

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2017年6月1日(01.06.2017)



(10) 国際公開番号
WO 2017/090384 A1

- (51) 国際特許分類:
C07C 43/225 (2006.01) C09K 19/30 (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01) G02F 1/13 (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01) G02F 1/1337 (2006.01)
 - (21) 国際出願番号: PCT/JP2016/082404
 - (22) 国際出願日: 2016年11月1日(01.11.2016)
 - (25) 国際出願の言語: 日本語
 - (26) 国際公開の言語: 日本語
 - (30) 優先権データ:
特願 2015-228678 2015年11月24日(24.11.2015) JP
 - (71) 出願人: D I C 株式会社 (DIC CORPORATION)
[JP/JP]; 〒1748520 東京都板橋区坂下三丁目3番5号 Tokyo (JP).
 - (72) 発明者: 野瀬 清香 (NOSE Sayaka); 〒3628577 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472番地1 D I C 株式会社 埼玉工場内 Saitama (JP). 須藤 豪 (SUDO Go); 〒3628577 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472番地1 D I C 株式会社 埼玉工場内 Saitama (JP). 小坂 翔太 (KOSAKA Shota); 〒3628577 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472番地1 D I C 株式会社 埼玉工場内 Saitama (JP). 楠本 哲生 (KUSUMOTO Tetsuo); 〒3628577 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472番地1 D I C 株式会社 埼玉工場内 Saitama (JP). 櫻井 宗矩 (SAKURAI Munenori); 〒3628577
 - 埼玉県北足立郡伊奈町大字小室4472番地1 D I C 株式会社 埼玉工場内 Saitama (JP).
 - (74) 代理人: 河野 通洋 (KONO Michihiro); 〒1038233 東京都中央区日本橋三丁目7番20号 D I C 株式会社内 Tokyo (JP).
 - (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
 - (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- 添付公開書類:
— 国際調査報告 (条約第21条(3))



WO 2017/090384 A1

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

(54) 発明の名称: 液晶性化合物、液晶組成物および表示素子

(57) Abstract: The present invention addresses the problem of providing: a liquid crystal compound which has a large negative $\Delta\epsilon$, a high T_{ni} , a small η , and a large Δn , and can be easily synthesized; a liquid crystal composition which has a large refractive-index anisotropy (Δn), and a negative dielectric-constant anisotropy ($\Delta\epsilon$) having a large absolute value, is applicable to a narrow-gap LCD, and can be driven by a low voltage; and a liquid crystal display element of VA type, PSA type, PSVA type, or the like. The present invention provides a compound represented by general formula (i), a liquid crystal composition using the same, and a liquid crystal display element using the same.

(57) 要約: 本願発明が解決しようとする課題は、負の $\Delta\epsilon$ が大きく、 T_{ni} が高く、 η が小さく、 Δn が大きく、かつ簡便に合成可能な液晶化合物を提供し、併せて屈折率異方性 (Δn) が大きく、絶対値が大きな負の誘電率異方性 ($\Delta\epsilon$) を有する、狭ギャップLCDに対応可能で、低電圧駆動を可能とする液晶組成物及びVA型やPSA型、PSVA型等の液晶表示素子を提供することである。本発明は、一般式 (i) で表される化合物、これを用いた液晶組成物、これを用いた液晶表示素子を提供する。

明 細 書

発明の名称：液晶性化合物、液晶組成物および表示素子

技術分野

[0001] 本発明は液晶性化合物に関する。

背景技術

[0002] 液晶表示素子は、時計、電卓をはじめとして、各種測定機器、自動車用パネル、ワードプロセッサ、電子手帳、プリンター、コンピューター、テレビ、時計、広告表示板等に用いられるようになってきている。液晶表示方式としては、その代表的なものにTN（ツイステッド・ネマチック）型、STN（スーパー・ツイステッド・ネマチック）型、TFT（薄膜トランジスタ）を用いたVA（垂直配向）型やIPS（イン・プレーン・スイッチング）型またはFFS（フリッジ・フィールド・スイッチング）型等がある。液晶組成物に求められる主な特性としては、（1）水分、空気、熱、光などの外的刺激に対して安定であること、（2）室温を中心としてできるだけ広い温度範囲で液晶相を示していること、（3）低粘性であること、および（4）駆動電圧が低いことの4つが挙げられ、個々の表示素子にとって誘電率異方性（ $\Delta \epsilon$ ）や屈折率異方性（ Δn ）等を最適な値とするために、液晶組成物は数種類から数十種類の化合物から構成されていることが一般的である。

