 (m, 2H), 6.89 (td, 1H), 6.80 (td, 1H), 6.70 (td, 1H), 4.16 (q, 2H), 4.02 (t, 2H), 2.88 (m, 1H), 2.64 (m, 1H), 2.10-1.96 (m, 4H), 1.81 (quin, 2H), 1.65 (m, 4H), 1.52-1.43 (m, 5H), 1.34 (m, 4H), 0.91 (t, 3H).

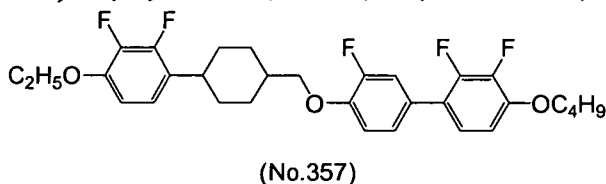
轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.18) 的物性值為如下所

述。

轉移溫度：C 121.0 N 247.2 I

$T_{NI}=189.6^{\circ}\text{C}$ ， $\Delta\epsilon=-7.31$ ， $\Delta n=0.193$ 。

4-丁氧基-4'-(反式-4-(4-乙氧基-2,3-二氟苯基)環己基甲氧基)-2,3,3'-三氟聯苯 (No.357)



$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4-丁氧基-4'-(反式-4-(4-乙氧基-2,3-二氟苯基)環己基甲氧基)-2,3,3'-三氟聯苯 (No.357)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.25 (d, 1H), 7.21 (d, 1H), 7.03 (m, 2H), 6.85 (td, 1H), 6.78 (td, 1H), 6.68 (td, 1H), 4.13-4.06 (m, 4H), 3.92 (d, 2H), 2.82 (tt, 1H), 2.07 (m, 2H), 1.95 (m, 2H), 1.83 (m, 2H), 1.58-1.48 (m, 5H), 1.44 (t, 3H), 1.34-1.23 (m, 2H), 1.00 (t, 3H).

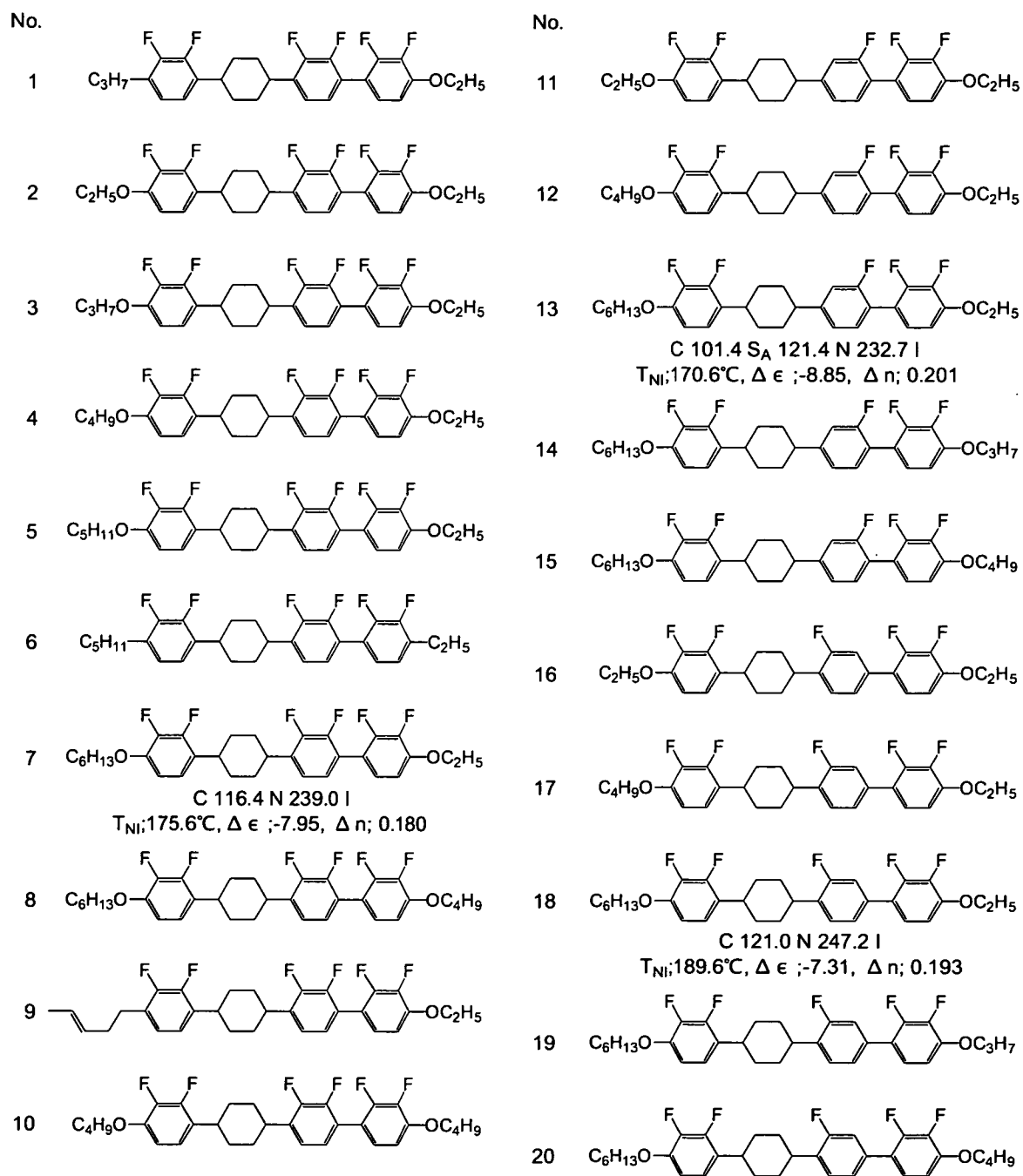
轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法進行換算而得的外推值，化合物 (No.357) 的物性值為如下所述。

轉移溫度：C 119.0 N 204.1 I

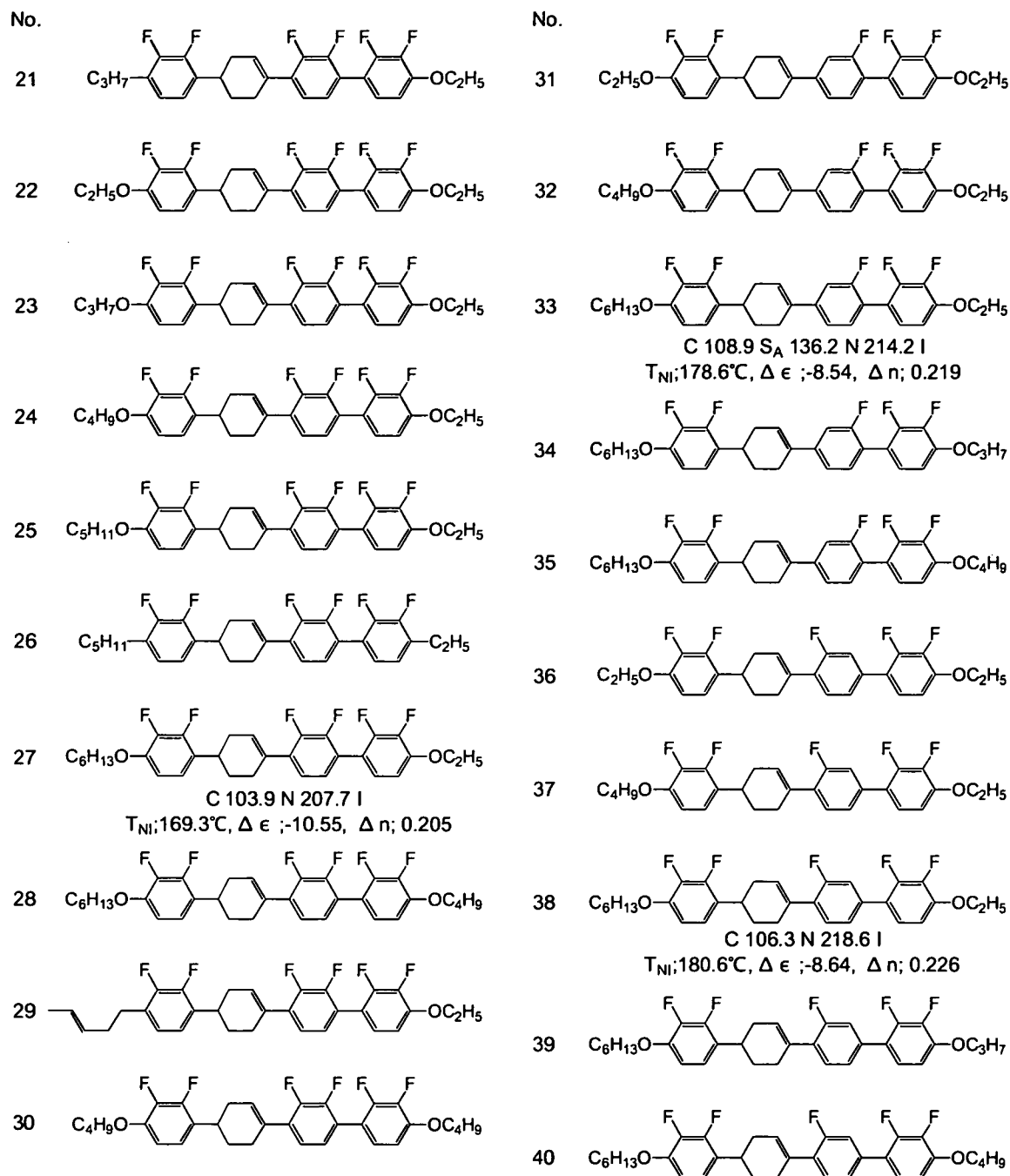
$T_{NI}=181.6^{\circ}\text{C}$ ， $\Delta\epsilon=-7.95$ ， $\Delta n=0.190$ 。

[實例 8]

可利用與實例 1~7 中記載的合成方法相同的方法，來合成以下所示的化合物 (No.1) ~ (No.700)。附記的資料是依據上述方法測定而得的值。轉移溫度為化合物自身的測定值，上限溫度 (T_{NI})、介電異向性 ($\Delta\varepsilon$) 及光學異向性 (Δn) 是將使化合物混合於母液晶 (i) 中而得的試料的測定值，依據上述外推法換算而得的外推值。



35527pif

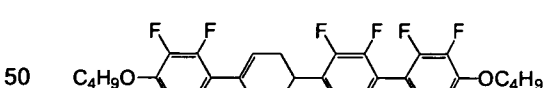
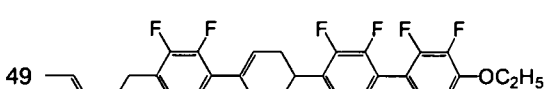
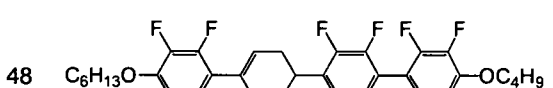
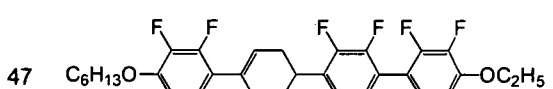
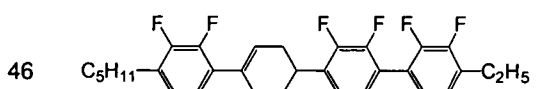
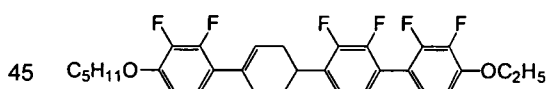
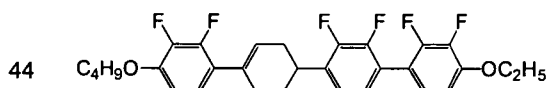
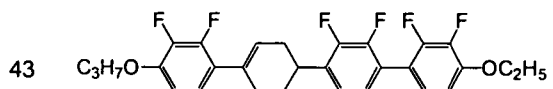
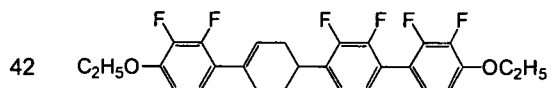
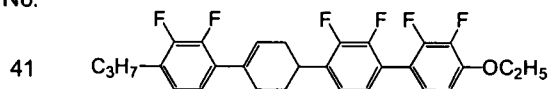


C 108.9 S_A 136.2 N 214.2 I
 T_{Ni}:178.6°C, Δε : -8.54, Δn: 0.219

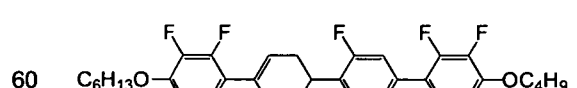
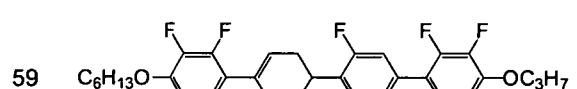
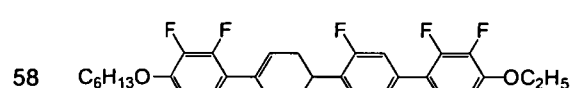
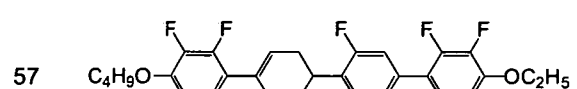
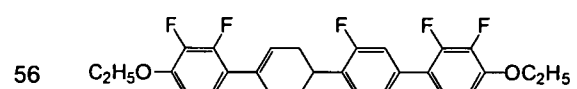
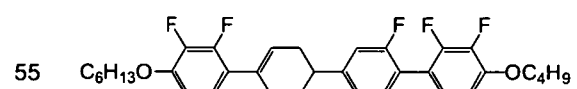
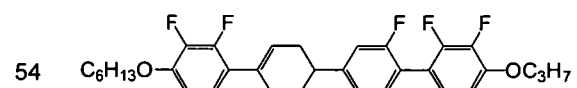
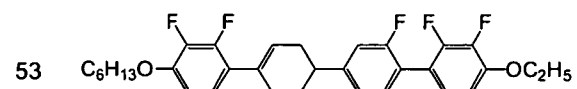
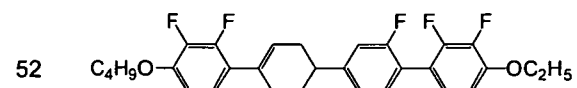
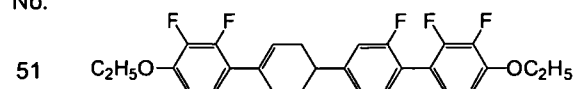
C 103.9 N 207.7 I
 T_{Ni}:169.3°C, Δε : -10.55, Δn: 0.205

C 106.3 N 218.6 I
 T_{Ni}:180.6°C, Δε : -8.64, Δn: 0.226

No.

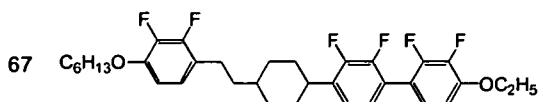
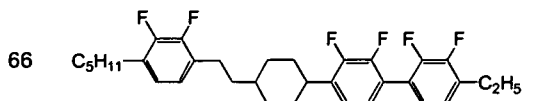
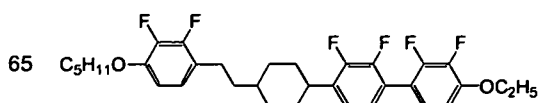
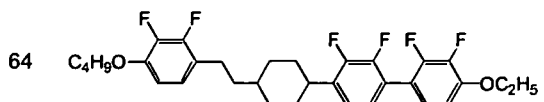
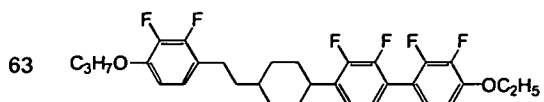
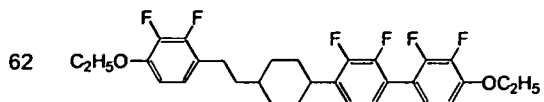
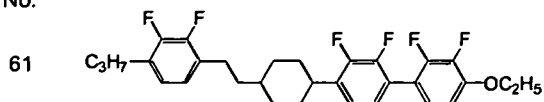


No.

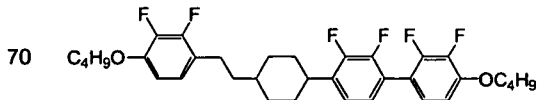
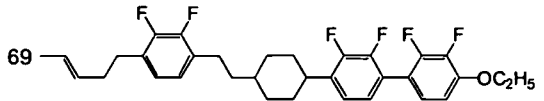
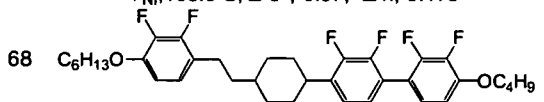


35527pif

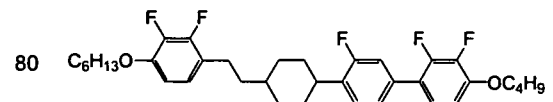
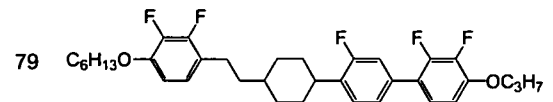
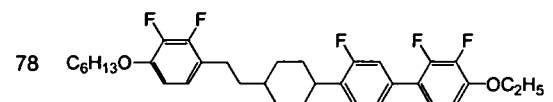
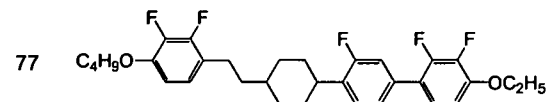
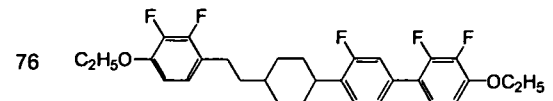
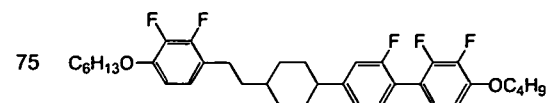
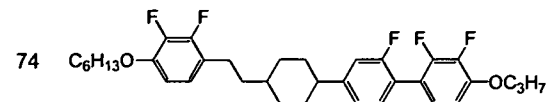
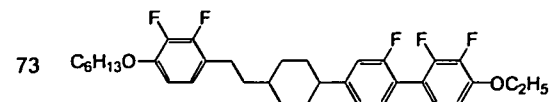
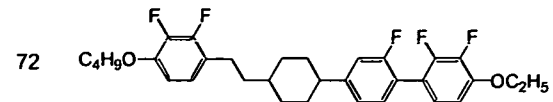
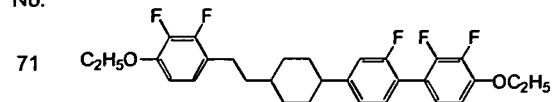
No.