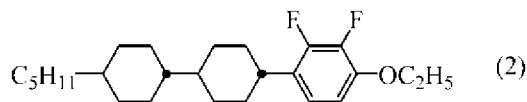
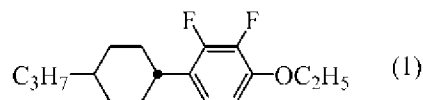
[0003] 上記の液晶組成物の特性のうち、 $\Delta \epsilon$ については、正の値である組成物と負の値である組成物が各々使い分けられている。これらのうち、 $\Delta \epsilon$ が負の値を示す液晶材料を用いる表示方式としては、ECB型、VA型、更にFFS型などが挙げられる。中でも、VA型表示方式は、テレビ等の用途に使用され、高速かつ広視野角であることが要求される。この際に液晶組成物に対しては、低電圧駆動、高速応答及び広い動作温度範囲が要求される。すなわち、 $\Delta \epsilon$ が負で絶対値が大きく、粘度（ η ）が低く、高いネマチック相－等方性液体相転移温度（ T_{ni} ）を示すことが要求される。また、屈折率異方性（ Δn ）とセルギャップ（ d ）との積である $\Delta n \times d$ の設定から、液晶組成

物の Δn は d に合わせて適当な範囲に調節する必要があるが、近年高速応答に対応するためにセルギャップは小さく設計される傾向にあり、この場合は液晶組成物の Δn を大きくすることが要求される。

[0004] また、高速応答性や高いコントラストが得られる液晶表示素子としてPSA (Polymer Sustained Alignment) 型液晶表示装置、PSVA (Polymer Stabilised Vertical Alignment) 型液晶表示装置が開発されている。PSAやPSVA型液晶表示素子は、非重合性液晶性組成物及び重合性化合物からなる重合性化合物含有液晶組成物を基板間に配した状態で、場合により基板間に電圧を印加して液晶分子を配向させ、配向した状態で紫外線等を照射することにより、重合性化合物を重合させて液晶の配向状態を硬化物に記憶させている。またIPS (インプレーンスイッチング) 型液晶表示素子に適用する場合は、無印加状態で硬化させることにより作成できる。このような液晶表示素子に適用する場合は、紫外線に強い組成物が必要である。

[0005] 上記の要求を満たすべく、種々の液晶化合物がこれまでに開発されてきた。 $\Delta \epsilon$ が負の液晶材料として、以下のような2, 3-ジフルオロフェニレン骨格を有する液晶化合物が提案されている (特許文献1参照)。

[0006] [化1]

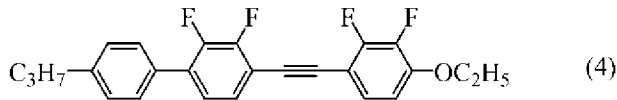
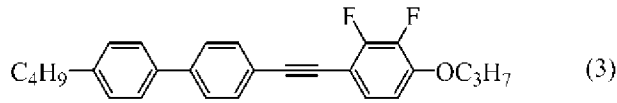


[0007] しかしながら、このような化合物は、比較的 $\Delta \epsilon$ の絶対値 ($|\Delta \epsilon|$) は大きいものの、 Δn が小さいため、 d を小さくして高速応答化を実現するには有効ではなく、また T_{ni} が低く、これら化合物を液晶組成物に添加すると液晶組成物の T_{ni} が低下してしまう問題点を有していた。

[0008] また、 T_{ni} が高く、かつ Δn が大きい化合物としては、下記のようなトラン骨格を有する化合物が知られているが、粘度 (η) が高く、高速応答の

要求には不十分であった（非特許文献 1、2 参照）。

[0009] [化2]



[0010] 以上より、 $|\Delta\varepsilon|$ が大きく、 η が小さく、且つ Δn が大きな液晶化合物が望まれている。また、TFT用液晶組成物に使用することから、微量不純物が少なく安価に製造できる製造方法及び製造中間体の開発が求められていた。

先行技術文献

特許文献

[0011] 特許文献1：特願平1-56566

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0012] 本願発明が解決しようとする課題は、負の $\Delta\varepsilon$ が大きく、 Tn_i が高く、 η が小さく、 Δn が大きく、かつ簡便に合成可能な液晶化合物を提供し、併せて屈折率異方性（ Δn ）が大きく、絶対値が大きな負の誘電率異方性（ $\Delta\varepsilon$ ）を有する、狭ギャップLCDに対応可能で、低電圧駆動を可能とする液晶組成物及びVA型やPSA型、PSVA型等の液晶表示素子を提供することである。