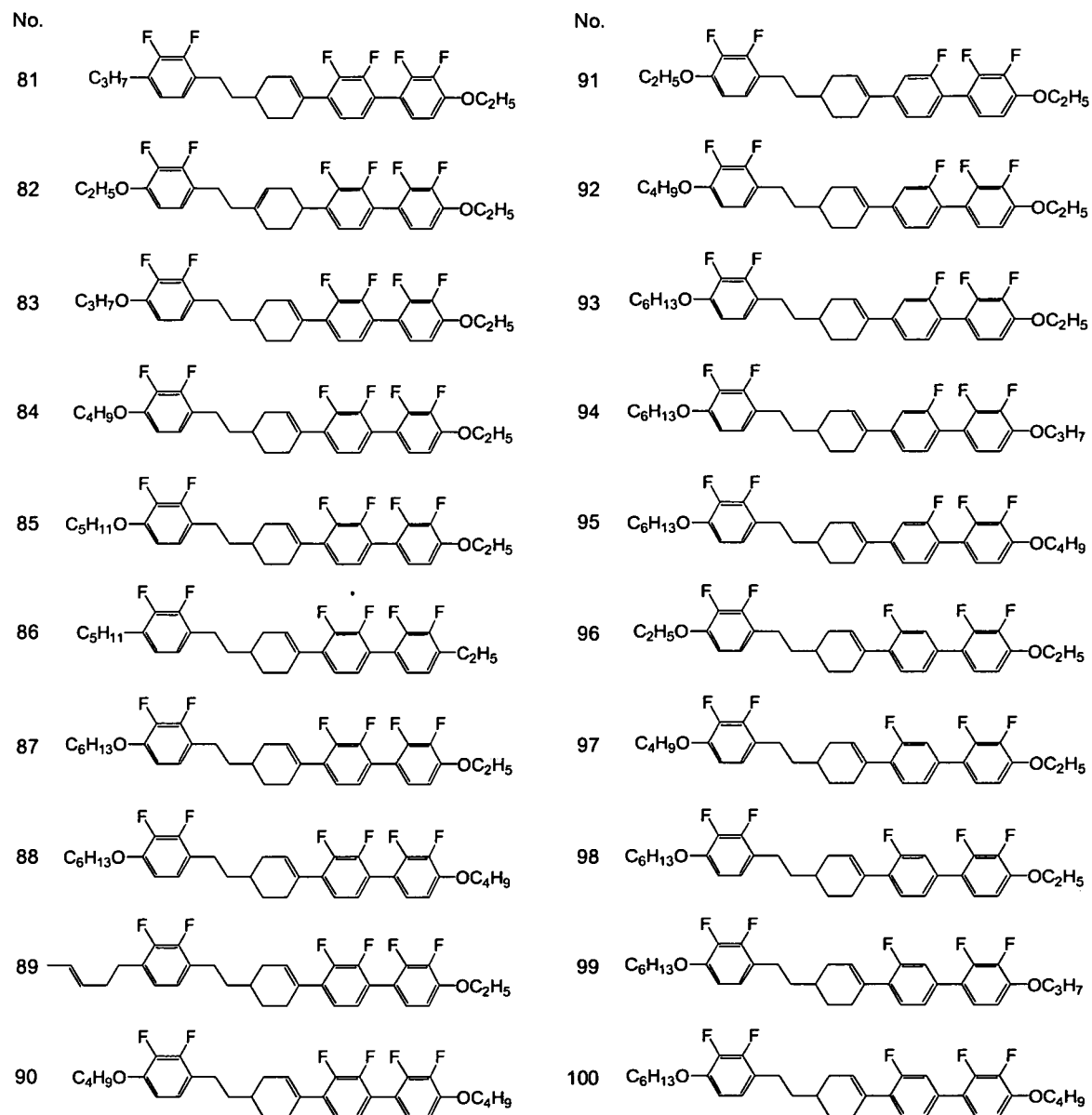


C 78.9 N 192.2 I

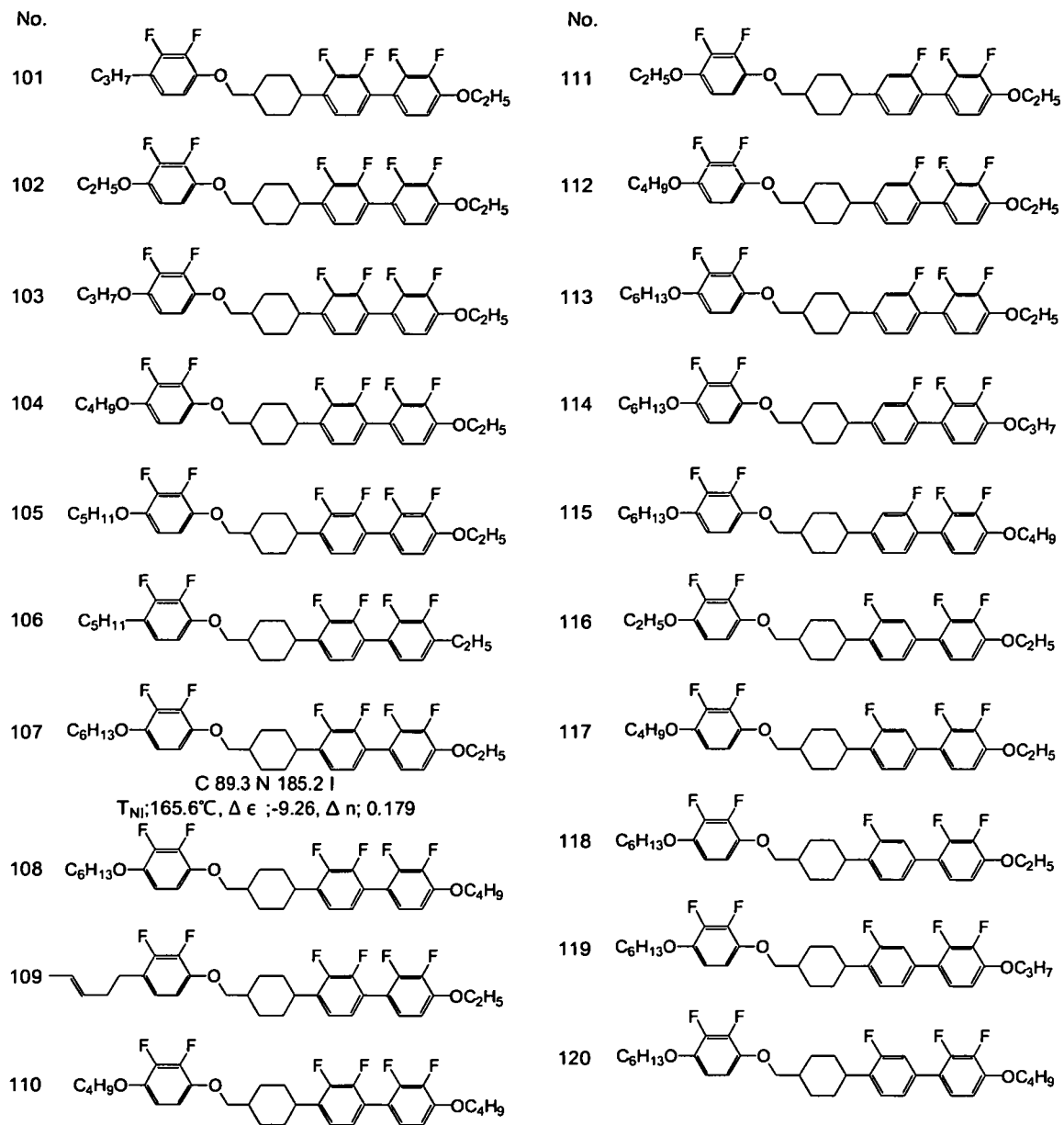
T_{Ni}: 165.9°C, Δε: -9.87, Δn: 0.175

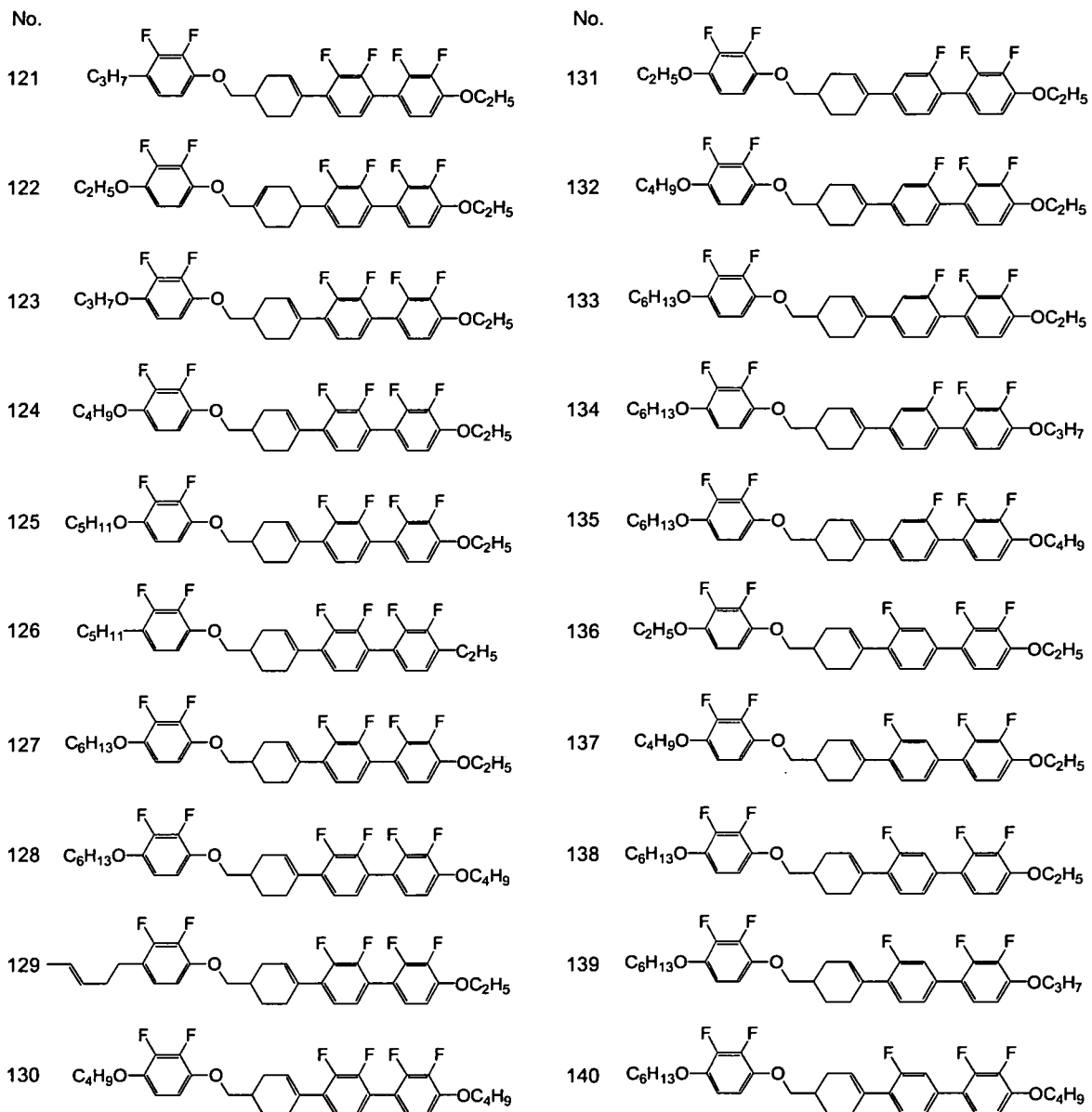
No.



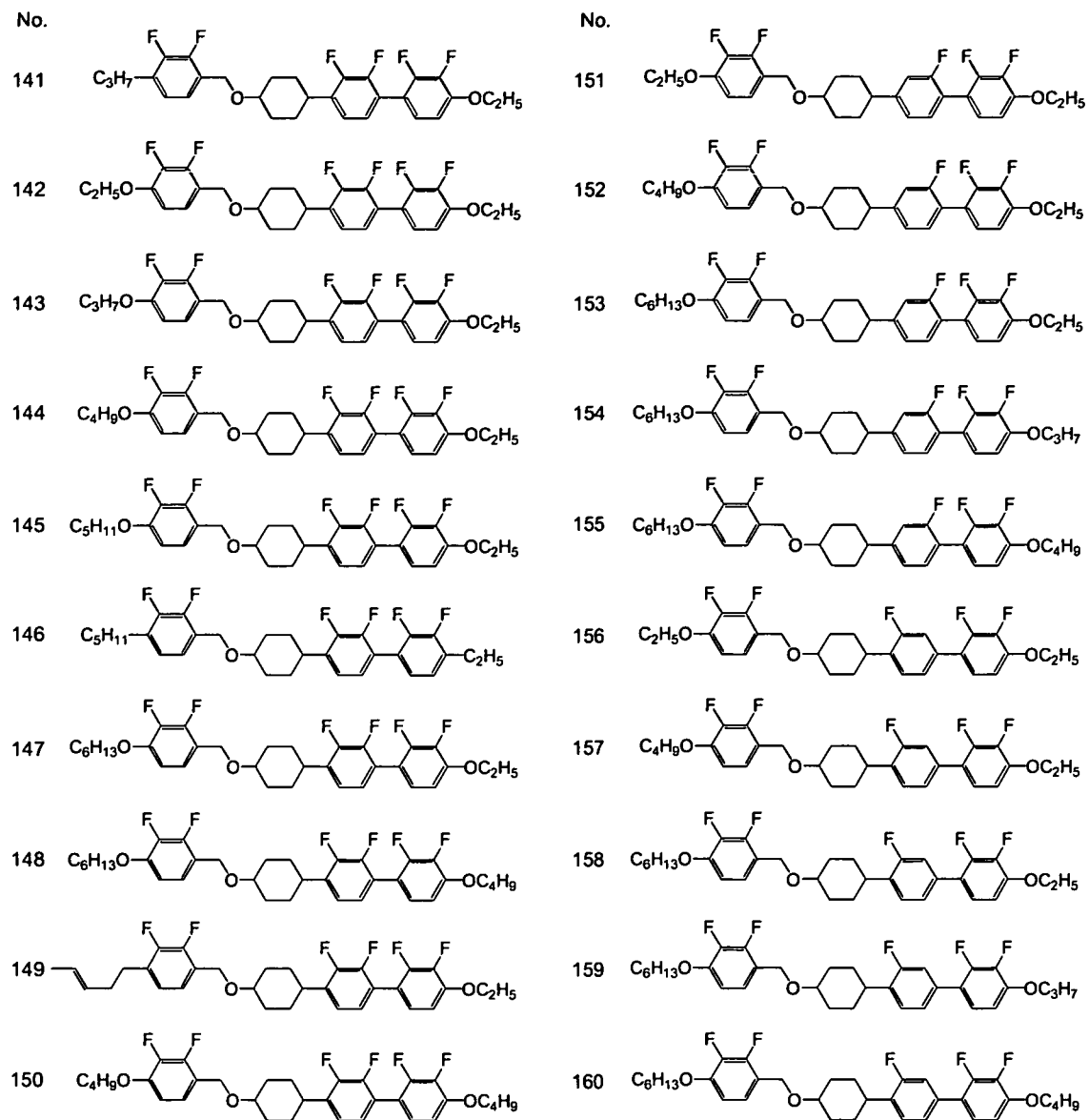


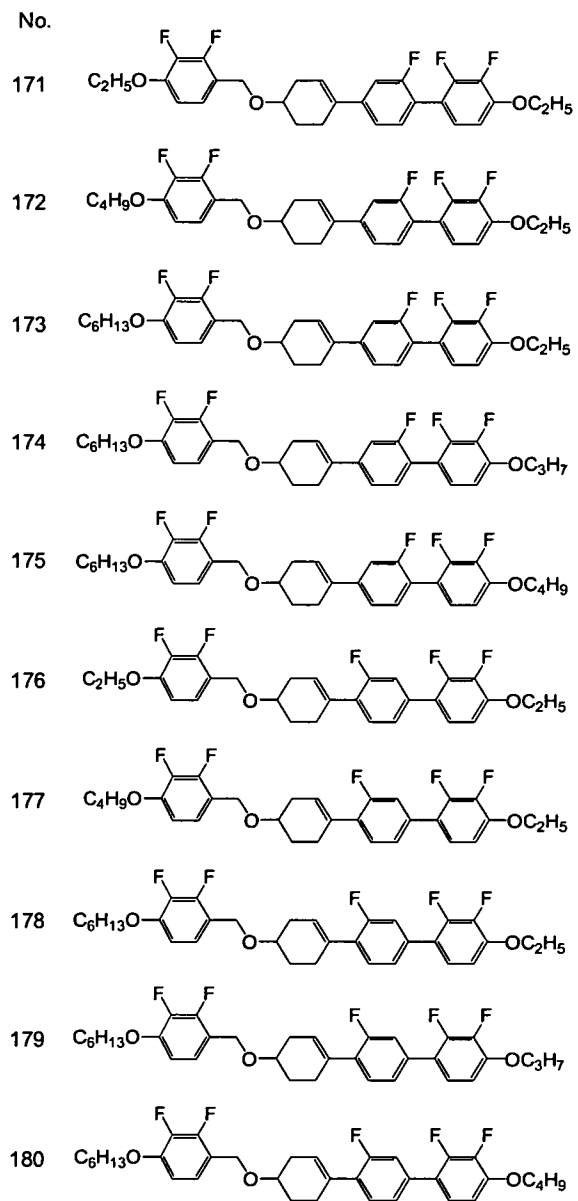
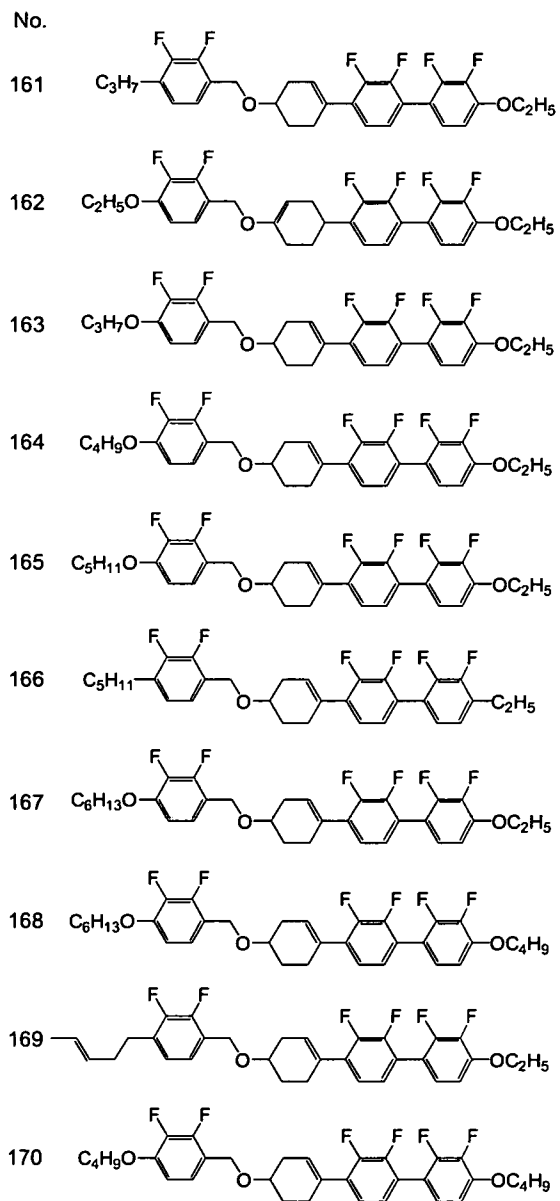
35527pif

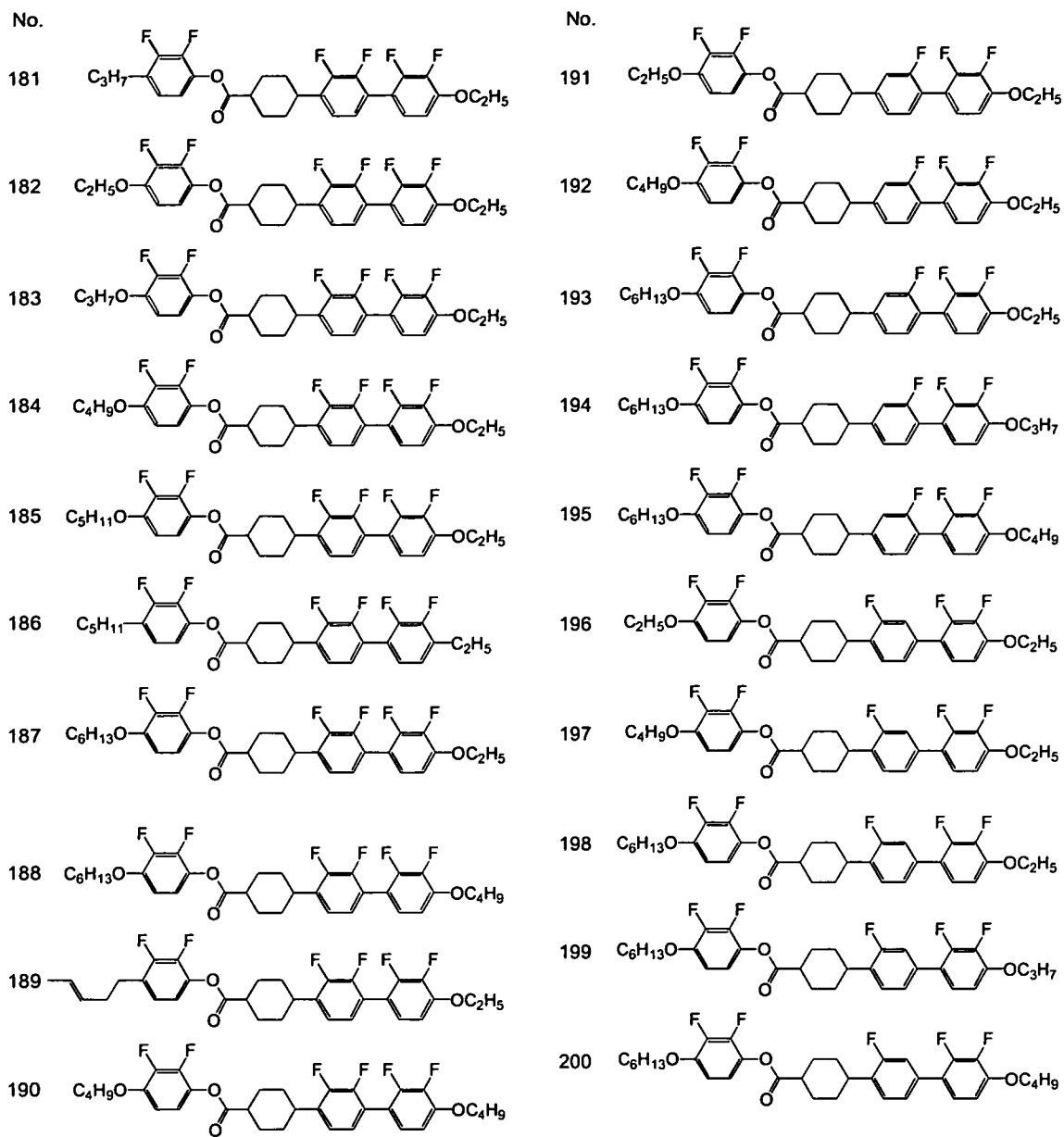


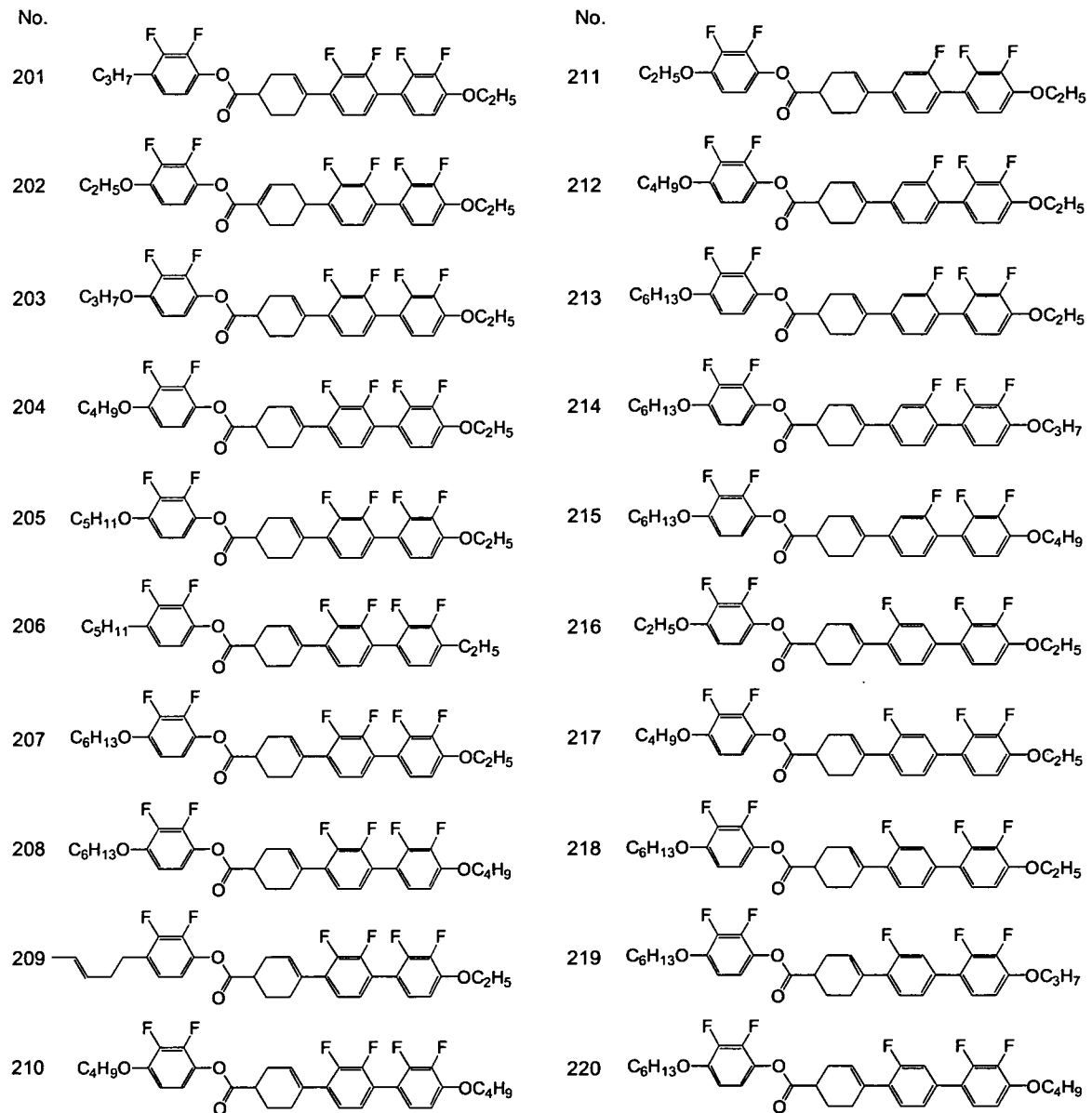


35527pif

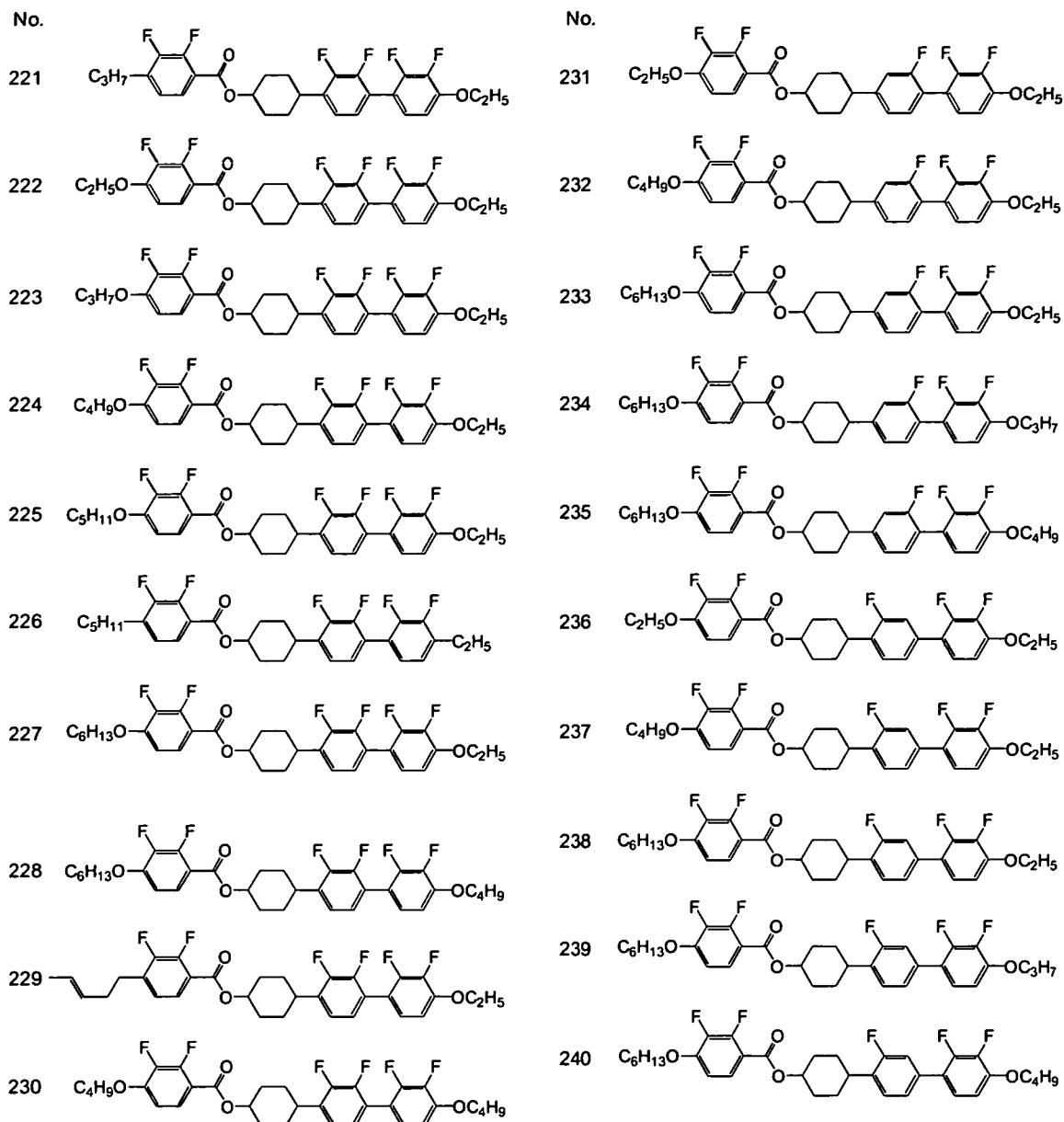


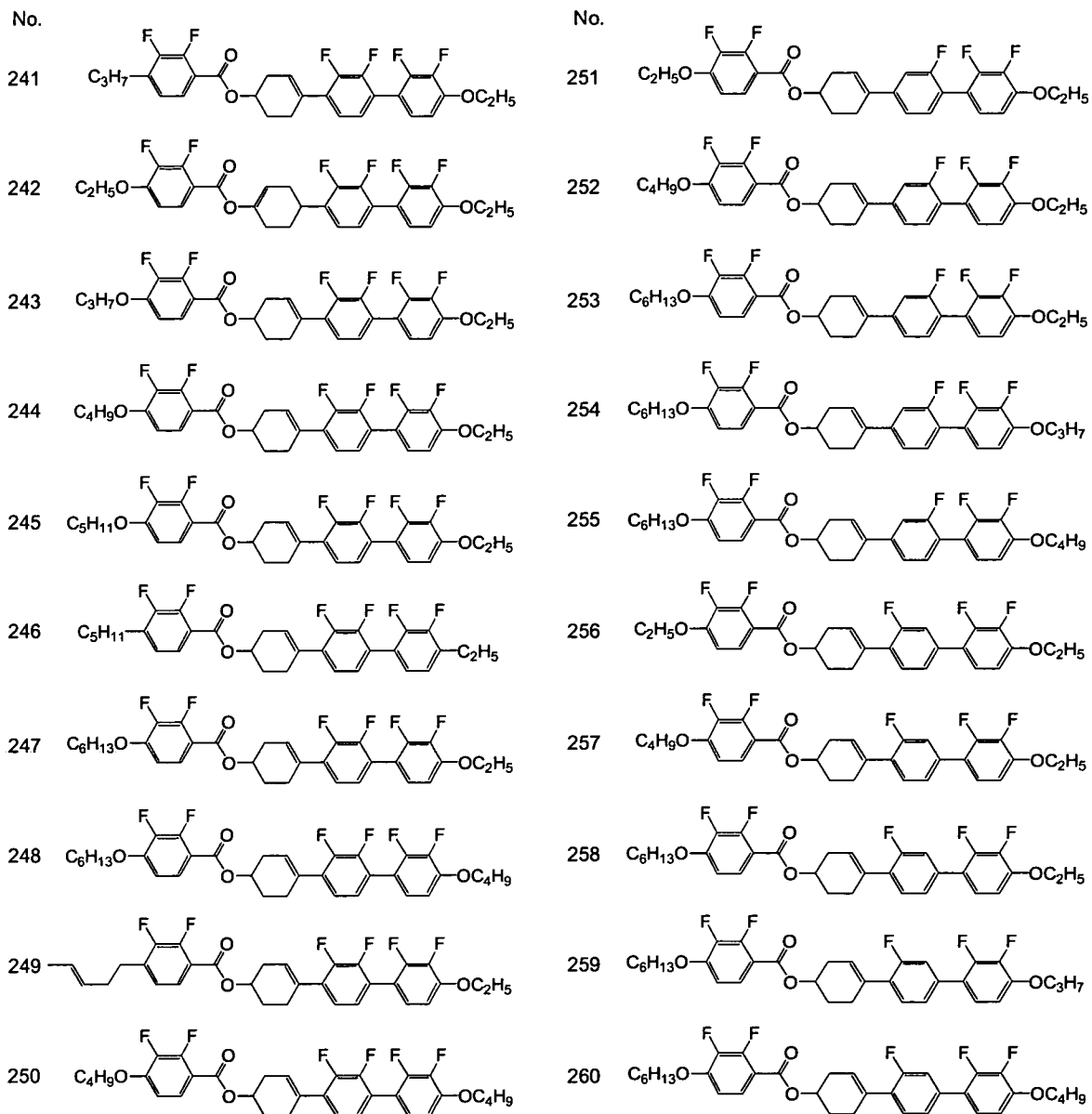




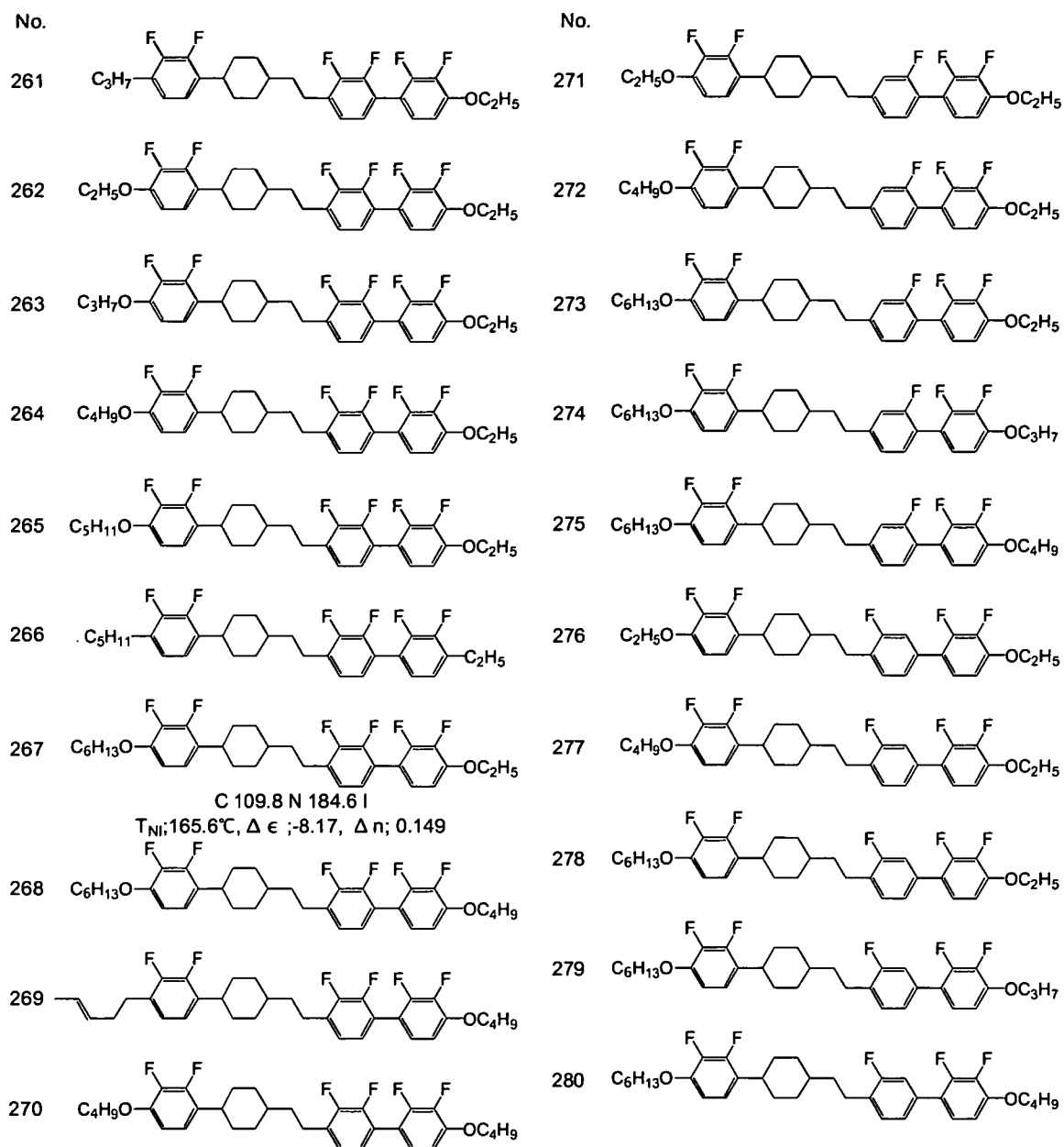


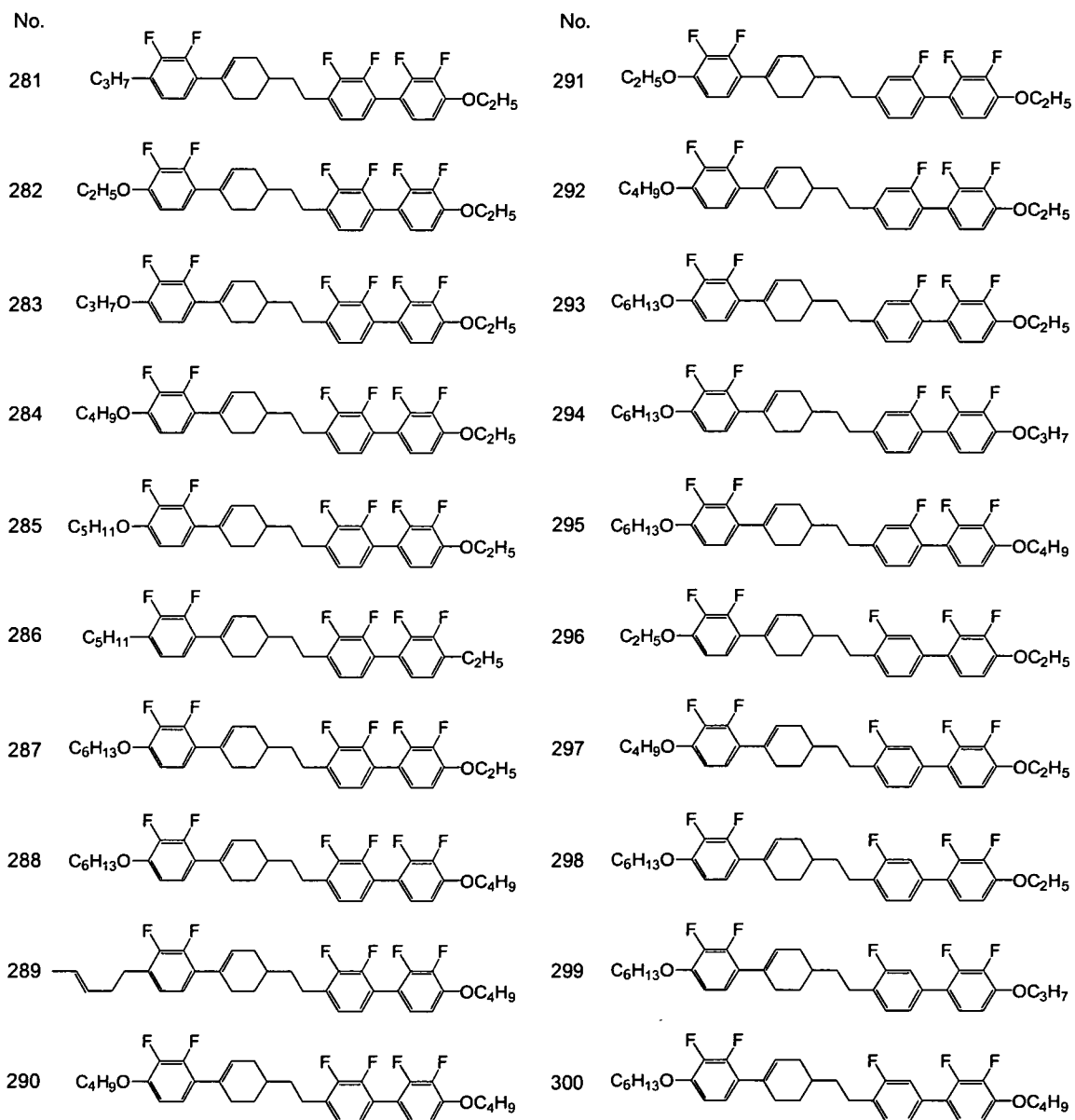
35527pif



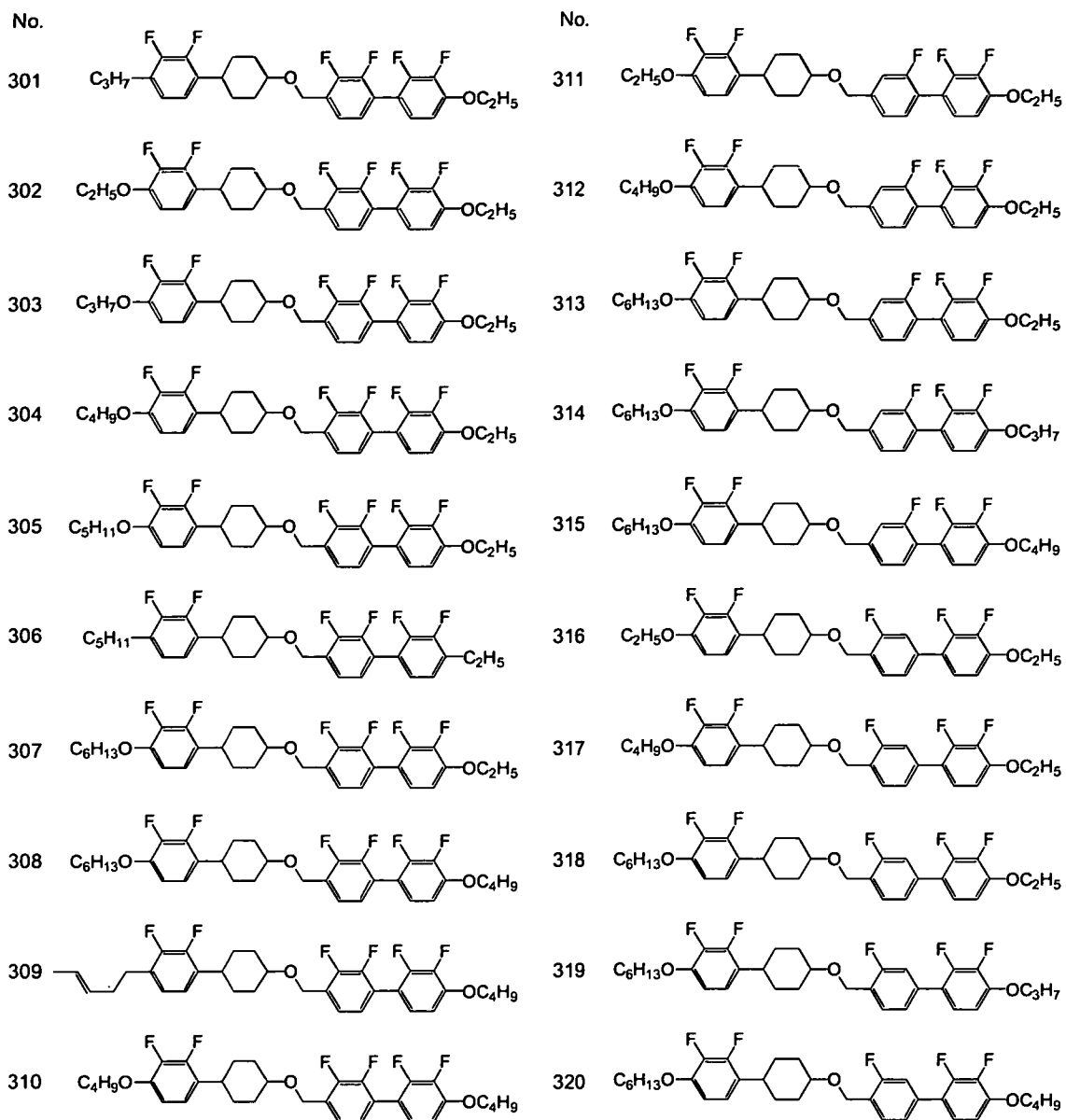


35527pif



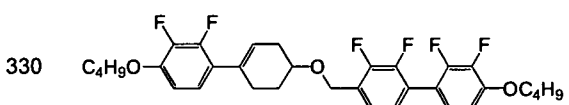
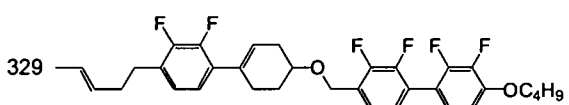
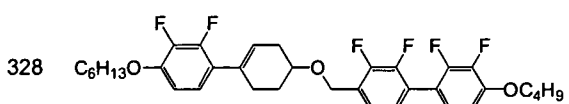
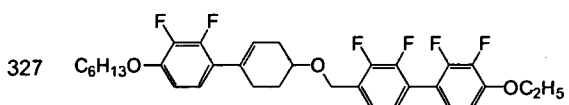
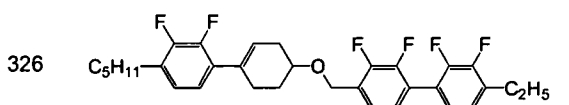
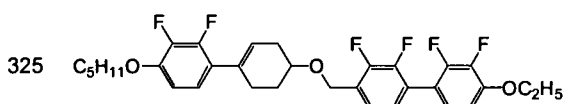
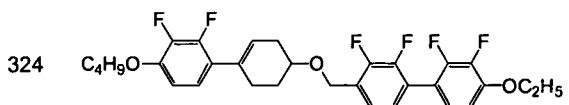
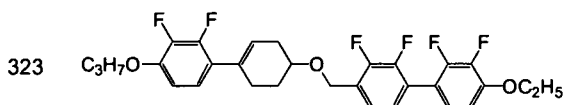
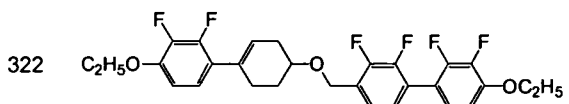
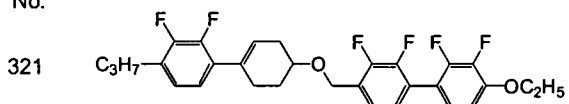


35527pif

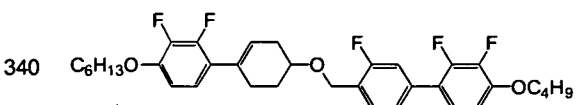
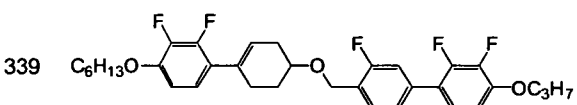
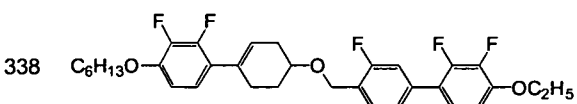
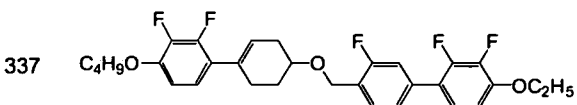
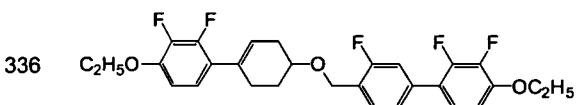
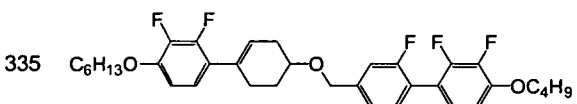
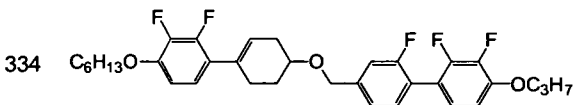
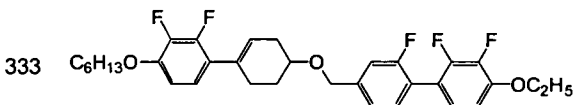
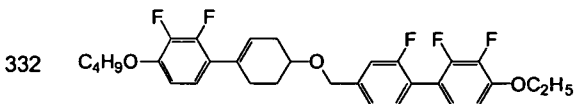
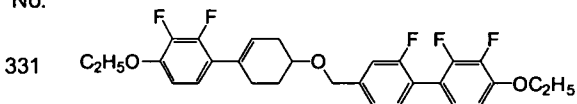