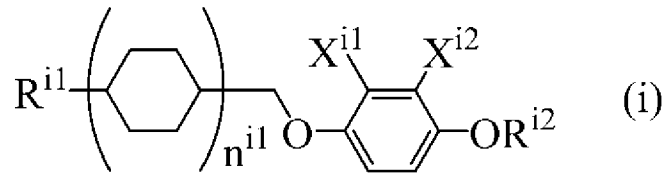
課題を解決するための手段

[0013] 本願発明者は上記課題を解決するために鋭意検討した結果、本願発明の完成に至った。

すなわち、本発明は、一般式（i）

[0014]

[化3]



[0015] (式中、 R^{i1} は炭素原子数3から15のアルケニル基を表すが、アルケニル基中に存在する1個の $-\text{CH}_2-$ 又は隣接していない2個以上の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 又は環構造により置き換えられても良く、

R^{i2} は炭素原子数1から15のアルキル基を表すが、アルキル基中に存在する1個の $-\text{CH}_2-$ 又は隣接していない2個以上の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 又は環構造により置き換えられても良く、

n^{i1} は、1、2又は3を表し、

X^{i1} 及び X^{i2} は各々独立して、水素原子、フッ素原子、塩素原子、トリフルオロメチル基又はトリフルオロメトキシ基を表す。)で表される化合物を提供し、併せて当該化合物を含有する液晶組成物及び表示素子を提供する。

発明の効果

[0016] 本発明に係る液晶化合物は、粘度が低く、アイソトロピック転移温度が高く、相溶性が高く、屈折率異方性が高く、熱や光による劣化を起こしにくい。本発明に係る液晶化合物を用いた液晶組成物を用いると高速応答液晶表示素子の提供が可能となる。

発明を実施するための形態

[0017] 一般式(i)において、 R^{i1} は粘度を低下させる為には、炭素原子数3～8のアルケニル基であることが好ましく、炭素原子数3～5のアルケニル基であることが特に好ましい。また、直鎖状であることが好ましい。

[0018] R^{i2} は粘度を低下させる為には、炭素原子数1～8のアルキル基又は炭素原子数2～8のアルケニル基であることが好ましく、炭素原子数1～5のア

ルキル基又は炭素原子数2～5のアルケニル基であることが特に好ましい。また、直鎖状であることが好ましい。なお、他の液晶成分との混和性を上昇させるためには、 R^{i1} 及び R^{i2} が異なることが好ましく、炭素原子数が異なることが好ましい。

[0019] n^{i1} は、1又は2が好ましい。

[0020] X^{i1} 及び X^{i2} は、ともに水素原子であるか、ともにフッ素原子であるか、一方が水素原子で他方がフッ素原子であることが好ましい。

[0021] 分子内にフッ素原子が、0～2個あることが好ましく、 $\Delta\varepsilon$ が負の化合物としては2個であることが好ましく、 $\Delta\varepsilon$ が-1～1程度である中性の化合物としては0又は1個であることが好ましい。

[0022] 一般式(i)において、 n^{i1} が1または2であり、 X^{i1} 及び X^{i2} が各々独立して、フッ素原子、塩素原子、トリフルオロメチル基又はトリフルオロメトキシ基であることが好ましく、一般式(i)において、 n^{i1} が2であり、 X^{i1} 及び X^{i2} が各々独立して、フッ素原子、塩素原子、トリフルオロメチル基又はトリフルオロメトキシ基であることがさらに好ましい。特に、 n^{i1} が2であり、 X^{i1} 及び X^{i2} がともにフッ素原子であることが特に好ましい。

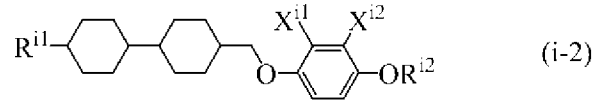
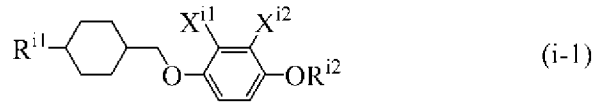
[0023] 負の $\Delta\varepsilon$ を示し、かつ $|\Delta\varepsilon|$ を大きくするためには、 X^{i1} 及び X^{i2} が各々独立して、フッ素原子、塩素原子、トリフルオロメチル基又はトリフルオロメトキシ基であることが好ましい。また、 Tn_i を高くするためには、 n^{i1} が2又は3であることが好ましい。また、粘度を低くするためには、 n^{i1} が1又は2であり、かつ X^{i1} 及び X^{i2} が各々独立して水素原子またはフッ素原子であることが好ましい。また、 Δn を大きくするためには、 n^{i1} が2又は3であることが好ましい。