35527pif

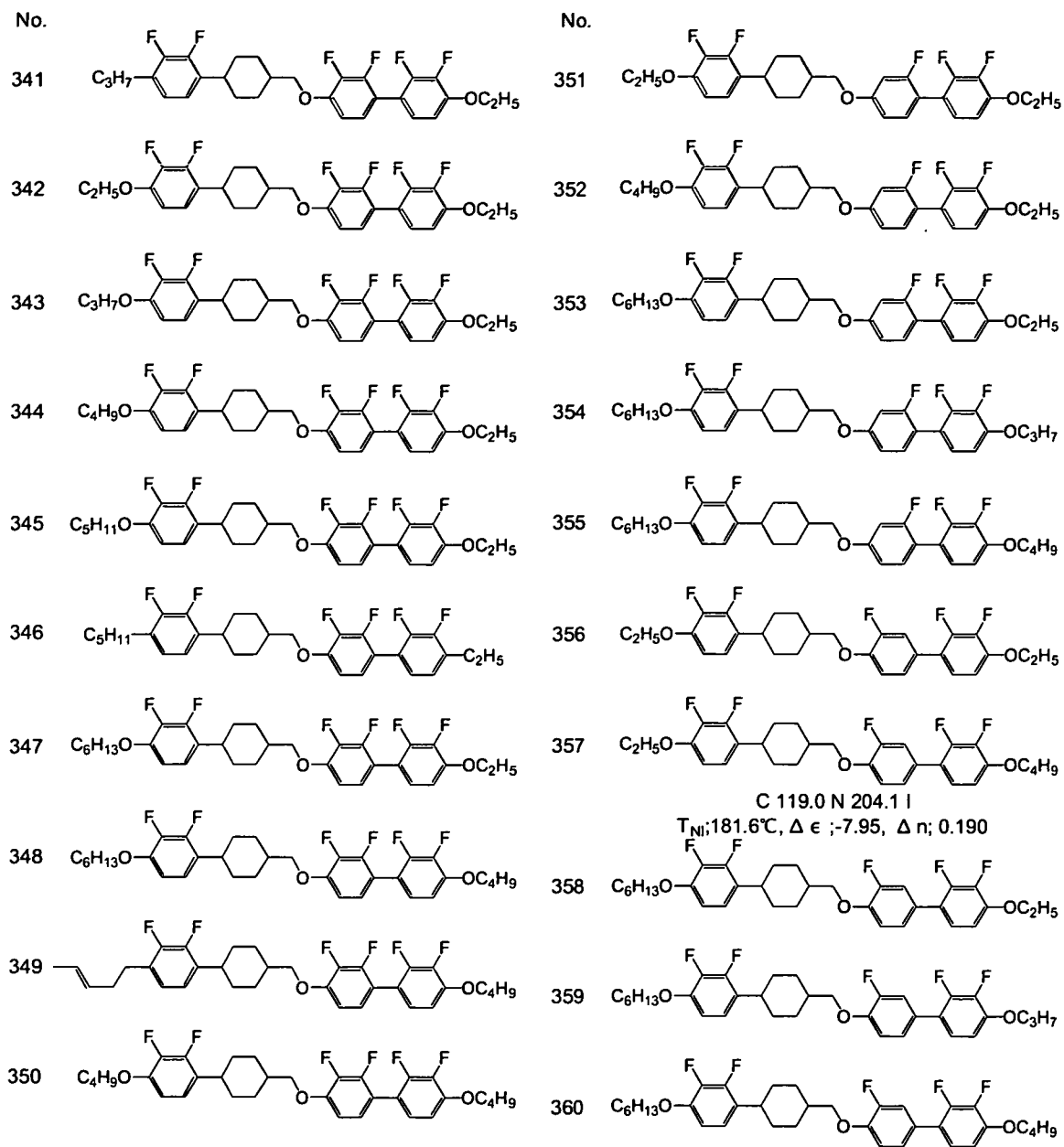
No.

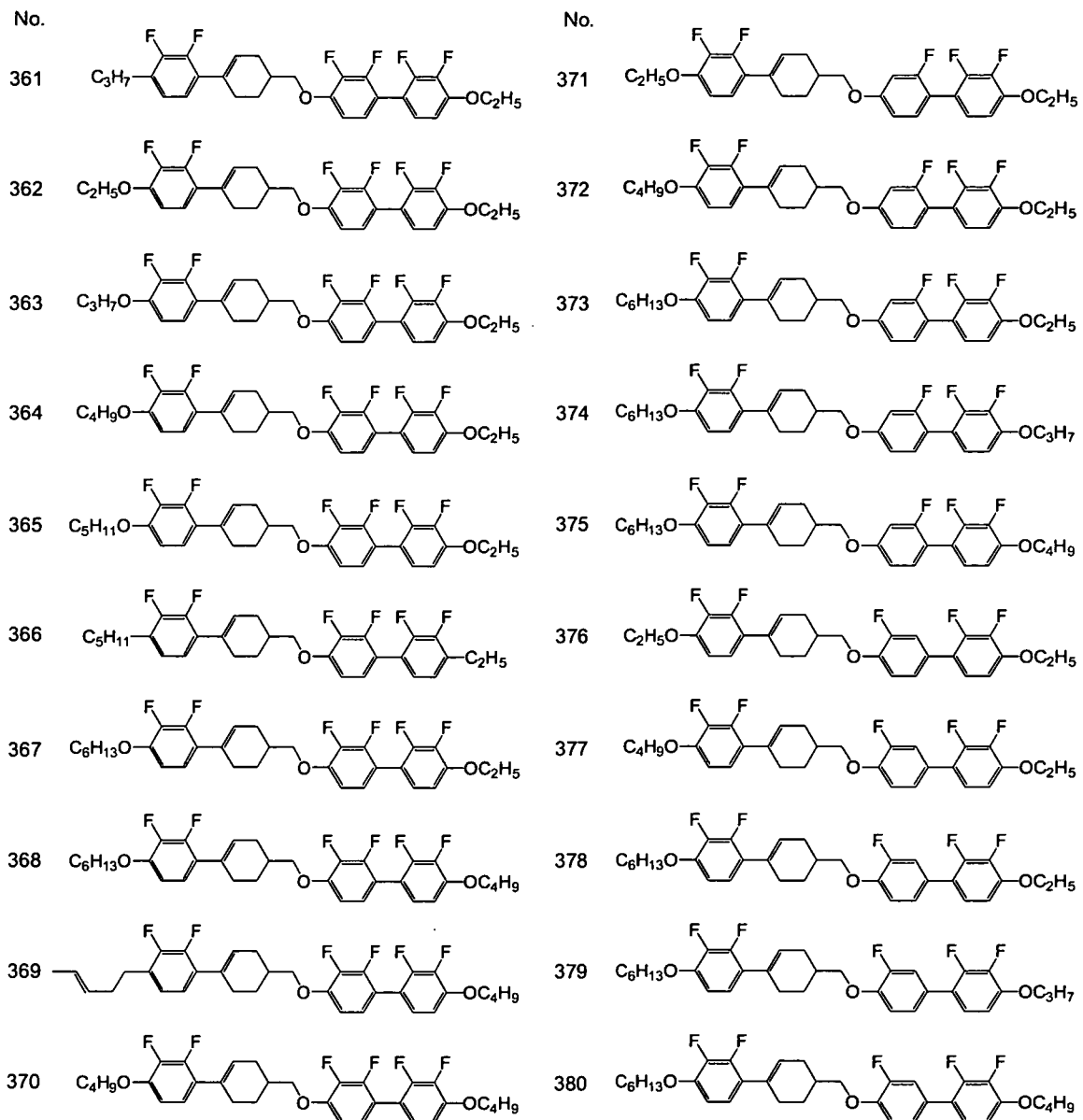


No.

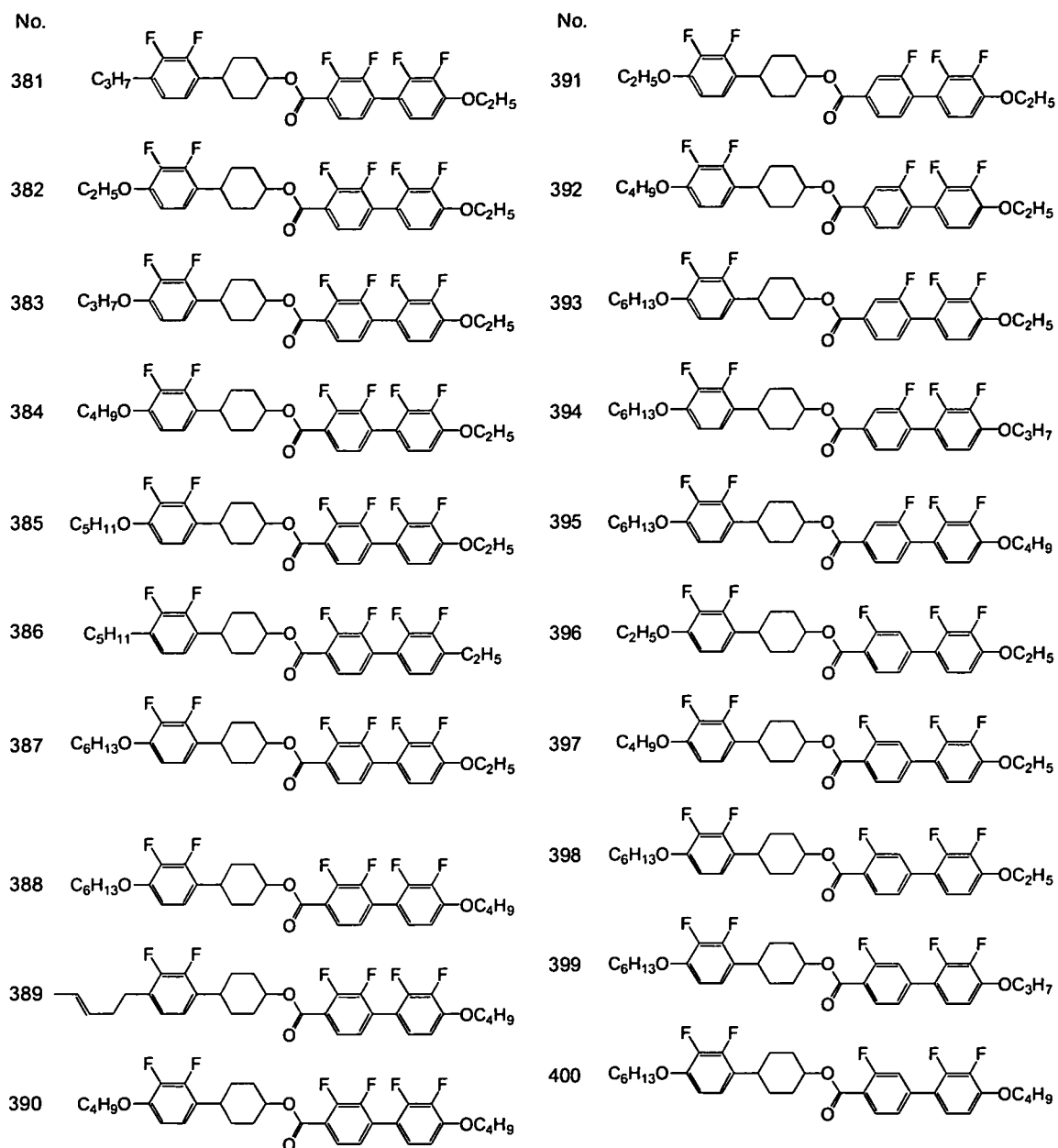


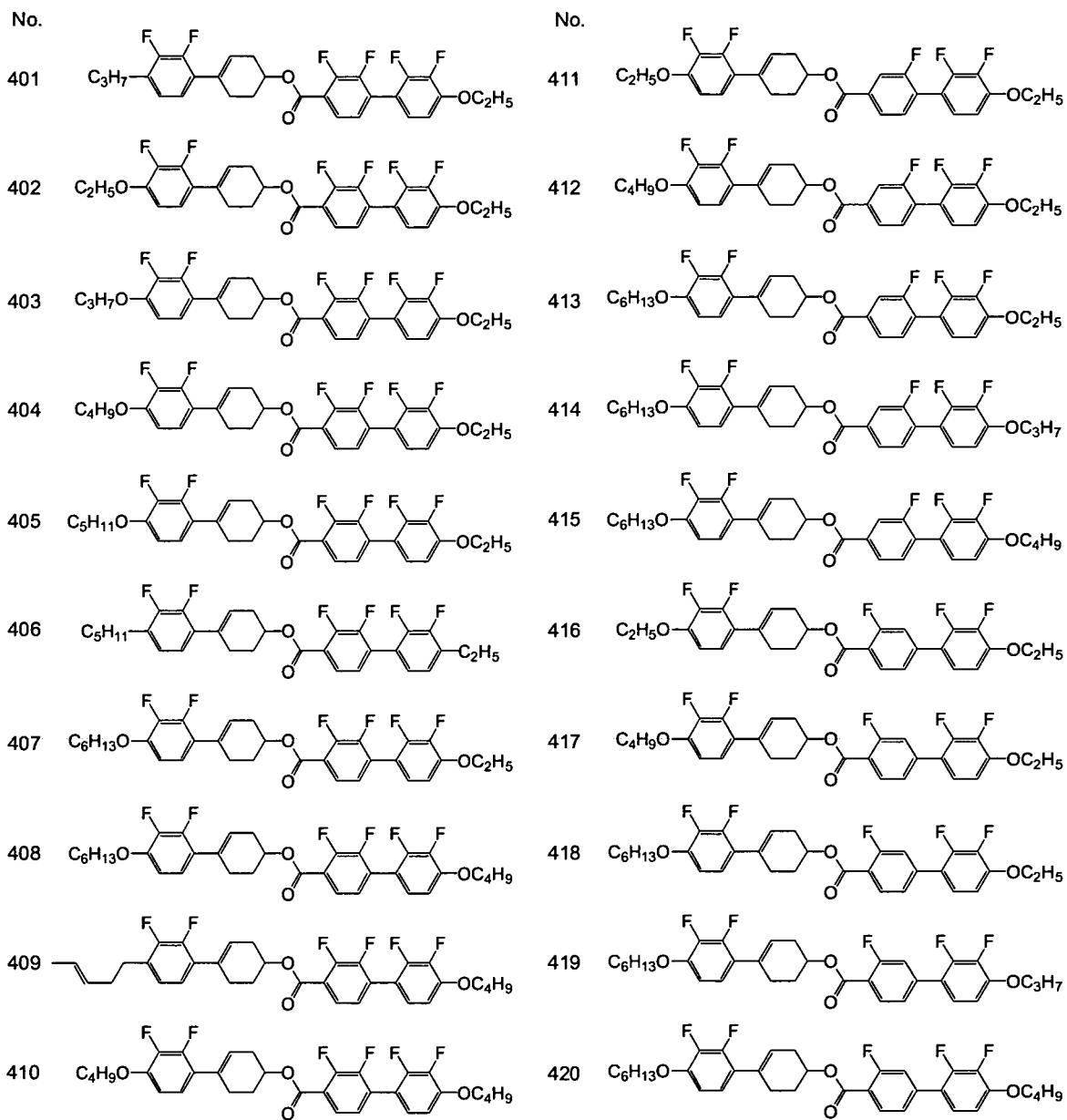
35527pif



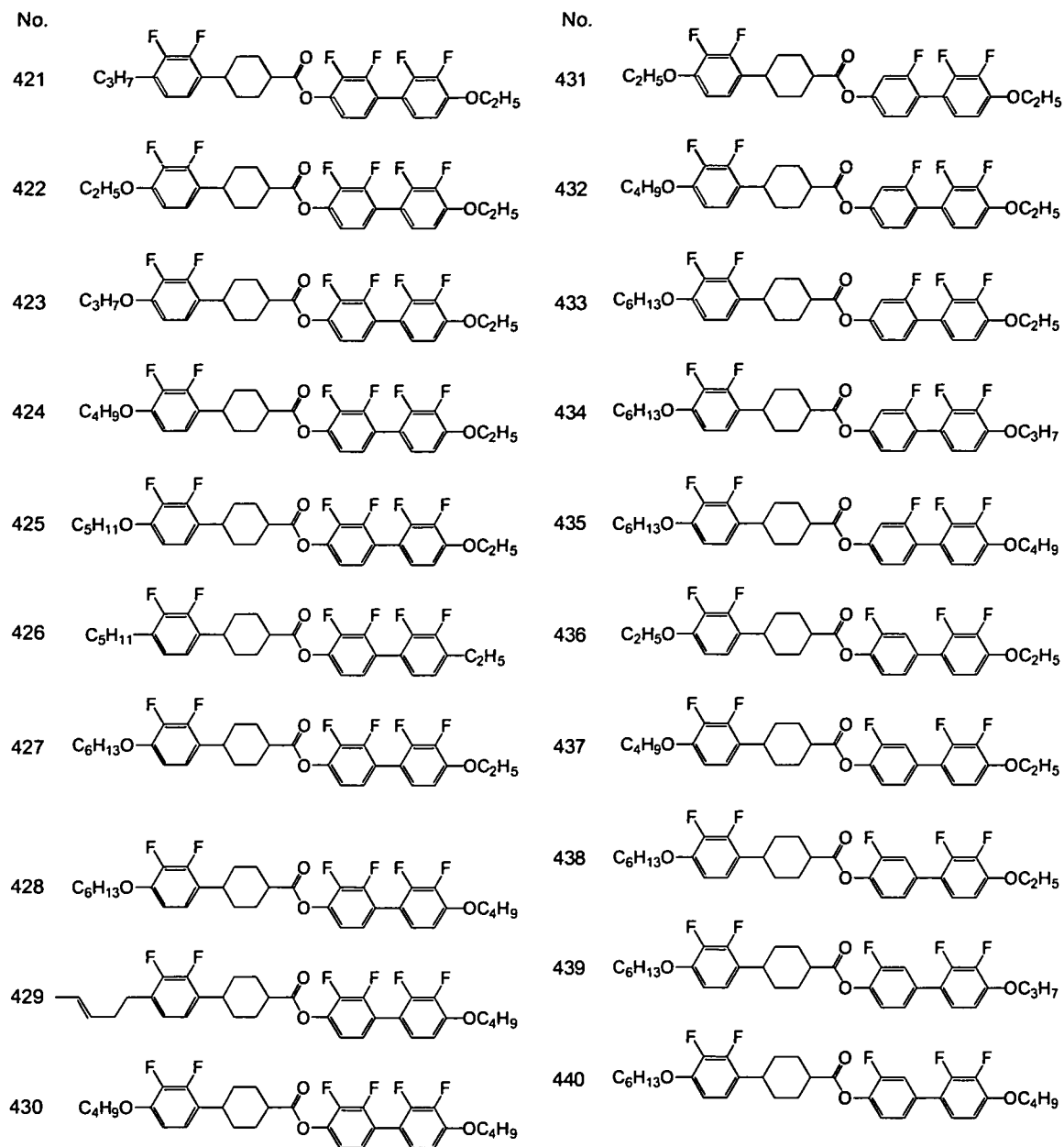


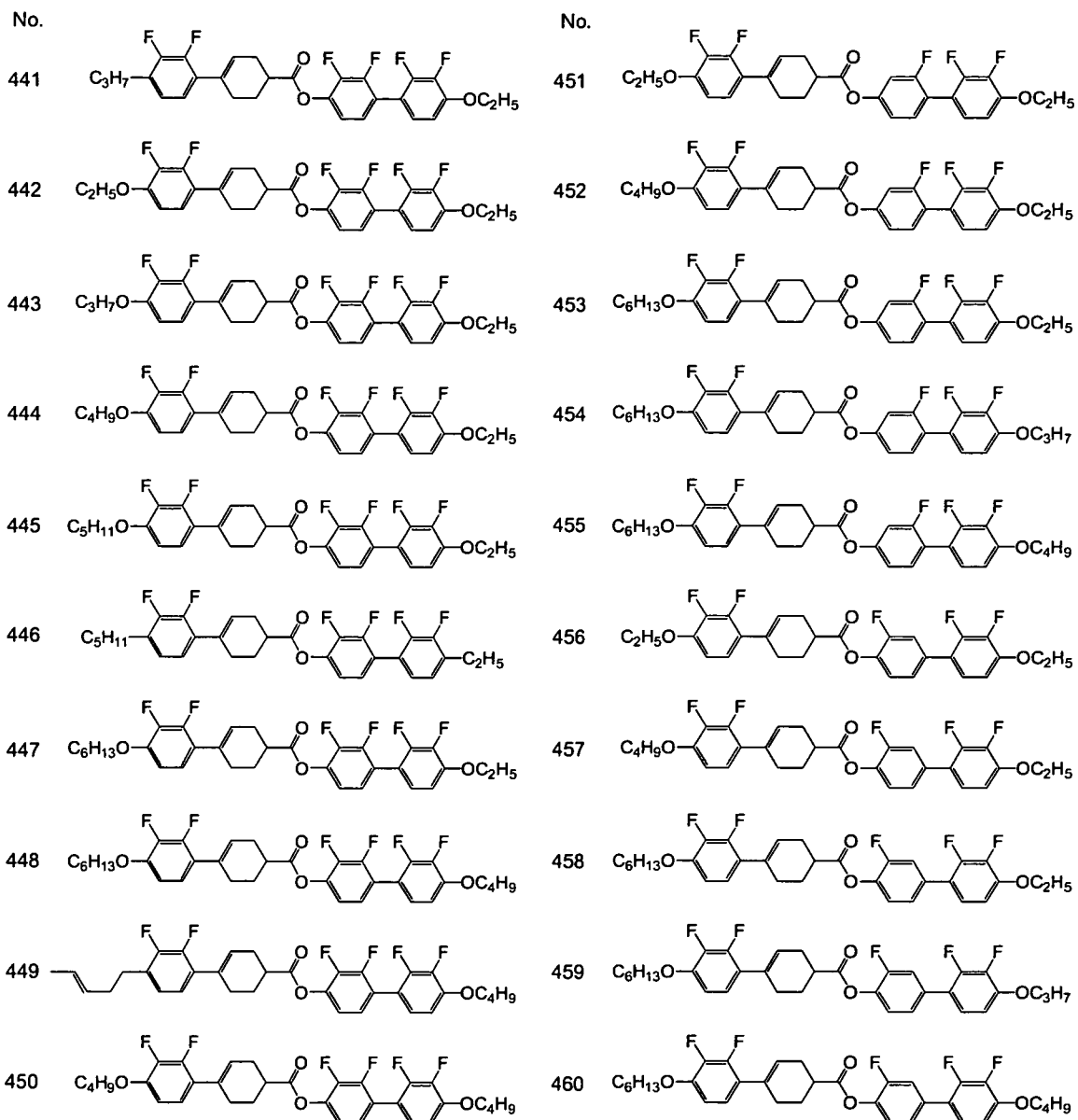
35527pif



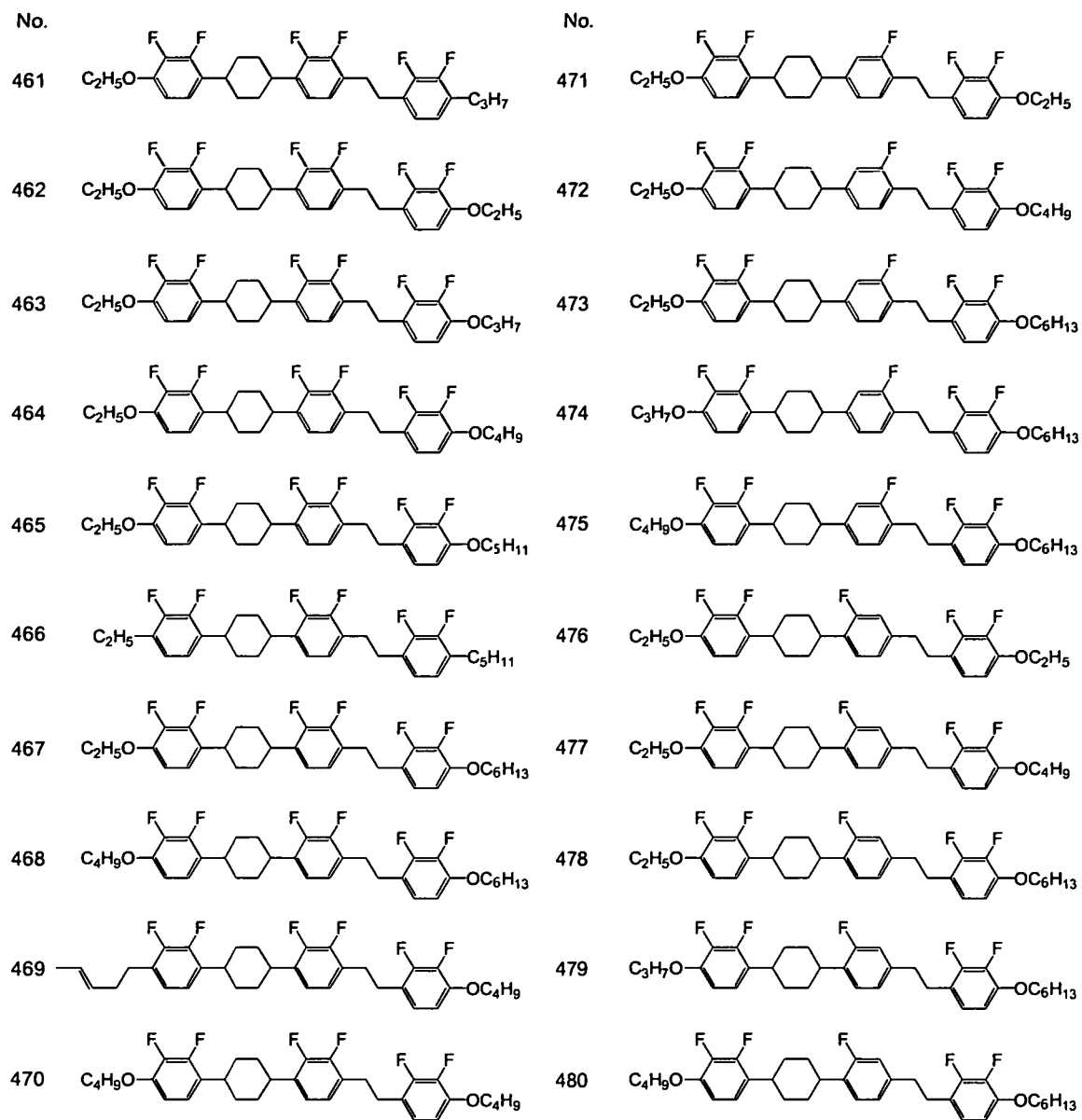


35527pif

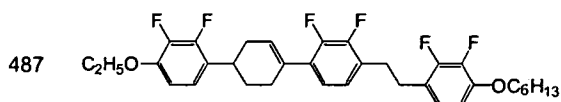
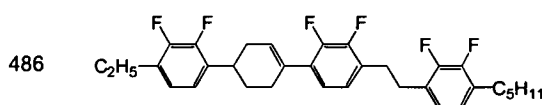
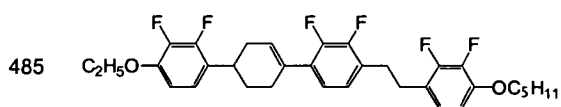
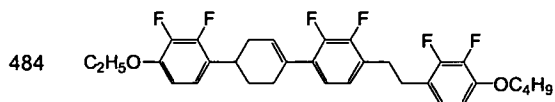
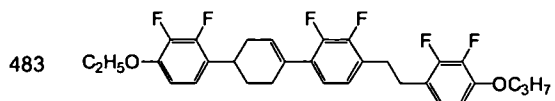
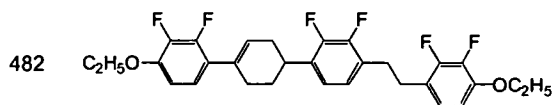
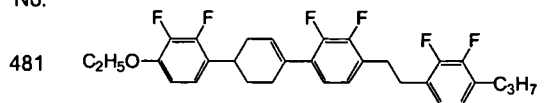




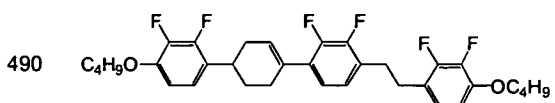
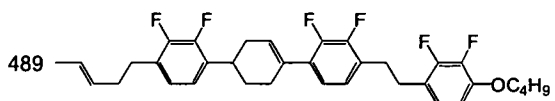
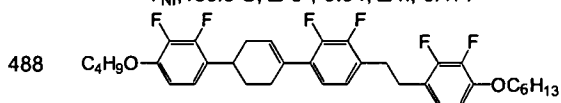
35527pif



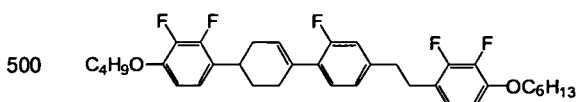
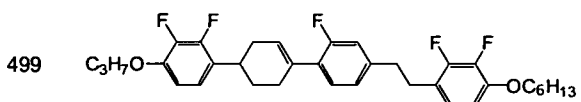
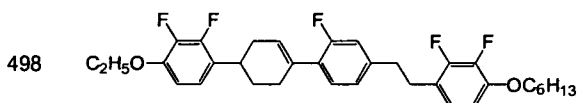
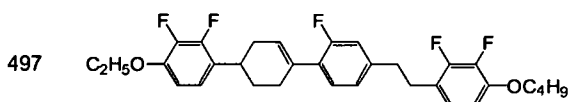
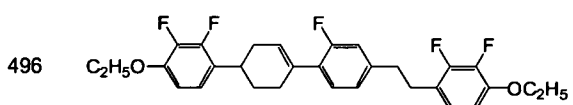
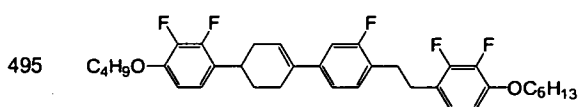
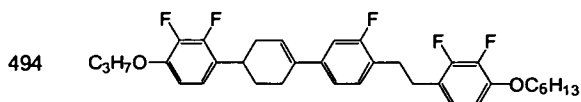
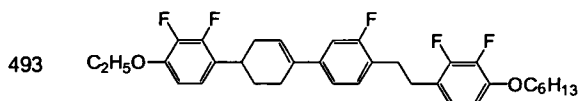
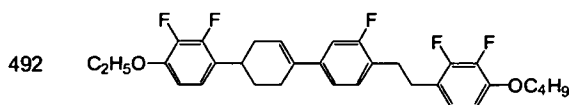
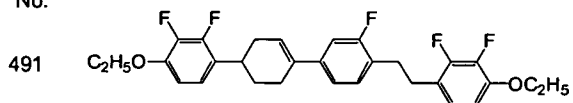
No.



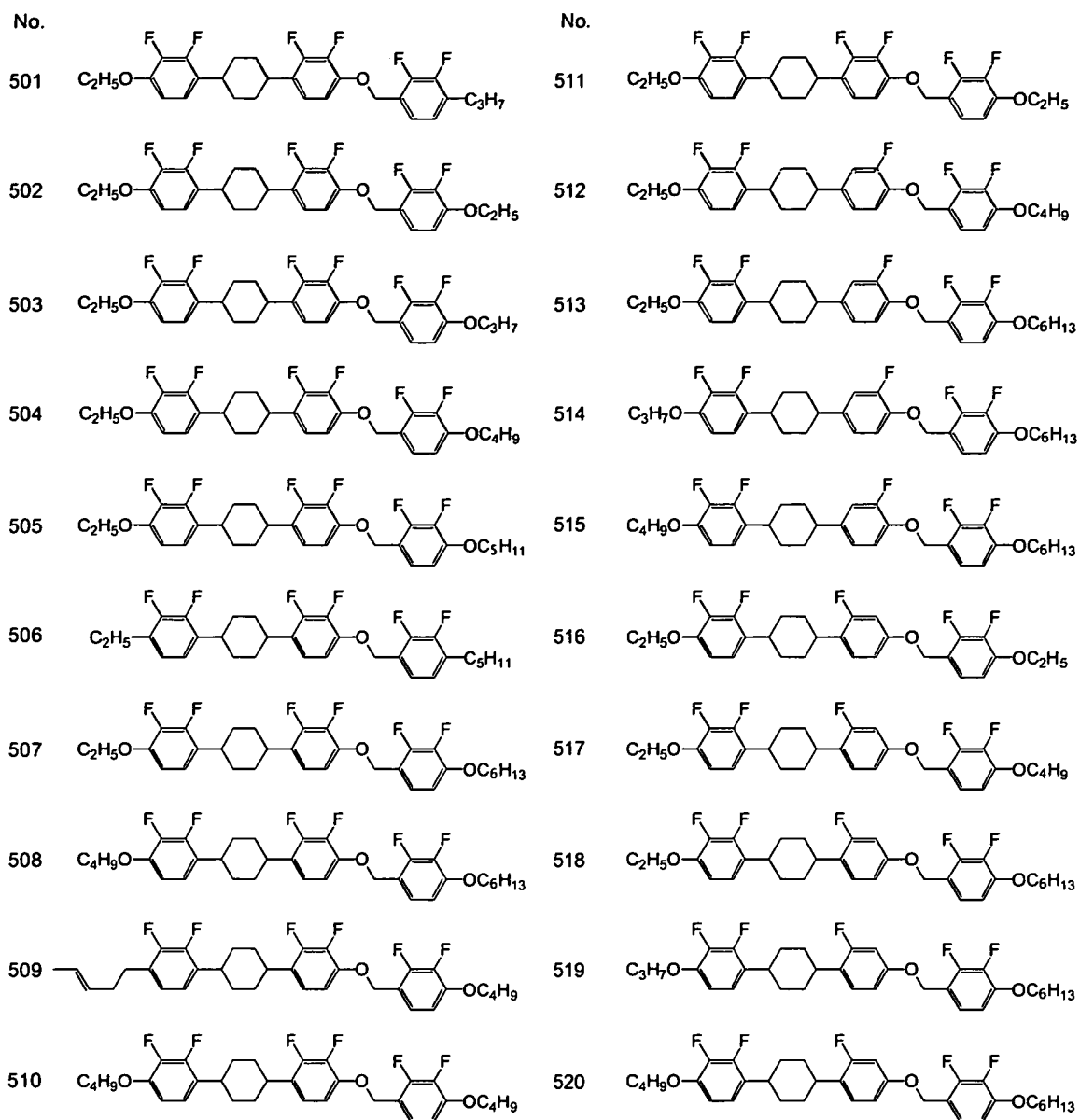
C 81.8 N 148.1 I

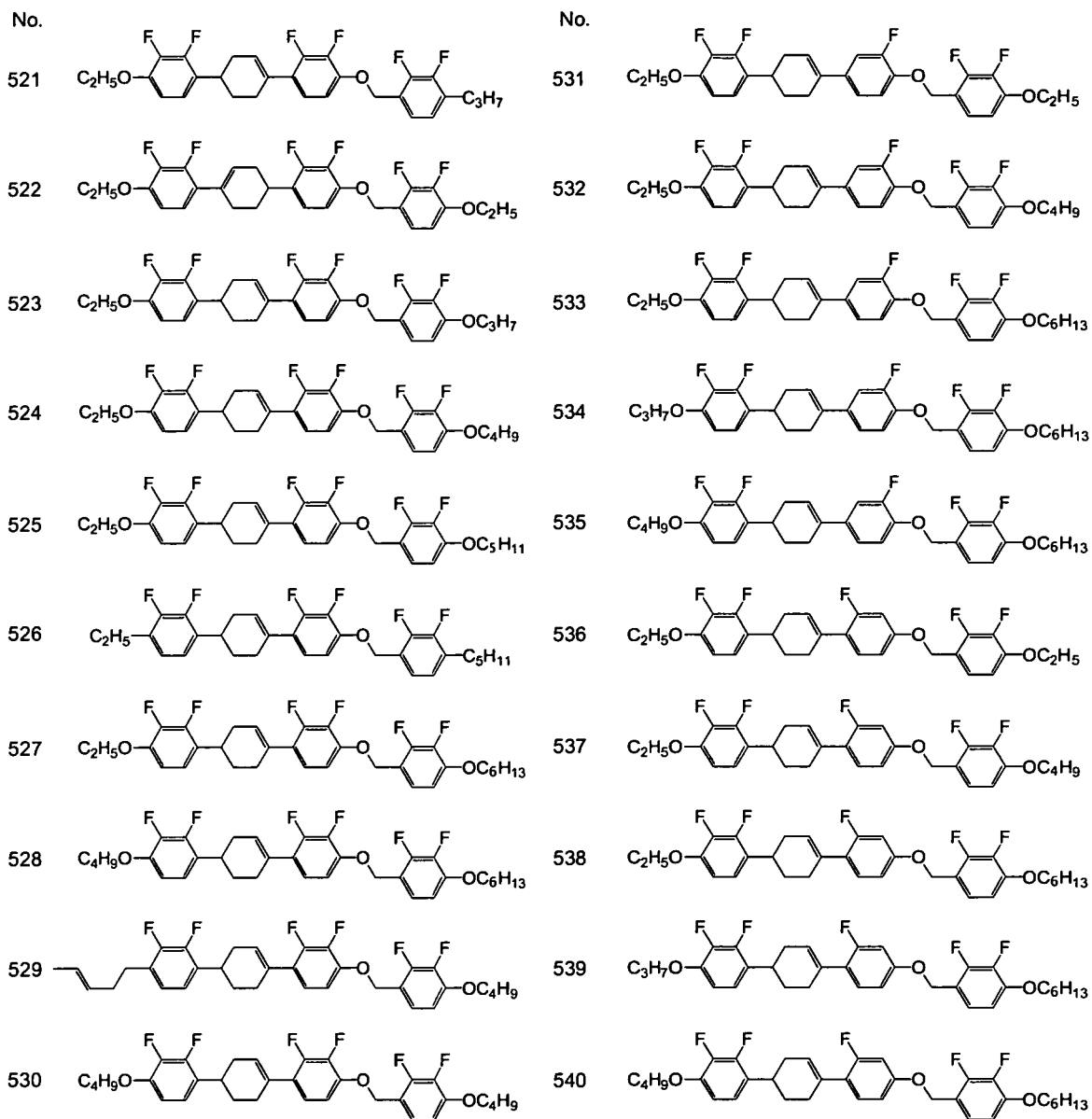
 $T_{Ni}; 133.9^{\circ}\text{C}, \Delta \epsilon; -9.04, \Delta n; 0.174$ 

No.