[0024] 本発明の一般式(i)で表される化合物の好ましい化合物の具体例を以下に示すが、本発明はこれらに限定されるものではない。

[0025] 一般式(i)で表される化合物は、一般式(i-1)～(i-2)で表される化合物が好ましい。

[0026]

[化4]



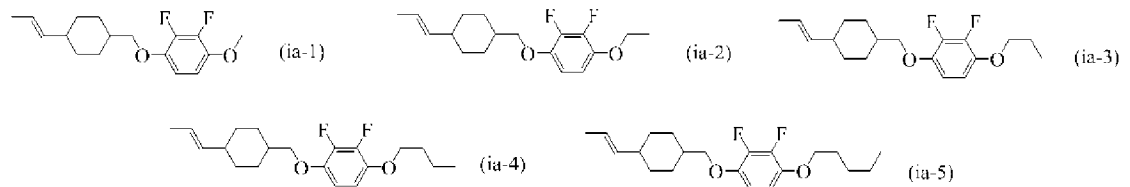
[0027] (式中、 R^{i1} 、 R^{i2} 、 X^{i1} 及び X^{i2} は一般式(i)における R^{i1} 、 R^{i2} 、 X^{i1} 及び X^{i2} と同じ意味を表す。)

R^{i1} は粘度を低下させる為には、炭素原子数3~8のアルケニル基であることが好ましく、炭素原子数3~5のアルケニル基であることが特に好ましい。また、直鎖状であることが好ましい。

[0028] R^{i2} は粘度を低下させる為には、炭素原子数1~8のアルキル基又は炭素原子数2~8のアルケニル基であることが好ましく、炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基であることが特に好ましい。また、直鎖状であることが好ましい。なお、他の液晶成分との混和性を上昇させるためには、 R^{i1} 及び R^{i2} が異なることが好ましく、炭素原子数が異なることが好ましい。

[0029] 一般式(i-1)で表される化合物(一般式(i a)と同義である。)としては、以下の一般式(i a-1)~(i a-5)が特に好ましい。

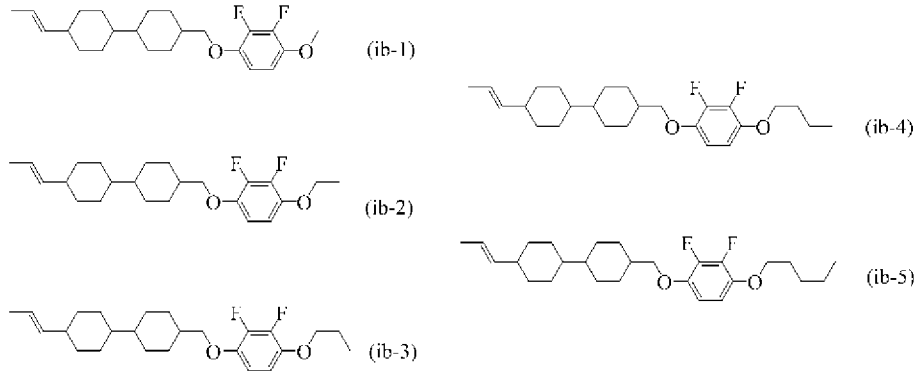
[0030] [化5]



[0031] 一般式(i-2)で表される化合物(一般式(i b)と同義である。)としては、以下の一般式(i b-1)~(i b-5)が特に好ましい。

[0032]

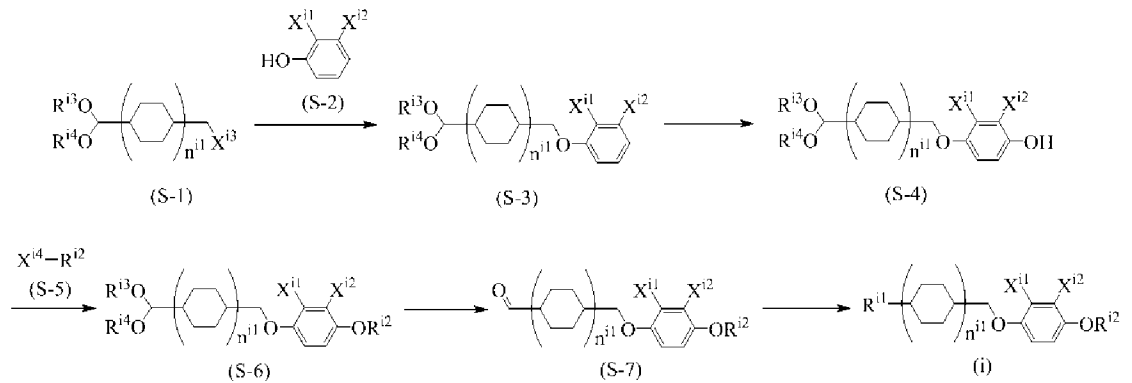
[化6]