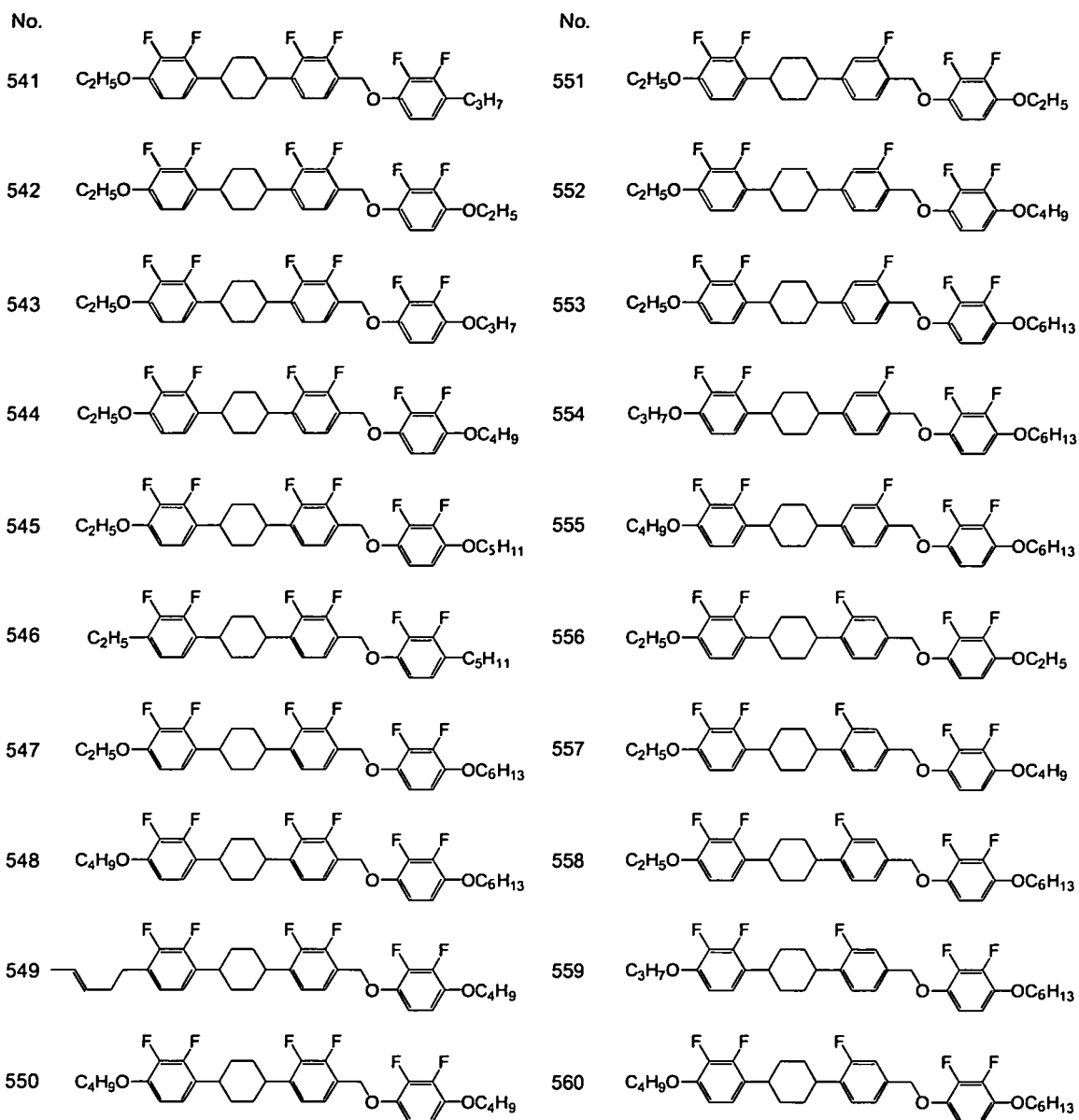


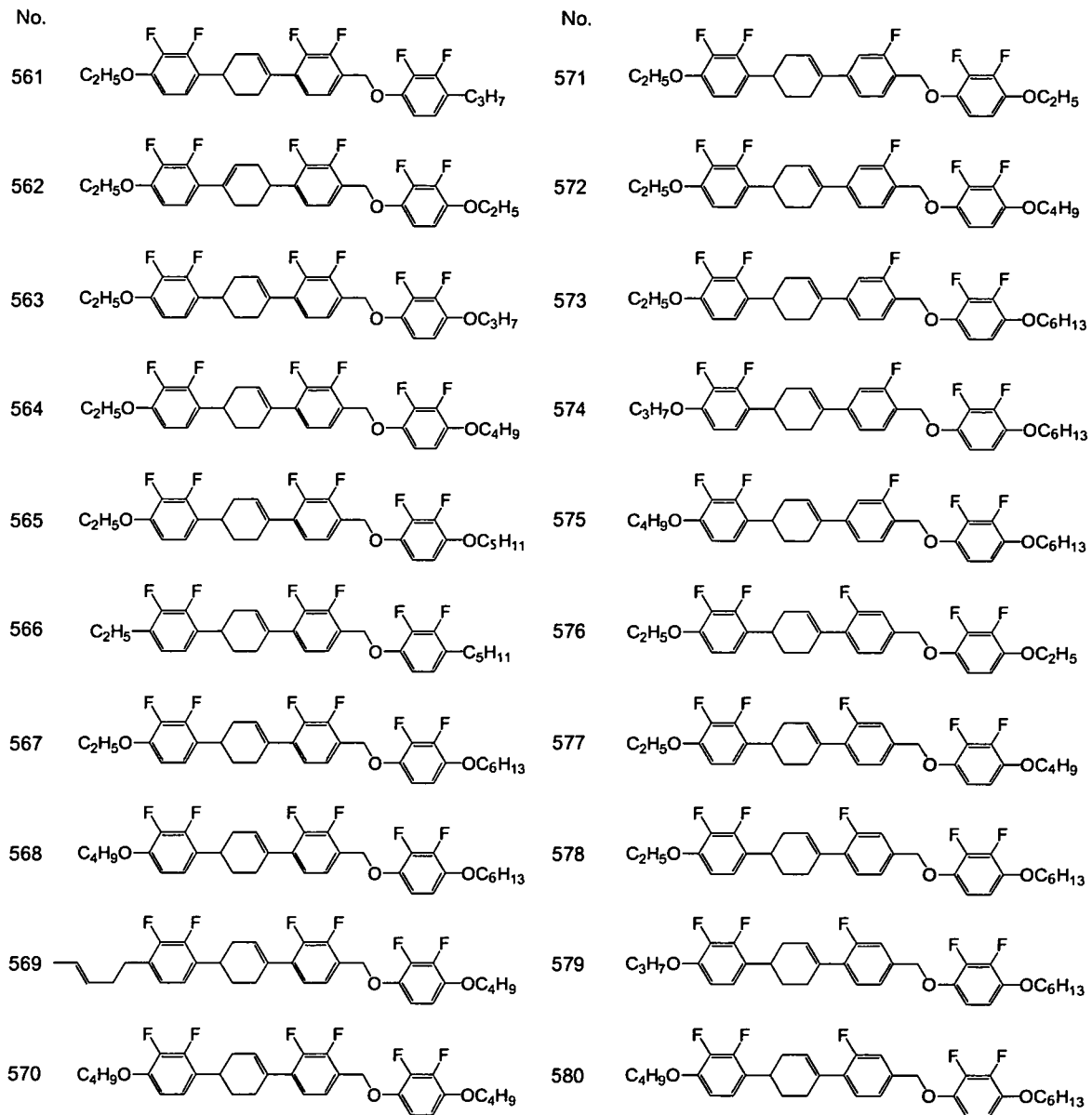
35527pif



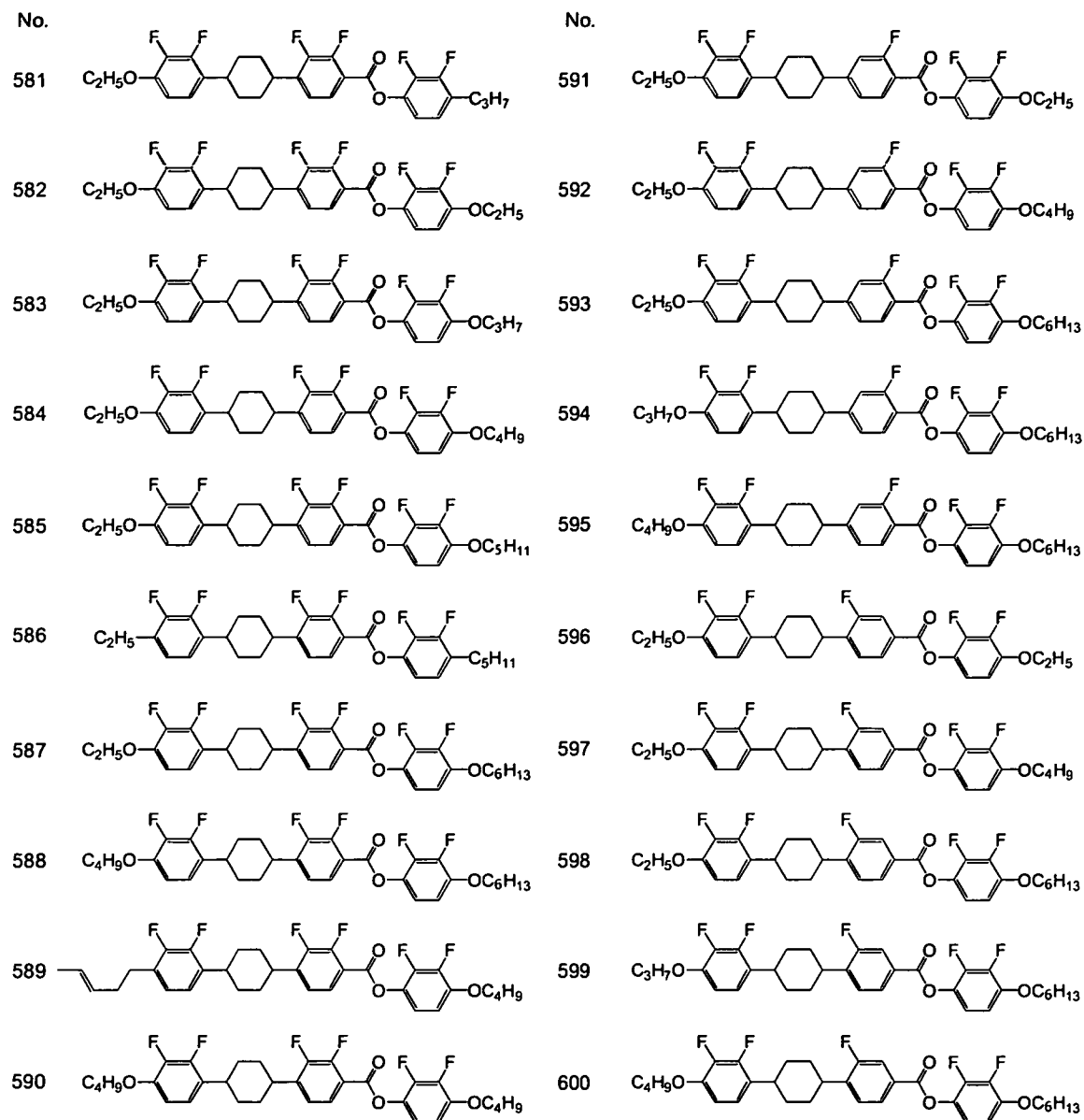


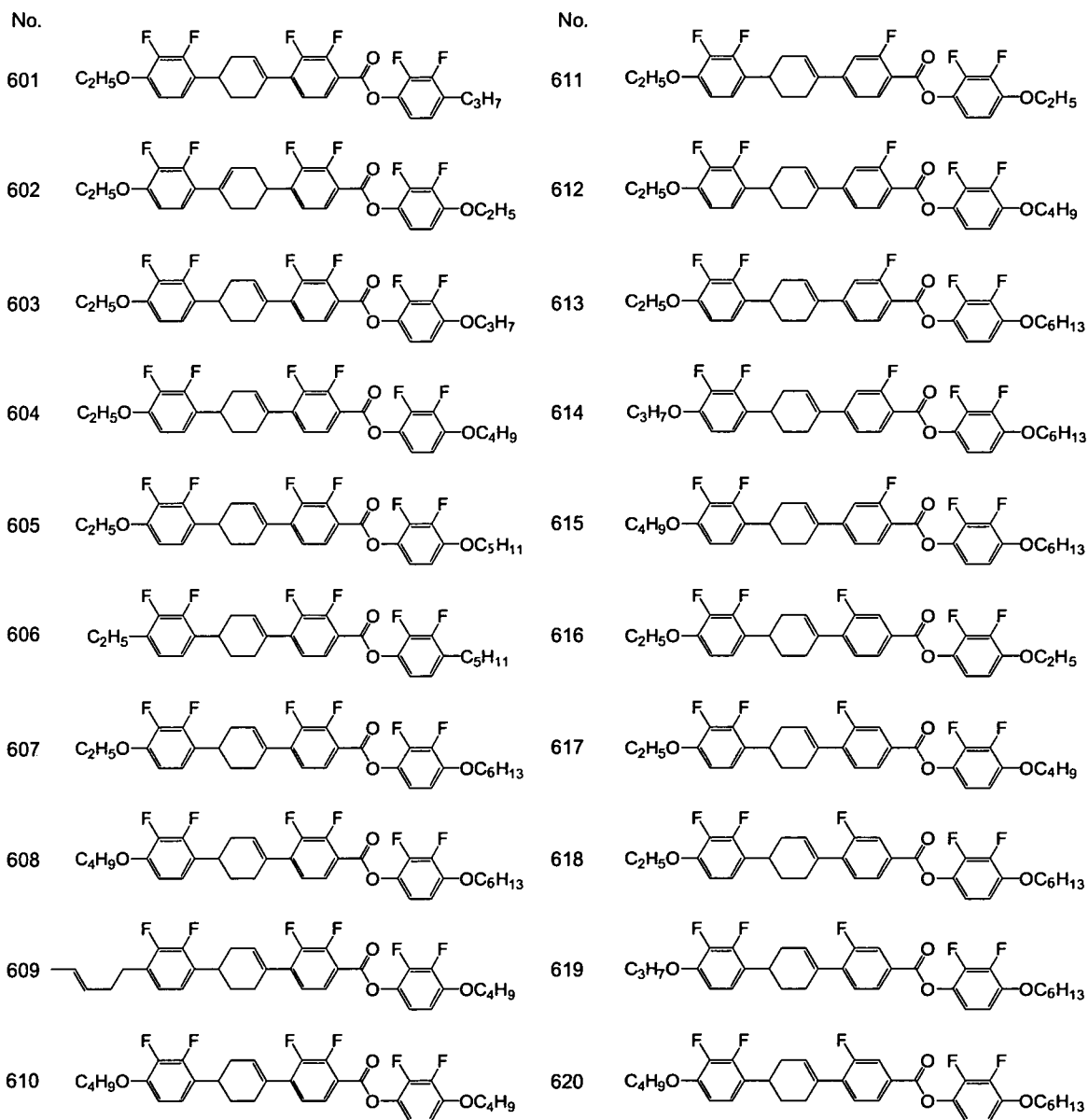
35527pif

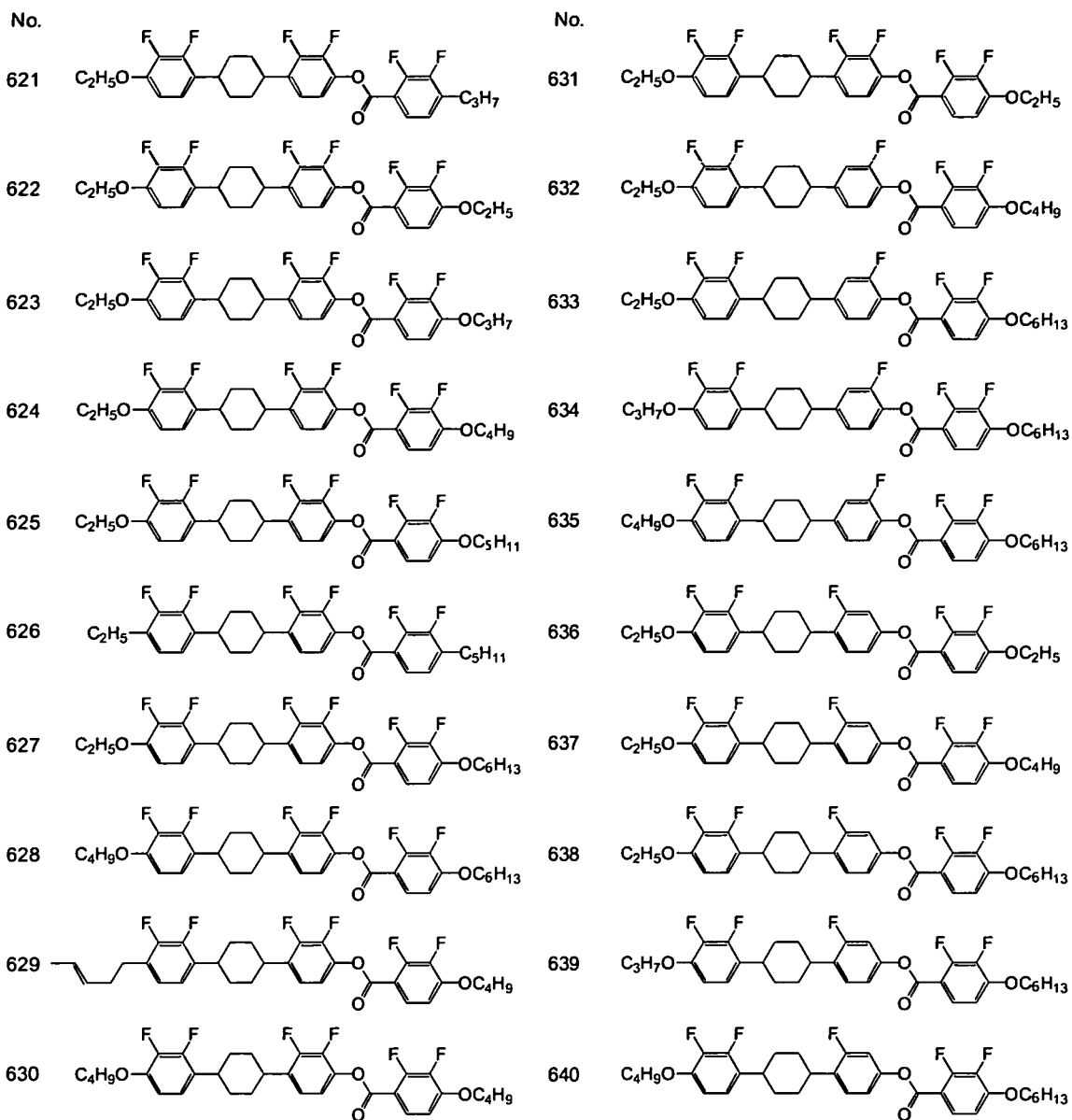


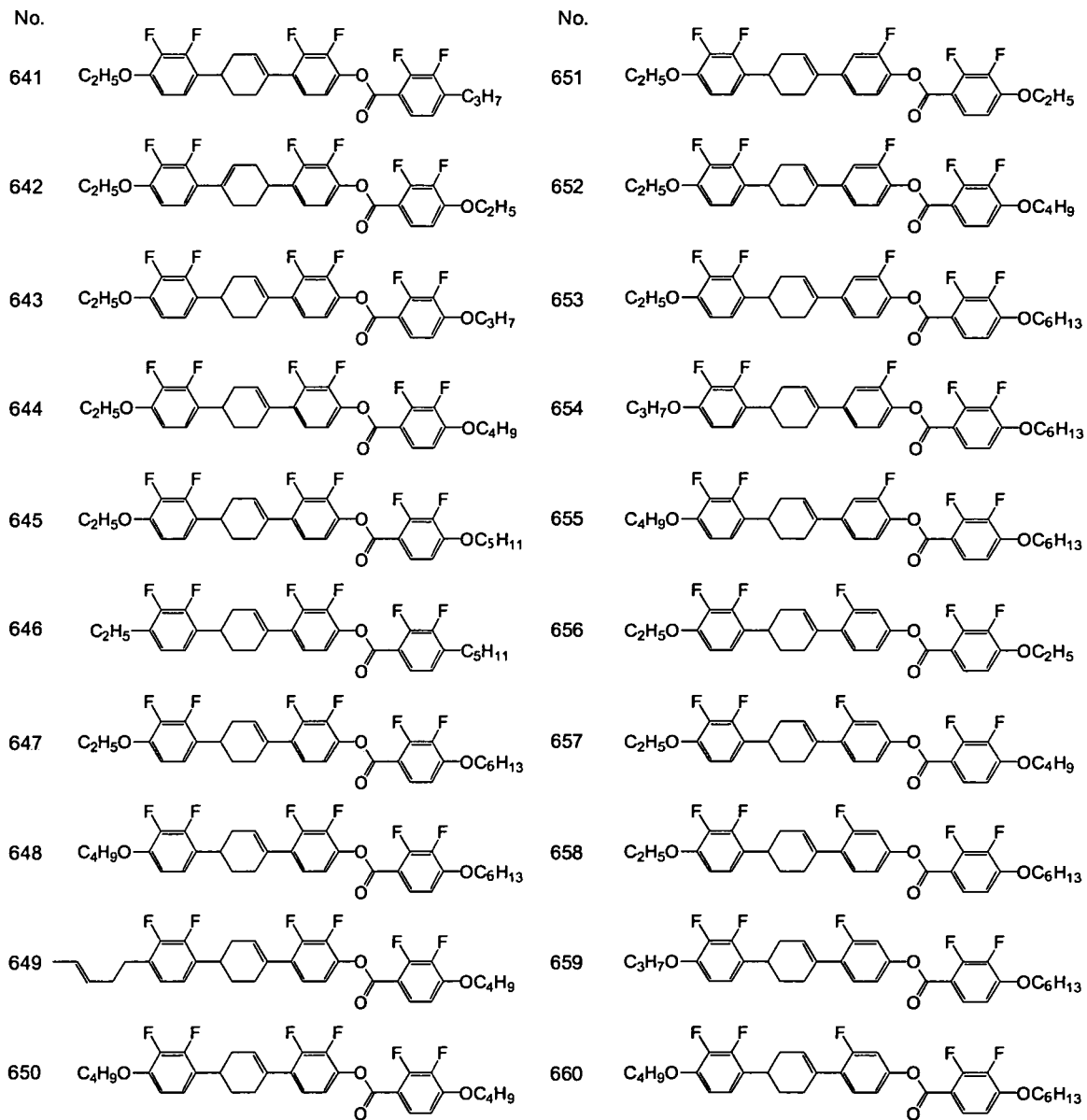


35527pif

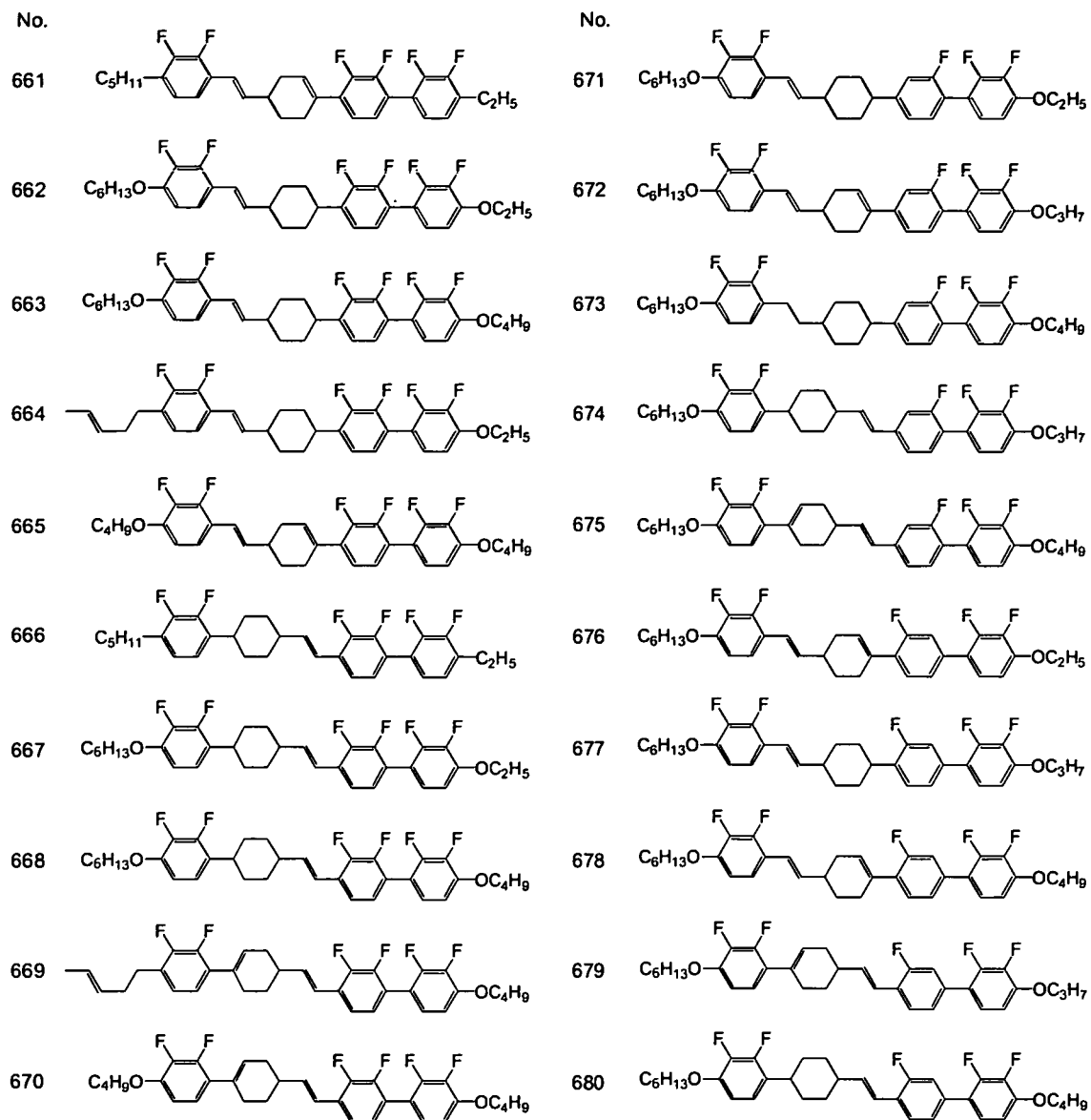


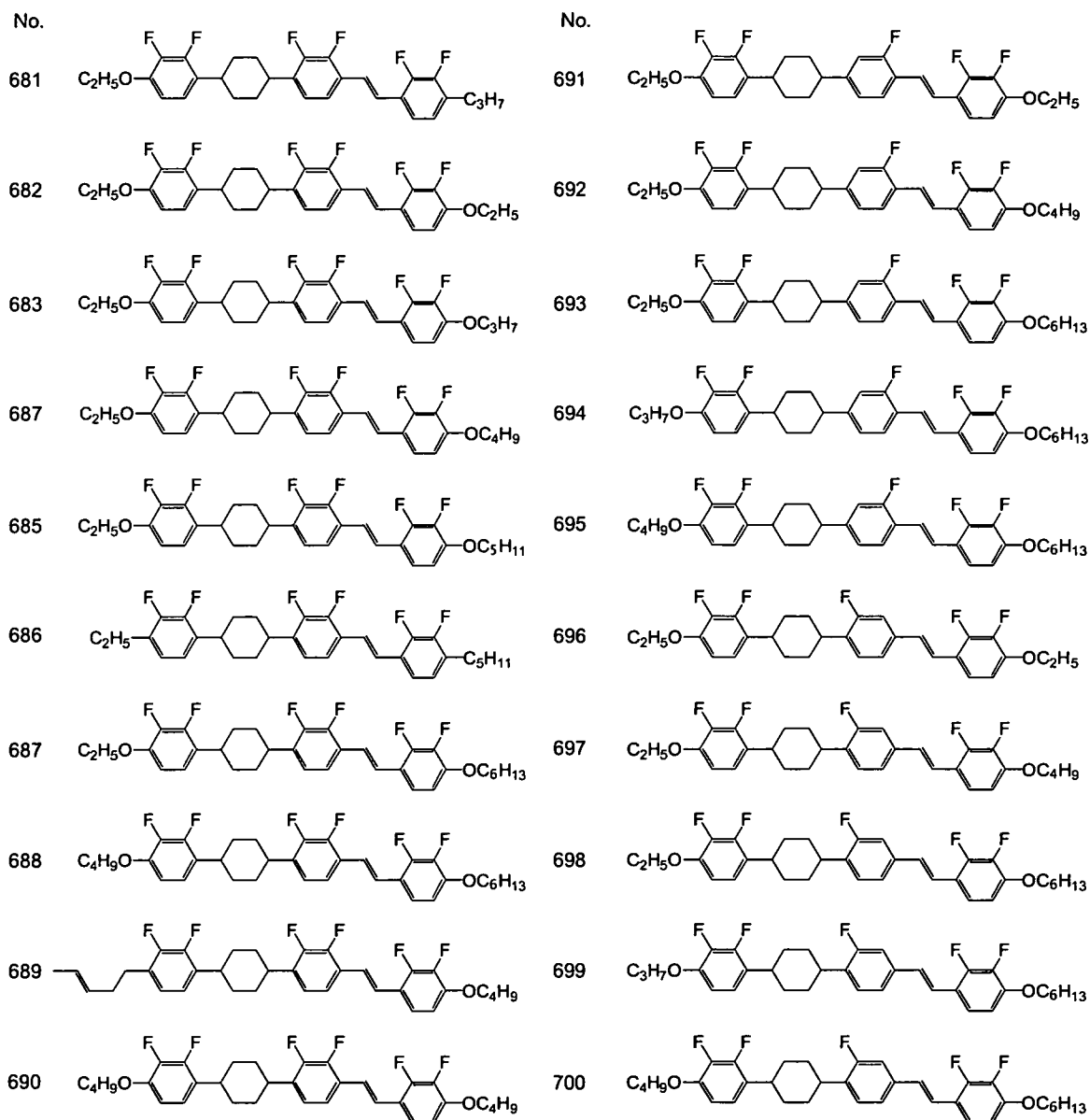






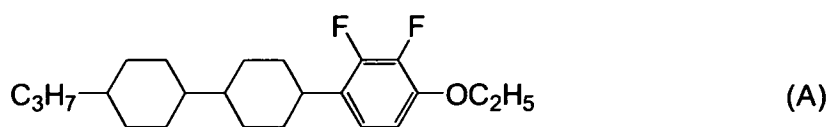
35527pif





[比較例 1]

合成反式-4-丙基-反式-4'-(2,3-二氟乙氧基苯基)-1,1'-雙環己基 (A) 作為比較例。



$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為反式-4-丙基-反式-4'-(2,3-二氟乙氧基苯基)-1,1'-雙環己基 (A)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 6.82 (dd, 1H), 6.64 (dd, 1H), 4.06 (q, 2H), 2.71 (tt, 1H), 1.89-1.79 (m, 4H), 1.79-1.69 (m, 4H), 1.45-1.26 (m, 14H), 1.20-1.04 (m, 4H), 0.90-0.79 (t, 3H).

化合物 (A) 的轉移溫度為如下所述。

轉移溫度：C 66.9 S_B 79.9 N 185.1 I

將作為上述母液晶 i 而記載的 5 種化合物混合，來製備具有向列相的母液晶 i。該母液晶 i 的物性為如下所述。

上限溫度 (T_{NI}) = 74.6°C；黏度 (η_{20}) = 18.9 mPa·s；光學異向性 (Δn) = 0.087；介電異向性 ($\Delta\epsilon$) = -1.3。

製備由 85 wt% 的該母液晶 i、與 15 wt% 所合成的反式-4-丙基-反式-4'-(2,3-二氟乙氧基苯基)-1,1'-雙環己基 (A) 所構成的液晶組成物 ii。測定所得液晶組成物 ii 的物性值，藉由將測定值外推而算出比較例化合物 (A) 的物性的外推值。該外推值為如下所述。

上限溫度 (T_{NI}) = 158.7°C；

光學異向性 (Δn) = 0.114；

介電異向性 ($\Delta\epsilon$) = -5.43；

[實例 9]

液晶性化合物 (No.27) 的物性

製備由 85 wt% 的母液晶 i、與 15 wt% 的實例 1 中獲得的 4-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己-1-烯基)-4'-乙

氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.27) 所構成的的液晶組成物 iii。測定所得液晶組成物 iii 的物性值，藉由將測定值外推而算出液晶性化合物 (No.27) 的物性的外推值。該外推值為如下所述。

上限溫度 (T_{NI}) = 169.3°C ;

光學異向性 (Δn) = 0.205 ;

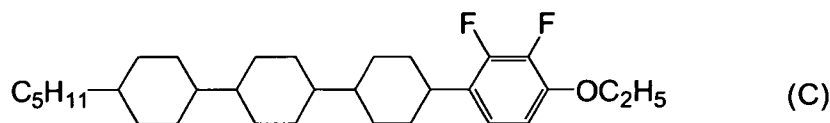
介電異向性 ($\Delta\epsilon$) = -10.55 ;

由此可知，液晶性化合物 (No.27) 是上限溫度 (T_{NI}) 高，可擴大光學異向性 (Δn)，且負地提高介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 的化合物。

另外可知，與比較例化合物 (A) 相比較，上述液晶性化合物 (No.27) 是上限溫度 (T_{NI}) 高，光學異向性 (Δn) 大，且介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 負地高的化合物。

[比較例 2]

合成反式-4-戊基-反式-4''-(2,3-二氟乙氧基苯基)-1,1',4',1''-三環己基 (C) 作為比較例。



$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為反式-4-戊基-反式-4''-(2,3-二氟乙氧基苯基)-1,1',4',1''-三環己基 (C)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 6.85 (td, 1H), 6.68 (td, 1H), 4.11 (q, 2H), 2.74 (tt, 1H), 1.93-1.82 (m, 4H), 1.82-1.68 (m, 8H),

1.48-1.37 (m, 4H), 1.37-0.82 (m, 27H).

化合物 (C) 的轉移溫度為如下所述。

轉移溫度：C 71.8 S_B 298.2 N 330.7 I

製備包含 97 wt% 的該母液晶 i、與 3 wt% 所合成的反式-4-戊基-反式-4''-(2,3-二氟乙氧基苯基)-1,1',4',1''-三環己基 (C) 所構成的液晶組成物 iv。測定所得液晶組成物 iv 的物性值，藉由將測定值外推而算出比較例化合物 (C) 的物性的外推值。其值為如下所述。

光學異向性 (Δn) = 0.137；

介電異向性 ($\Delta \epsilon$) = -1.86；

另外，液晶組成物 iv 的彈性常數 K_{33} 為 11.31 pN。

[實例 10]

液晶性化合物 (No.13) 的物性

製備由 95 wt% 的母液晶 i、與 5 wt% 的實例 7 中獲得的 4'-(反式-4-(2,3-二氟-4-(己氧基)苯基)環己基)-4-乙氧基-2,2',3-三氟聯苯 (No.13) 所構成的液晶組成物 v。測定所得液晶組成物 v 的物性值，藉由將測定值外推而算出液晶性化合物 (No.13) 的物性的外推值。其值為如下所述。

光學異向性 (Δn) = 0.201；

介電異向性 ($\Delta \epsilon$) = -8.85；

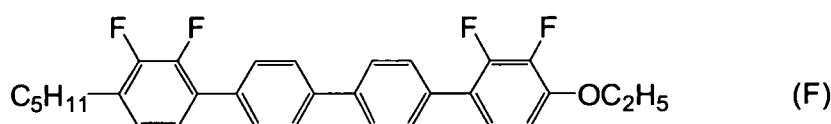
另外，液晶組成物 v 的彈性常數 K_{33} 為 16.00 pN。

由此可知，液晶性化合物 (No.13) 是可增大光學異向性 (Δn)，負地提高介電異向性 ($\Delta \epsilon$)，且增大彈性常數 K_{33} 的化合物。

另外可知，與比較例化合物 (C) 相比較，上述液晶性化合物 (No.13) 是光學異向性 (Δn) 大，負的介電異向性 ($\Delta \epsilon$) 高，且彈性常數 K_{33} 大的化合物。

[比較例 3]

合成與化合物 (D) 類似的 4-乙氧基-4'''-戊基-2'''',3'''',2,3-四氟-1,1',4',1'',4'',1'''-四聯苯 (F) 作為比較例。



$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4-乙氧基-4'''-戊基-2'''',3'''',2,3-四氟-1,1',4',1'',4'',1'''-四聯苯 (F)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.50 (q, 4H), 7.14 (d, 2H), 7.09 (td, 1H), 6.92 (d, 1H), 6.78 (t, 1H), 4.17 (q, 2H), 2.42 (tt, 1H), 1.86 (m, 4H), 1.53-1.17 (m, 13H), 1.08-0.98 (m, 2H), 0.89 (t, 3H).

化合物 (F) 的轉移溫度為如下所述。

轉移溫度：C 149.8 N 306.7 I

製備由 95 wt% 的母液晶 i、與 5 wt% 所合成的 4-乙氧基-4'''-戊基-2'''',3'''',2,3-四氟-1,1',4',1'',4'',1'''-四聯苯 (F) 所構成的液晶組成物 v。測定所得液晶組成物 v 的物性值，藉由將測定值外推而算出比較例化合物 (F) 的物性的外推值。其值為如下所述。

介電異向性 ($\Delta \epsilon$) = -6.05；

黏度 (η) = 118.2 mPa·s

另外，液晶組成物 v 的彈性常數 K_{33} 為 15.21 pN。

[實例 11]

液晶性化合物 (No.18) 的物性

製備由 90 wt% 的母液晶 i、與 5 wt% 的實例 7 中獲得的 4-乙氧基-2,3-二氟-4'-[2,3-二氟-4-(4-戊基環己基)苯氧基甲基]-1,1'-聯苯 (No.18) 所構成的液晶組成物 v。測定所得液晶組成物 v 的物性值，藉由將測定值外推而算出液晶性化合物 (No.18) 的物性的外推值。其值為如下所述。

介電異向性 ($\Delta\epsilon$) = -7.31；

黏度 (η) = 105.3 mPa·s

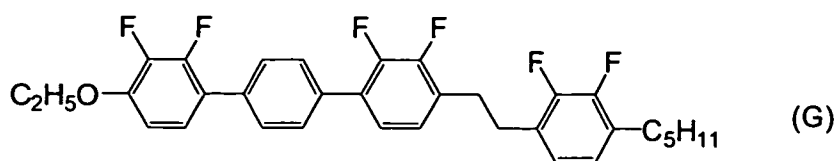
另外，液晶組成物 v 的彈性常數 K_{33} 為 16.03 pN。

由此可知，液晶性化合物 (No.18) 為熔點低，黏度 (η) 小，且可負地提高介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 的化合物。

另外可知，與比較例化合物 (F) 相比較，上述液晶性化合物 (No.18) 是負的介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 高，熔點低，黏度 (η) 小，且彈性常數 K_{33} 大的化合物。

[比較例 4]

合成與化合物 (E) 類似的 4-乙氧基-2,3,2'',3''-四氟-4''-(2,3-二氟-4-戊基苯基乙基)-1,1''-聯三苯 (G) 作為比較例。



$^1\text{H-NMR}$ 分析的化學位移 δ (ppm) 為如下所述，可鑑定出所得化合物為 4-乙氧基-2,3,2'',3''-四氟-4''-(2,3-二氟-4-戊基苯基乙基)-1,1''-聯三苯 (G)。此外，測定溶劑為 CDCl_3 。

化學位移 δ (ppm): 7.60 (m, 4H), 7.15 (m, 2H), 6.97 (m, 1H), 6.83 (m, 3H), 4.18 (q, 2H), 2.99 (m, 2H), 2.62 (t, 2H), 1.64-1.55 (m, 5H), 1.49 (t, 3H), 1.33 (m, 3H), 0.90 (t, 3H)。

化合物 (G) 的轉移溫度為如下所述。

轉移溫度：C 136.5 N 201.0 I

製備由 97 wt% 的母液晶 i、與 3 wt% 所合成的 4-乙氧基-2,3,2'',3''-四氟-4''-(2,3-二氟-4-戊基苯基乙基)-1,1''-聯三苯 (G) 所構成的液晶組成物 vi。測定所得液晶組成物 vi 的物性值，藉由將測定值外推而算出比較例化合物 (G) 的物性的外推值。其值為如下所述。

上限溫度 (T_{NI}) = 154.6°C；

介電異向性 ($\Delta\epsilon$) = -6.73；

另外，液晶組成物 vi 的彈性常數 K_{33} 為 14.57 pN。

[實例 12]

液晶性化合物 (No.107) 的物性

製備由 90 wt% 的母液晶 i、與 10 wt% 的實例 5 中獲得的反式-4-(4-((2,3-二氟-4-(己氧基)苯氧基)甲基)環己基)-4'-乙氧基-2,2',3,3'-四氟聯苯 (No.107) 所構成的液晶組成物 vii。測定所得液晶組成物 vii 的物性值，藉由將測定值外

推而算出液晶性化合物 (No.107) 的物性的外推值。其值為如下所述。

上限溫度 (T_{NI}) = 165.6°C ;

介電異向性 ($\Delta\epsilon$) = -9.26 ;

另外，液晶組成物 vii 的彈性常數 K_{33} 為 16.1 pN。

由此可知，液晶性化合物 (No.107) 為熔點低，上限溫度 (T_{NI}) 高，且可負地提高介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 的化合物。

另外可知，與比較例化合物 (G) 相比較，上述液晶性化合物 (No.107) 為上限溫度 (T_{NI}) 高，負的介電異向性 ($\Delta\epsilon$) 高，熔點低，黏度 (η) 小，且彈性常數 K_{33} 大的化合物。

[液晶組成物的實例]

以下，藉由實例對本發明中獲得的液晶組成物進行詳細說明。此外，實例中使用的液晶性化合物是基於下述表的定義而以記號表示。此外，表中，1,4-伸環己基的立體構型為反式構型。只要無特別說明，則各化合物的比例(百分率)為基於液晶組成物的總重量的重量百分率 (wt%)。於各實例的最後列出所得液晶組成物的特性值。

此外，各實例中使用的液晶性化合物的部分所記載的編號是與上述表示本發明的第一成分至第三成分中使用的液晶性化合物的化學式編號相對應，於不記載化學式編號而僅記載為「-」的情況，是指該化合物是不與該些成分相對應的其他化合物。

以下表示化合物的記號的表述方法。

表 使用記號的化合物的表述法



1) 左末端基 R-	記號	4) 環結構 -A _n -	記號
$C_nH_{2n+1}-$	n-		H
$C_nH_{2n+1}O-$	nO-		Ch
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}-$	mOn-		Dh
$CH_2=CH-$	V-		dh
$C_nH_{2n+1}-CH=CH-$	nV-		G
$CH_2=CH-C_nH_{2n}-$	Vn-		B
$C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-$	mVn-		Pv
$CF_2=CH-$	VFF-		B (F)
$CF_2=CH-C_nH_{2n}-$	VFFn-		B (F)
2) 右末端基 -R'			
$-C_nH_{2n+1}$	-n		B (F, F)
$-OC_nH_{2n+1}$	-On		B (F, 3F)
$-CH=CH_2$	-V		B (F, 3CL)
$-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	-Vn		B (2F, 3F)
$-C_nH_{2n}-CH=CH_2$	-nV		B (2F, 3CL)
$-CH=CF_2$	-VFF		
$-COOCH_3$	-EM e		
$-CN$	-C		
$-F$	-F		
$-Cl$	-CL		
$-OCF_3$	-OCF3		
$-CF_3$	-CF3		
3) 結合基 -Z _n -			
$-C_nH_{2n}-$	n		
$-COO-$	E		
$-CH=CH-$	V		
$-CH_2O-$	10		
$-CF_2O-$	X		
$-C\equiv C-$	T		
5) 表述例			
例1 60-W ChB (2F,3F)B (2F,3F)-O 2		例2 60-B (2F,3F)HB (2F,3F)B (2F,3F)-O 2	
例3 3-HHB-3		例4 5-HBB (2F,3CL)-O 2	

特性值的測定是依據以下方法進行。該些測定方法多

為記載於日本電子機械工業會規格 (Standard of Electric Industries Association of Japan) EIAJ•ED-2521A 中的方法、或將其修飾而成的方法。

(1) 向列相的上限溫度 (NI, °C)

於具備偏光顯微鏡的熔點測定裝置的加熱板上放置試料，以 1°C/min 的速度加熱。測定試料的一部分由向列相變化為各向同性液體時的溫度。以下，有時將向列相的上限溫度簡稱為「上限溫度」。

(2) 向列相的下限溫度 (TC, °C)

將具有向列相的試料於 0°C、-10°C、-20°C、-30°C 及 -40°C 的冷凍器中保管 10 天後，觀察液晶相。例如，當試料於 -20°C 下為向列相的狀態，而於 -30°C 下變化為結晶或層列相時，將 TC 記作 $\leq -20^\circ\text{C}$ 。以下，有時將向列相的下限溫度簡稱為「下限溫度」。

(3) 光學異向性 (Δn , 於 25°C 下測定)

使用波長為 589 nm 的光，利用目鏡上安裝有偏光板的阿貝折射計進行測定。首先，對主稜鏡的表面向一方向摩擦後，將試料滴加於主稜鏡上。接著，測定偏光方向與摩擦方向平行時的折射率 (n_{\parallel})、以及偏光方向與摩擦方向垂直時的折射率 (n_{\perp})。光學異向性的值 (Δn) 是根據 $(\Delta n) = (n_{\parallel}) - (n_{\perp})$ 的式子算出。

(4) 黏度 (整體黏度, η , 於 20°C 下測定, mPa•s)

測定時使用 E 型黏度計。

(5) 介電異向性 ($\Delta\epsilon$, 於 25°C 下測定)

於經充分清洗的玻璃基板上塗佈十八烷基三乙氧基矽烷 (0.16 mL) 的乙醇 (20 mL) 溶液。以旋轉器使玻璃基板旋轉後，於 150°C 下加熱 1 小時。由兩片玻璃基板來組裝成間隔 (液晶單元間隙) 為 20 μm 的 VA 元件。

利用相同的方法，於玻璃基板上製備聚醯亞胺的配向膜。對所得玻璃基板的配向膜進行摩擦處理後，組裝成兩片玻璃基板的間隔為 9 μm ，且扭轉角為 80 度的 TN 元件。

於所得 VA 元件中放入試料 (液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物)，施加 0.5 V (1 kHz, 正弦波)，測定液晶分子的長軸方向的介電常數 (ϵ_{\parallel})。

另外，於所得 TN 元件中放入試料 (液晶組成物、或液晶性化合物與母液晶的混合物)，施加 0.5 V (1 kHz, 正弦波)，測定液晶分子的短軸方向的介電常數 (ϵ_{\perp})。

介電異向性的值是根據 $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 的式子計算出。

該值為負的組成物是具有負介電異向性的組成物。

(6) 電壓保持率 (VHR, 於 25°C 及 100°C 下測定, %)

於具有聚醯亞胺配向膜，並且在兩片玻璃基板的間隔 (液晶單元間隙) 為 6 μm 的液晶單元中放入試料來製作 TN 元件。於 25°C 下，對該 TN 元件施加脈衝電壓 (5 V、60 微秒) 進行充電。以陰極射線示波器 (cathode ray oscilloscope) 來觀測對 TN 元件施加的電壓的波形，求出單位週期 (16.7 毫秒) 中的電壓曲線與橫軸之間的面積。卸除 TN 元件後，由所施加的電壓的波形同樣地求出面

積。電壓保持率 (%) 的值是根據 (電壓保持率) = (有 TN 元件時的面積值) / (無 TN 元件時的面積值) × 100 的值。

將以上述方式獲得的電壓保持率表示為「VHR-1」。接著，將該 TN 元件於 100°C 下加熱 250 小時。使該 TN 元件恢復至 25°C 後，利用與上述方法相同的方法測定電壓保持率。將進行該加熱試驗後所獲得的電壓保持率表示為「VHR-2」。此外，該加熱試驗為促進試驗，用作與 TN 元件的長時間耐久試驗相對應的試驗。

[實例 13]

6O-B(2F,3F)ChB(2F,3F)B(2F,3F)-O2 (No.27)	4%
6O-B(2F,3F)HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2 (No.7)	4%
3-HH-O1 (12-1)	8%
5-HH-O1 (12-1)	4%
3-HH-4 (12-1)	5%
3-HB(2F,3F)-O2 (6-1)	15%
5-HB(2F,3F)-O2 (6-1)	14%
2-HHB(2F,3F)-1 (7-1)	5%
3-HHB(2F,3F)-1 (7-1)	7%
3-HHB(2F,3F)-O2 (7-1)	14%
5-HHB(2F,3F)-O2 (7-1)	20%

NI = 74.4°C ; $\Delta n = 0.086$; $\eta = 31.5 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \epsilon = -4.6$.

[實例 14]

6O-B(2F,3F)ChB(F)B(2F,3F)-O2 (No.33)	4%
--------------------------------------	----

6O-B(2F,3F)HB(F)B(2F,3F)-O2	(No.13)	4%
3-HB-O1	(12-5)	10%
3-HH-4	(12-1)	5%
3-HB-V	(12-5)	5%
3-HB(2F,3F)-O2	(6-1)	12%
5-HB(2F,3F)-O2	(6-1)	12%
2-HHB(2F,3F)-1	(7-1)	12%
3-HHB(2F,3F)-1	(7-1)	12%
3-HHB(2F,3F)-O2	(7-1)	13%
5-HHB(2F,3F)-O2	(7-1)	5%
3-HHB-1	(13-1)	6%

NI=90.1°C ; $\Delta n=0.096$; $\eta=44.0 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta\varepsilon=-3.6$.

[實例 15]

6O-B(2F,3F)ChB(2F)B(2F,3F)-O2	(No.38)	3%
6O-B(2F,3F)HB(2F)B(2F,3F)-O2	(No.18)	3%
3-HB-O1	(12-5)	15%
3-HH-4	(12-1)	5%
3-HB(2F,3F)-O2	(6-1)	12%
5-HB(2F,3F)-O2	(6-1)	12%
2-HHB(2F,3F)-1	(7-1)	12%
3-HHB(2F,3F)-1	(7-1)	12%
3-HHB(2F,3F)-O2	(7-1)	13%
5-HHB(2F,3F)-O2	(7-1)	7%
6-HEB(2F,3F)-O2	(6-6)	6%

NI=83.1°C ; $\Delta n=0.093$; $\eta=38.3 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta\varepsilon=-3.8$.

[實例 16]

6O-B(2F,3F)O1HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2	(No.107)	4%
2O-B(2F,3F)ChB(2F,3F)2B(2F,3F)-O6	(No.487)	4%
3-HH-4	(12-1)	4%
3-HH-V	(12-1)	4%
3-H2B(2F,3F)-O2	(6-4)	22%
5-H2B(2F,3F)-O2	(6-4)	22%
5-HHB(2F,3CL)-O2	(7-12)	2%
3-HBB(2F,3F)-O2	(7-7)	9%
5-HBB(2F,3F)-O2	(7-7)	8%
V-HHB-1	(13-1)	6%
3-HHB-3	(13-1)	6%
3-HHEBH-3	(14-6)	3%
3-HHEBH-4	(14-6)	3%
3-HHEBH-5	(14-6)	3%

NI=93.3°C ; $\Delta n=0.104$; $\eta=33.0 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta\varepsilon=-4.3$.