[0033] 本発明において、一般式 (i) で表される化合物は、以下のようにして製造することができる。勿論本発明の趣旨及び適用範囲は、これら製造例により制限されるものではない。

(製法1) 一般式 (i) で表される化合物の合成方法 (1)

[0034] [化7]



[0035] (式中、 R^{i1} 、 R^{i2} 、 X^{i1} 、 X^{i2} 及び n^{i1} は前記一般式 (i) における R^{i1} 、 R^{i2} 、 X^{i1} 、 X^{i2} 及び n^{i1} と同じ意味を表し、 R^{i3} および R^{i4} はそれぞれ独立的にメチル基、エチル基またはプロピル基を表すか、 R^{i3} 及び R^{i4} は環状の構造となり $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 又は $-CH_2C(CH_3)_2CH_2-$ を表す。)

一般式 (S-1) で表される化合物に一般式 (S-2) で表される化合物を反応させることによって一般式 (S-3) で表される化合物を得るが、一般式 (S-1) における X^{i3} の置換基の選択により幾つかの反応を用いることが可能である。

[0036] X^{i3} が塩素、臭素、よう素、ベンゼンスルホニルオキシ基、p-トルエンスルホニルオキシ基、メタンスルホニルオキシ基又はトリフルオロメタンスルホニルオキシ基を表す化合物を用いた場合、一般式(S-2)の水酸基を塩基によりフェノラートとして一般式(S-1)と反応させる方法を用いることができる。この場合に使用する塩基としては金属水素化物、金属炭酸塩、金属リン酸塩、金属水酸化物、金属カルボン酸塩、金属アミド及び金属等を挙げる事ができ、中でもアルカリ金属水素化物、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属炭酸塩、アルカリ金属水酸化物、アルカリ金属アミド及びアルカリ金属が好ましく、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属水素化物及びアルカリ金属炭酸塩は更に好ましい。アルカリ金属水素化物としては水素化リチウム、水素化ナトリウム及び水素化カリウムを、アルカリ金属リン酸塩としてはリン酸三カリウムを、アルカリ金属炭酸塩としては炭酸ナトリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸セシウム、炭酸カリウム及び炭酸水素カリウムをそれぞれ好ましく挙げる事ができる。

[0037] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、炭化水素系溶媒、芳香族系溶媒及び極性溶媒等を好ましく用いる事ができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテル及びt-ブチルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロエタン及び四塩化炭素等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタン及びオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼン及びジクロロベンゼン等を、極性溶媒としてはN,N-ジメチルホルムアミド、N-メチルピロリドン、ジメチルスルホキシド及びスルホラン等を好例として挙げる事ができる。中でも、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテル等のエーテル系溶媒及びN,N-ジメチルホルムアミド等の極性溶媒がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。

- [0038] 反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、0°Cから150°Cが好ましく、30°Cから120°Cがより好ましい。なお、生成したフェノートを一度単離してから一般式(S-5)で表される化合物と反応させてもよく、単離せずに反応させてもよいが、作業の容易さから単離せずに反応させたほうがよい。
- [0039] Xⁱ³が水酸基を表す化合物を用いた場合、光延反応を用いることが可能である。光延反応はアルコールと活性プロトンを持つ多種多様な求核剤とを脱水的に縮合させる反応であり、トリフェニルホスフィンと、アゾジカルボン酸誘導体又はマレイン酸誘導体を組み合わせて用いる。具体的には、一般式(S-2)で表される化合物と一般式(S-1)で表されるアルコール誘導体を三置換ホスフィン誘導体及びアゾジカルボン酸誘導体存在下に反応させることにより一般式(S-3)で表される化合物を得る。
- [0040] 三置換ホスフィン誘導体としては、トリアルキルホスフィン、トリフェニルホスフィン等が挙げられるがトリフェニルホスフィンが好ましい。又、アゾジカルボン酸誘導体としては種々の化合物が用いられており、アゾジカルボン酸誘導体に替えてマレイン酸誘導体を用いることが可能であるが、取り扱いの容易さよりトリフェニルホスフィンとアゾジカルボン酸誘導体の組み合わせが望ましい。アゾジカルボン酸誘導体としてはジエチル アゾジカルボキシレート、ジイソプロピル アゾジカルボキシレート、テトラメチルアゾジカルボキシアミド、テトラプロピル アゾジカルボキシアミド、1,1'-(アゾジカルボニル)ジピペリジンが挙げられるが、入手の容易さよりジエチル アゾジカルボキシレートおよびジイソプロピル アゾジカルボキシレートが好ましく、取り扱いの容易さよりジイソプロピル アゾジカルボキシレートがより好ましい。
- [0041] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、炭化水素系溶媒および芳香族系溶媒等を好ましく用いることができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよびt-ブチ

ルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロエタンおよび四塩化炭素等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼンおよびジクロロベンゼン等を好例として挙げる事ができる。中でも、テトラヒドロフラン等のエーテル系溶媒およびトルエン等の芳香族系溶媒等がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。

[0042] 反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、0°Cから150°Cが好ましく、0°Cから30°Cがより好ましい。

[0043] 一般式(S-3)で表される化合物を酸化することにより一般式(S-4)で表される化合物を得ることができる。この酸化は、有機金属試薬により脱プロトン化した後、ほう酸トリアルキルと反応させてほう素化合物とし、その後酸化剤を作用させることによって行うことができる。反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒および炭化水素系溶媒等を挙げる事ができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよびt-ブチルメチルエーテル等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等が挙げられ、中でもテトラヒドロフランが好ましい。有機金属試薬としてはn-ブチルリチウム、sec-ブチルリチウム、tert-ブチルリチウム、メチルリチウム、リチウムジイソプロピルアミドおよびリチウム 2,2,4,4-テトラメルピペリジド等を挙げる事ができ、入手および取り扱いの容易さからn-ブチルリチウム、sec-ブチルリチウムおよびリチウムジイソプロピルアミドが好ましく、効率的に脱プロトン化が可能であるsec-ブチルリチウムおよびリチウムジイソプロピルアミドがより好ましい。また、脱プロトン化の際には、上記有機金属試薬と共にカリウム-t-ブトキシド、テトラメチルエチレンジアミン等の塩基を添加剤として用いてもよい。脱プロトン化の際の反応温度は-100°Cから-20°C

が好ましく、 -78°C から -40°C がより好ましい。

[0044] ほう酸トリアルキルとしては、ほう酸トリメチル、ほう酸トリエチル、ほう酸トリプロピルおよびほう酸トリスプロピルを用いるのが好ましいが、入手および取り扱いの容易さからほう酸トリメチルおよびほう酸トリスプロピルがより好ましい。ほう酸トリアルキルと有機金属試薬の組み合わせとしては、上記で挙げたいずれの組み合わせも可能であるが、*sec*-ブチルリチウムとほう酸トリメチルの組み合わせ、およびリチウム ジイソプロピルアミドとほう酸トリスプロピルの組み合わせが好ましく、リチウム ジイソプロピルアミドとほう酸トリスプロピルの組み合わせがより好ましい。ほう素化の際の反応温度は -100°C から -20°C が好ましく、 -78°C から -40°C がより好ましい。得られたほう素化合物は一度単離してもよく、単離せずそのまま酸化剤と反応させてもよい。また、得られたほう素化合物を加水分解してほう酸化合物へと変換した後に酸化剤と反応させても構わない。

[0045] 酸化剤としては、過酸化水素水、過酢酸または過ギ酸を用いるのが好ましい。反応温度は -78°C から 70°C が好ましく、 0°C から 50°C がより好ましい。また、酸化剤との反応時には、溶媒に水が含まれていても構わない。

[0046] 一般式 (S-4) で表される化合物に一般式 (S-5) で表される化合物を反応させることによって一般式 (S-6) で表される化合物を得るが、一般式 (S-5) における X^{i4} の置換基の選択により幾つかの反応を用いることが可能である。

[0047] X^{i3} が塩素、臭素、よう素、ベンゼンスルホニルオキシ基、*p*-トルエンスルホニルオキシ基、メタンスルホニルオキシ基又はトリフルオロメタンスルホニルオキシ基を表す化合物を用いた場合、一般式 (S-4) の水酸基を塩基によりフェノラートとして一般式 (S-5) と反応させる方法を用いることができる。この場合に使用する塩基としては金属水素化物、金属炭酸塩、金属リン酸塩、金属水酸化物、金属カルボン酸塩、金属アミド及び金属等を挙げることができ、中でもアルカリ金属水素化物、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属炭酸塩、アルカリ金属水酸化物、アル

カリ金属アミド及びアルカリ金属が好ましく、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属水素化物及びアルカリ金属炭酸塩は更に好ましい。アルカリ金属水素化物としては水素化リチウム、水素化ナトリウム及び水素化カリウムを、アルカリ金属リン酸塩としてはリン酸三カリウムを、アルカリ金属炭酸塩としては炭酸ナトリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸セシウム、炭酸カリウム及び炭酸水素カリウムをそれぞれ好ましく挙げるができる。