[實例 17]

6O-B(2F,3F)H2B(2F,3F)B(2F,3F)-O2	(No.267)	3%
6O-B(2F,3F)2HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2	(No.67)	3%
3-HH-4	(12-1)	12%
3-HH-5	(12-1)	4%
3-HH-V	(12-1)	6%
3-HB-O2	(12-5)	12%

3-H2B(2F,3F)-O2	(6-4)	15%
5-H2B(2F,3F)-O2	(6-4)	15%
3-HHB(2F,3CL)-O2	(7-12)	5%
3-HBB(2F,3F)-O2	(7-7)	6%
5-HBB(2F,3F)-O2	(7-7)	9%
3-HHB-1	(13-1)	3%
3-HHB-3	(13-1)	4%
3-HHB-O1	(13-1)	3%

NI = 76.3°C ; $\Delta n = 0.093$; $\eta = 22.7 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \epsilon = -4.2$.

於 100 份的上述組成物中添加 0.25 份的 Op-05 時的間距為 60.3 μm 。

[實例 18]

6O-B(2F,3F)ChB(2F,3F)B(2F,3F)-O2 (No.27)		3%
6O-B(2F,3F)ChB(F)B(2F,3F)-O2 (No.33)		3%
3-HB-O1	(12-5)	10%
3-HH-4	(12-1)	5%
3-HH-V1	(12-1)	5%
3-HB(2F,3F)-O2	(6-1)	12%
5-HB(2F,3F)-O2	(6-1)	12%
2-HHB(2F,3F)-1	(7-1)	12%
3-HHB(2F,3F)-1	(7-1)	12%
3-HHB(2F,3F)-O2	(7-1)	7%
5-HHB(2F,3F)-O2	(7-1)	13%
3-HHB-1	(13-1)	6%

NI=90.7°C ; $\Delta n=0.096$; $\Delta \varepsilon=-3.7$; $\eta=40.4$ mPa·s.

[實例 19]

6O-B(2F,3F)HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2	(No.7)	4%
6O-B(2F,3F)HB(F)B(2F,3F)-O2	(No.13)	3%
2-BEB(F)-C	(5-14)	5%
3-BEB(F)-C	(5-14)	4%
4-BEB(F)-C	(5-14)	12%
1V2-BEB(F,F)-C	(5-15)	11%
3-HB-O2	(12-5)	10%
3-HH-4	(12-1)	3%
3-HHB-F	(3-1)	3%
3-HHB-1	(13-1)	8%
3-HHB-O1	(13-1)	4%
3-HBEB-F	(3-37)	4%
3-HHEB-F	(3-10)	7%
5-HHEB-F	(3-10)	5%
3-H2BTB-2	(13-17)	4%
3-H2BTB-3	(13-17)	4%
3-H2BTB-4	(13-17)	4%
3-HB(F)TB-2	(13-18)	5%

NI=96.1°C ; $\Delta n=0.145$; $\Delta \varepsilon=24.0$; $\eta=45.0$ mPa·s.

[實例 20]

6O-B(2F,3F)ChB(2F)B(2F,3F)-O2	(No.38)	4%
6O-B(2F,3F)HB(2F)B(2F,3F)-O2	(No.18)	4%

6O-B(2F,3F)O1HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2

	(No.107)	4%
1V2-BEB(F,F)-C	(5-15)	6%
3-HB-C	(5-1)	12%
2-BTB-1	(12-10)	10%
5-HH-VFF	(-)	30%
3-HHB-1	(13-1)	4%
VFF-HHB-1	(-)	8%
VFF2-HHB-1	(-)	5%
3-H2BTB-2	(13-17)	5%
3-H2BTB-3	(13-17)	4%
3-H2BTB-4	(13-17)	4%

NI=91.7°C ; $\Delta n=0.139$; $\Delta \epsilon=4.5$; $\eta=24.1$ mPa•s.

[實例 21]

6O-B(2F,3F)O1HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2

	(No.107)	4%
2O-B(2F,3F)ChB(2F,3F)2B(2F,3F)-O6	(No.487)	4%
2-HB-C	(5-1)	5%
3-HB-C	(5-1)	12%
3-HB-O2	(12-5)	11%
2-BTB-1	(12-10)	3%
3-HHB-F	(3-1)	4%
3-HHB-1	(13-1)	8%

3-HHB-O1	(13-1)	5%
3-HHB-3	(13-1)	14%
5-HHEB-F	(3-10)	4%
2-HHB(F)-F	(3-2)	7%
3-HHB(F)-F	(3-2)	7%
5-HHB(F)-F	(3-2)	7%
3-HHB(F,F)-F	(3-3)	5%

NI = 102.1°C ; $\Delta n = 0.105$; $\Delta \epsilon = 3.7$; $\eta = 24.4$ mPa·s.

[實例 22]

6O-B(2F,3F)H2B(2F,3F)B(2F,3F)-O2 (No.267)		3%
6O-B(2F,3F)2HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2 (No.67)		3%
5-HB-CL	(2-2)	13%
3-HH-4	(12-1)	12%
3-HH-5	(12-1)	4%
3-HHB-F	(3-1)	4%
3-HHB-CL	(3-1)	3%
4-HHB-CL	(3-1)	4%
3-HHB(F)-F	(3-2)	10%
4-HHB(F)-F	(3-2)	9%
5-HHB(F)-F	(3-2)	9%
7-HHB(F)-F	(3-2)	8%
5-HBB(F)-F	(3-23)	4%
1O1-HBBH-5	(14-1)	3%
3-HHBB(F,F)-F	(4-6)	2%

5-HHBB(F,F)-F	(4-6)	3%
3-HH2BB(F,F)-F	(4-15)	3%
4-HH2BB(F,F)-F	(4-15)	3%

NI = 119.4°C ; $\Delta n = 0.095$; $\Delta \epsilon = 2.7$; $\eta = 24.3 \text{ mPa}\cdot\text{s}$.

[實例 23]

6O-B(2F,3F)H2B(2F,3F)B(2F,3F)-O2 (No.267)		4%
6O-B(2F,3F)2HB(2F,3F)B(2F,3F)-O2 (No.67)		4%
5-HB-CL	(2-2)	3%
7-HB(F)-F	(2-3)	7%
3-HH-4	(12-1)	9%
3-HH-EMe	(12-2)	23%
3-HHEB-F	(3-10)	5%
5-HHEB-F	(3-10)	8%
3-HHEB(F,F)-F	(3-12)	10%
4-HGB(F,F)-F	(3-103)	5%
5-HGB(F,F)-F	(3-103)	6%
2-H2GB(F,F)-F	(3-106)	4%
3-H2GB(F,F)-F	(3-106)	5%
5-GHB(F,F)-F	(3-109)	7%

NI = 83.4°C ; $\Delta n = 0.072$; $\Delta \epsilon = 4.4$; $\eta = 26.5 \text{ mPa}\cdot\text{s}$.

雖然本發明已以較佳實施例揭露如上，然其並非用以限定本發明，任何熟習此技藝者，在不脫離本發明之精神和範圍內，當可作些許之更動與潤飾，因此本發明之保護範圍當視後附之申請專利範圍所界定者為準。

【圖式簡單說明】

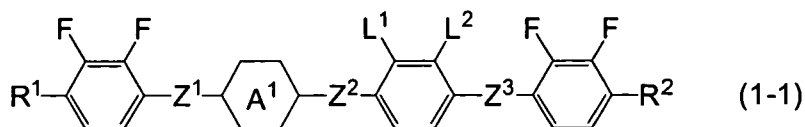
無。

【主要元件符號說明】

無。

七、申請專利範圍：

1. 一種化合物，其是由式 (1-1) 表示：



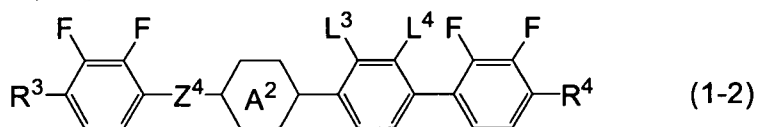
式 (1-1) 中， R^1 及 R^2 獨立地為氫、碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^1 為反式-1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘓啶-2,5-二基或吡啶-2,5-二基；

L^1 及 L^2 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且

Z^1 、 Z^2 及 Z^3 獨立地為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

2. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其是由式 (1-2) 表示：



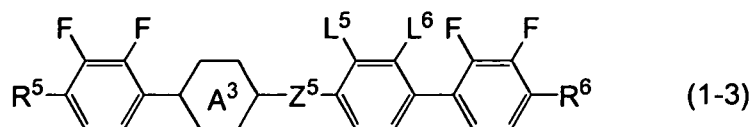
式 (1-2) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^2 為反式-1,4-伸環己基或 1,4-伸環己烯基；

L^3 及 L^4 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且

Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

3. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其是由式 (1-3) 表示：



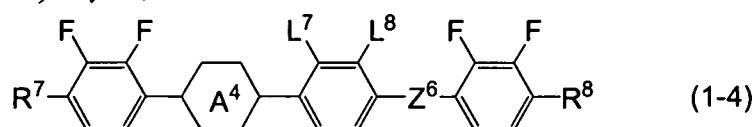
式 (1-3) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^3 為反式-1,4-伸環己基或 1,4-伸環己烯基；

L^5 及 L^6 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

4. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其是由式 (1-4) 表示：



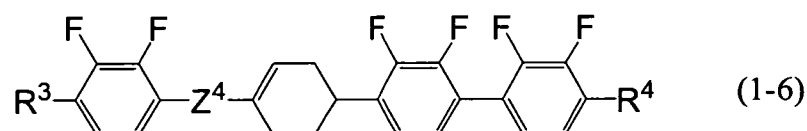
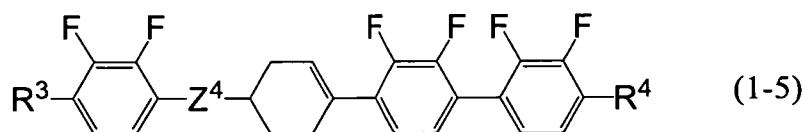
式 (1-4) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；

環 A^4 為反式-1,4-伸環己基或 1,4-伸環己烯基；

L^7 及 L^8 獨立地為氫或氟，該些中至少一個為氟；並且

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

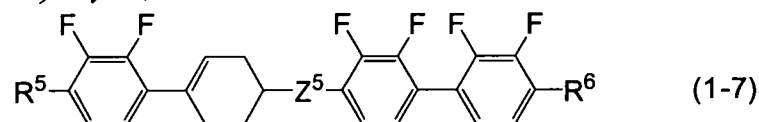
5. 如申請專利範圍第 2 項所述之化合物，其是由式 (1-5) 及 (1-6) 中的任一個表示：



式 (1-5) 及 (1-6) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

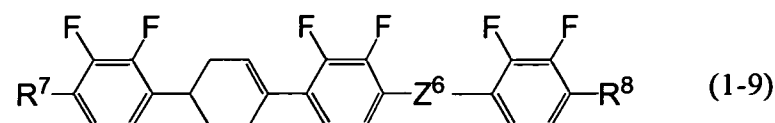
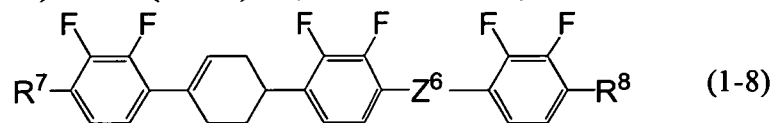
6. 如申請專利範圍第 3 項所述之化合物，其是由式 (1-7) 表示：



式 (1-7) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

7. 如申請專利範圍第 4 項所述之化合物，其是由式 (1-8) 及 (1-9) 中的任一個表示：

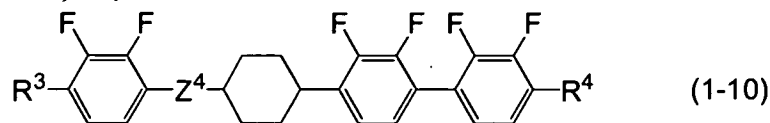


式 (1-8) 及 (1-9) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10

的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

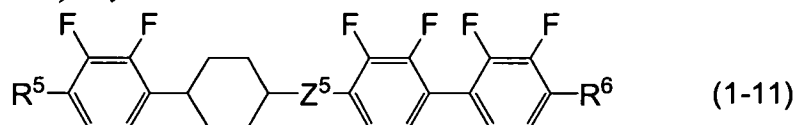
8. 如申請專利範圍第 2 項所述之化合物，其是由式 (1-10) 表示：



式 (1-10) 中， R^3 及 R^4 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^4 為單鍵、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

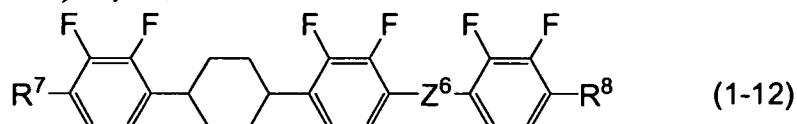
9. 如申請專利範圍第 3 項所述之化合物，其是由式 (1-11) 表示：



式 (1-11) 中， R^5 及 R^6 獨立地為碳數 1~10 的烷基、碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^5 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

10. 如申請專利範圍第 4 項所述之化合物，其是由式 (1-12) 表示：



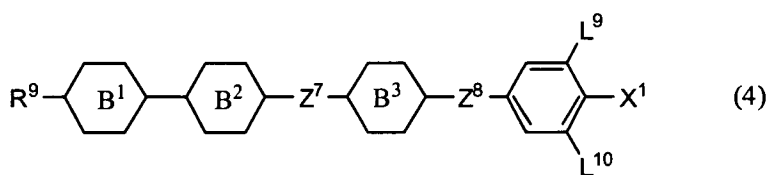
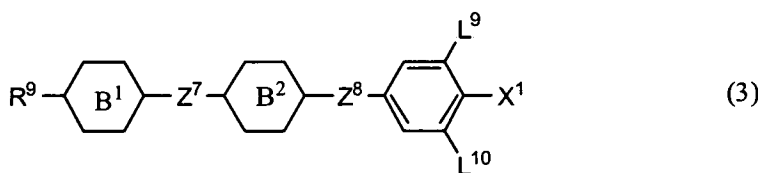
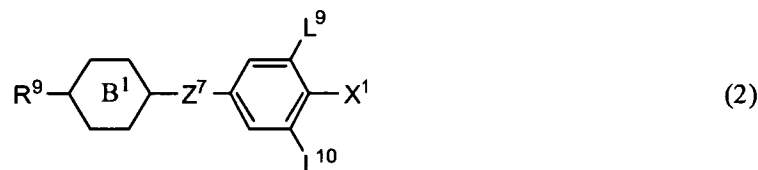
式 (1-12) 中， R^7 及 R^8 獨立地為碳數 1~10 的烷基、

碳數 2~10 的烯基、碳數 1~9 的烷氧基、碳數 2~9 的烷氧基烷基或碳數 2~9 的烯氧基；並且

Z^6 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-COO-$ 或 $-OCO-$ 。

11. 一種液晶組成物，其包含如申請專利範圍第 1 項所述之化合物。

12. 如申請專利範圍第 11 項所述之液晶組成物，其更包含選自式 (2)、(3) 及 (4) 分別所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式 (2) ~ (4) 中， R^9 獨立地為碳數 1~10 的烷基或碳數 2~10 的烯基，烷基及烯基中任意的氫可經氟取代，任意的 $-CH_2-$ 可經 $-O-$ 取代；

X^1 為氟、氯、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 或 $-OCF_2CHFCF_3$ ；

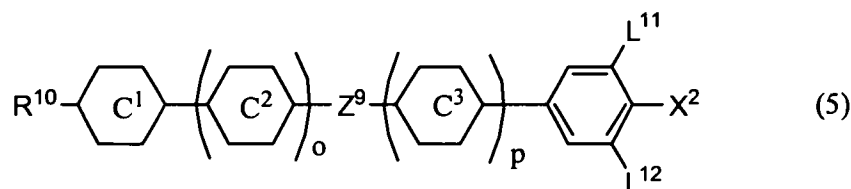
環 B^1 、環 B^2 及環 B^3 獨立地為 1,4-伸環己基、1,3-二噁烷-2,5-二基、嘧啶-2,5-二基、1-吡喃-2,5-二基、1,4-伸苯基、2-氟-1,4-伸苯基、3-氟-1,4-伸苯基或 3,5-二氟-1,4-伸苯

基；

Z^7 及 Z^8 獨立地為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 或單鍵；並且

L^9 及 L^{10} 獨立地為氫或氟。

13. 如申請專利範圍第 11 項所述之液晶組成物，其更包含選自式(5)所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式(5)中， R^{10} 為碳數 1~10 的烷基或碳數 2~10 的烯基，烷基及烯基中，任意的氫可經氟取代，任意的 $-CH_2-$ 可經 $-O-$ 取代；

X^2 為 $-C\equiv N$ 或 $-C\equiv C-C\equiv N$ ；

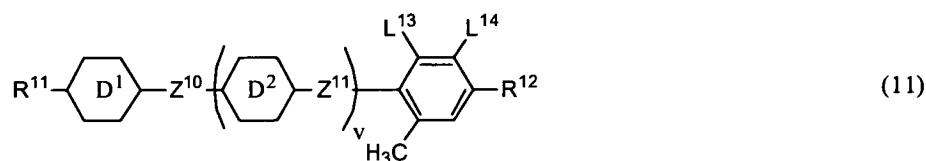
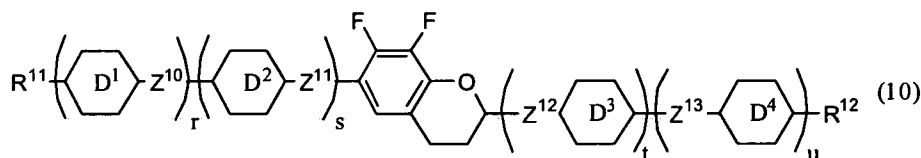
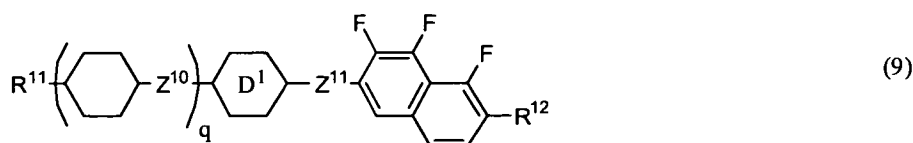
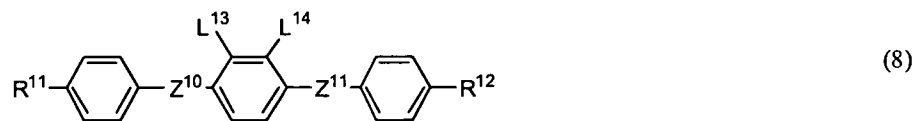
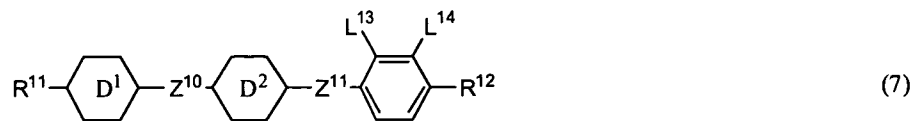
環 C^1 、環 C^2 及環 C^3 獨立地為 1,4-伸環己基、任意的氫可經氟取代的 1,4-伸苯基、1,3-二噁烷-2,5-二基、1-吡喃-2,5-二基或嘧啶-2,5-二基；

Z^9 為 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CH_2O-$ 或單鍵；

L^{11} 及 L^{12} 獨立地為氫或氟；並且

o 為 0、1 或 2， p 為 0 或 1， $o+p$ 為 0、1、2 或 3。

14. 如申請專利範圍第 11 項所述之液晶組成物，其更包含選自式(6)、(7)、(8)、(9)、(10)及(11)分別所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式(6)~(11)中， R^{11} 及 R^{12} 獨立地為碳數1~10的烷基或碳數2~10的烯基，烷基及烯基中，任意的氫可經氟取代，任意的 $-\text{CH}_2-$ 可經 $-\text{O}-$ 取代；

環 D^1 、環 D^2 、環 D^3 及環 D^4 獨立地為1,4-伸環己基、1,4-伸環己烯基、任意的氫可經氟取代的1,4-伸苯基、6-吡喃-2,5-二基或十氫-2,6-伸萘基；

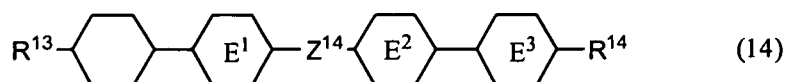
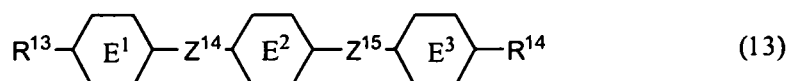
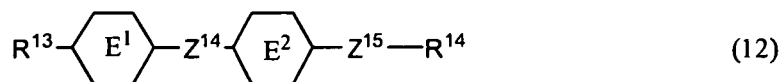
Z^{10} 、 Z^{11} 、 Z^{12} 及 Z^{13} 獨立地為 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ 或單鍵；

L^{13} 及 L^{14} 獨立地為氟或氯；

q 、 r 、 s 、 t 、 u 及 v 獨立地為0或1， $r+s+t+u$ 為1

或 2。

15. 如申請專利範圍第 11 項所述之液晶組成物，其更包含選自式 (12)、(13) 及 (14) 分別所表示的化合物組群中的至少一種化合物：



式 (12) ~ (14) 中， R^{13} 及 R^{14} 獨立地為碳數 1~10 的烷基或碳數 2~10 的烯基，該烷基及烯基中，任意的 $-\text{CH}_2-$ 可經 $-\text{O}-$ 取代；

環 E^1 、環 E^2 及環 E^3 獨立地為 1,4-伸環己基、嘧啶-2,5-二基、1,4-伸苯基、2-氟-1,4-伸苯基、3-氟-1,4-伸苯基或 2,5-二氟-1,4-伸苯基；

Z^{14} 及 Z^{15} 獨立地為 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 或單鍵。

16. 如申請專利範圍第 12 項所述之液晶組成物，其更包含選自式(5)所表示的化合物組群中的至少一種化合物。

17. 如申請專利範圍第 14 項所述之液晶組成物，其更包含選自式 (12)、(13) 及 (14) 分別所表示的化合物組群中的至少一種化合物。

18. 如申請專利範圍第 11 項所述之液晶組成物，其更

包含至少一種光學活性化合物及/或可聚合的化合物。

19. 如申請專利範圍第 11 項所述之液晶組成物，其更包含至少一種抗氧化劑及/或紫外線吸收劑。

20. 一種液晶顯示元件，其包含如申請專利範圍第 11 項所述之液晶組成物。