[0048] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、炭化水素系溶媒、芳香族系溶媒及び極性溶媒等を好ましく用いることができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテル及びt-ブチルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロエタン及び四塩化炭素等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタン及びオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼン及びジクロロベンゼン等を、極性溶媒としてはN,N-ジメチルホルムアミド、N-メチルピロリドン、ジメチルスルホキシド及びスルホラン等を好例として挙げるができる。中でも、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテル等のエーテル系溶媒及びN,N-ジメチルホルムアミド等の極性溶媒がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。

[0049] 反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、0°Cから150°Cが好ましく、30°Cから120°Cがより好ましい。なお、生成したフェノラートを一度単離してから一般式(S-5)で表される化合物と反応させてもよく、単離せずに反応させてもよいが、作業の容易さから単離せずに反応させたほうがよい。

[0050] X^{i4} が水酸基を表す化合物を用いた場合、光延反応を用いることが可能である。光延反応はアルコールと活性プロトンを持つ多種多様な求核剤とを脱水的に縮合させる反応であり、トリフェニルホスフィンとアゾジカルボン酸

誘導体又はマレイン酸誘導体を組み合わせて用いる。具体的には、一般式（S-4）で表される化合物と一般式（S-5）で表されるアルコール誘導体を三置換ホスフィン誘導体及びアゾジカルボン酸誘導体存在下に反応させることにより一般式（S-6）で表される化合物を得る。

[0051] 三置換ホスフィン誘導体としては、トリアルキルホスフィン、トリフェニルホスフィン等が挙げられるがトリフェニルホスフィンが好ましい。又、アゾジカルボン酸誘導体としては種々の化合物が用いられており、アゾジカルボン酸誘導体に替えてマレイン酸誘導体を用いることが可能であるが、取り扱いの容易さよりトリフェニルホスフィンとアゾジカルボン酸誘導体の組み合わせが望ましい。アゾジカルボン酸誘導体としてはジエチル アゾジカルボキシレート、ジイソプロピル アゾジカルボキシレート、テトラメチルアゾジカルボキシアミド、テトラプロピル アゾジカルボキシアミド、1,1'-(アゾジカルボニル)ジピペリジンが挙げられるが、入手の容易さよりジエチル アゾジカルボキシレートおよびジイソプロピル アゾジカルボキシレートが好ましく、取り扱いの容易さよりジイソプロピル アゾジカルボキシレートがより好ましい。

[0052] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、炭化水素系溶媒および芳香族系溶媒等を好ましく用いることができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよびt-ブチルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロエタンおよび四塩化炭素等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼンおよびジクロロベンゼン等を好例として挙げるができる。中でも、テトラヒドロフラン等のエーテル系溶媒およびトルエン等の芳香族系溶媒等がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。

- [0053] 反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、0°Cから150°Cが好ましく、0°Cから30°Cがより好ましい。
- [0054] 一般式（S-6）で表される化合物の脱保護は、酸性条件下で行うことが好ましい。使用する酸としては、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、しゅう酸、p-トルエンスルホン酸等のプロトン酸および三フッ化ほう素等のルイス酸等が挙げられるが、ギ酸を用いるのが好ましい。
- [0055] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、ケトン系溶媒、炭化水素系溶媒、芳香族系溶媒および極性溶媒等を好ましく用いることができ、無溶媒で反応させてもよい。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよびt-ブチルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロエタン、クロロホルムおよび四塩化炭素等を、ケトン系溶媒としてはアセトンおよび2-ブタノン等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼンおよびジクロロベンゼン等を、極性溶媒としてはアセトニトリルおよびジメチルスルホキシド等を好例として挙げるができる。中でも、ペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等の炭化水素系溶媒およびベンゼン、トルエン、キシレン等の芳香族系溶媒等がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。
- [0056] 反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、0°Cから100°Cが好ましく、30°Cから60°Cがより好ましい。
- [0057] こうして得られる式（S-7）で表される化合物は、シクロヘキサン環に関するシス体およびトランス体の混合物として得られる場合があるが、液晶化合物の中間体として使用するためにはトランス体であることが好ましい。式（S-7）で表される化合物のシクロヘキサン環に関しては、必要に応じて塩基を作用させることによりシス-トランス異性化を行うことができ、ト

ランス体を過剰に得ることができる。この際使用する塩基としては水酸化ナトリウム、水酸化カリウム等が好ましく、反応溶媒はメタノール、エタノールおよびテトラヒドロフラン等が好ましく、反応温度は -40°C から 20°C が好ましく、 -20°C から 10°C がより好ましい。

[0058] 式(S-7)で表される化合物にアルキルリンイリドを反応させることによって一般式(i)で表される化合物を得ることができる。リンイリドはホスホニウム塩、ホスホン酸エステル等から調整することができるが、アルキルトリフェニルホスホニウム塩から調整することが好ましい。

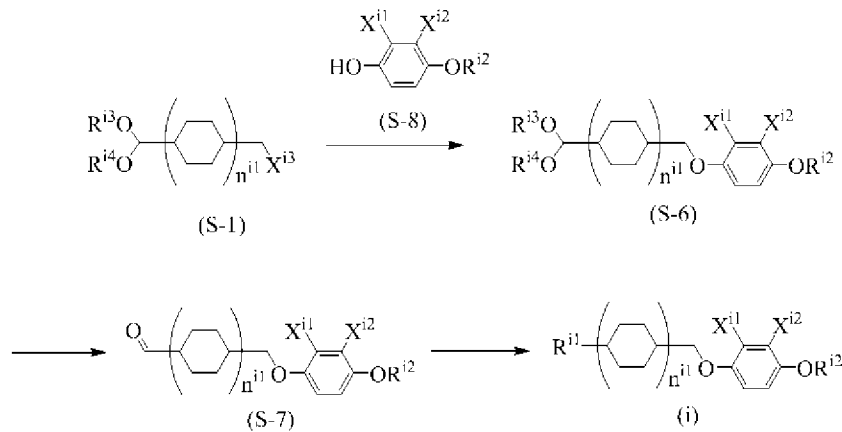
[0059] アルキルトリフェニルホスホニウム塩を用いてイリドを調整する場合塩基を作用させて行うが、使用する塩基としてはカリウム-t-ブトキシド、n-ブチルリチウム、フェニルリチウム、水素化ナトリウム等が好ましく、カリウム-t-ブトキシドがより好ましい。反応溶媒はエーテル系溶媒、芳香族系溶媒および極性溶媒等を好ましく用いることができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよびt-ブチルメチルエーテル等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン等を、極性溶媒としてはN,N-ジメチルホルムアミド等を好例として挙げるることができる。テトラヒドロフランおよびトルエンがより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、 -40°C から 30°C が好ましく、 -20°C から 20°C がより好ましい。得られたイリドは単離することなく式(5)で表される化合物と反応させるのが好ましい。また、アルキルトリフェニルホスホニウム塩および式(5)で表される化合物の混合物に対して塩基を加えてもよい。アルキルトリフェニルホスホニウム塩としてはメチルトリフェニルホスホニウム塩が好ましい。

[0060] 本願発明は、一般式(S-1)で表される化合物を出発原料として、一般式(S-3)、一般式(S-4)、一般式(S-6)及び一般式(S-7)で表される化合物を経由して一般式(i)で表される化合物を製造するもの

であるが、一般式 (S-3) で表される化合物を出発原料として、一般式 (S-4)、一般式 (S-6) 及び一般式 (S-7) で表される化合物を経由して一般式 (i) で表される化合物を製造することも好ましく、一般式 (S-4) で表される化合物を出発原料として、一般式 (S-6) 及び一般式 (S-7) で表される化合物を経由して一般式 (i) で表される化合物を製造することも好ましく、一般式 (S-6) で表される化合物を出発原料として、一般式 (S-7) で表される化合物を経由して一般式 (i) で表される化合物を製造することも好ましく、一般式 (S-7) で表される化合物を出発原料として、一般式 (i) で表される化合物を製造することも好ましい。

(製法2) 一般式 (i) で表される化合物の合成方法 (2)

[0061] [化8]



[0062] (式中、Rⁱ¹、Rⁱ²、Xⁱ¹、Xⁱ²及びnⁱ¹は前記一般式 (i) におけるRⁱ¹、Rⁱ²、Xⁱ¹、Xⁱ²及びnⁱ¹と同じ意味を表し、Rⁱ³およびRⁱ⁴はそれぞれ独立的にメチル基、エチル基またはプロピル基を表すか、Rⁱ³およびRⁱ⁴は環状の構造となり-CH₂CH₂-、-CH₂CH₂CH₂-又は-CH₂C(CH₃)₂CH₂-を表す。)

一般式 (S-1) で表される化合物に一般式 (S-8) で表される化合物を反応させることによって一般式 (S-6) で表される化合物を得るが、一般式 (S-1) におけるXⁱ³の置換基の選択により幾つかの反応を用いることが可能である。

[0063] Xⁱ³が塩素、臭素、よう素、ベンゼンスルホニルオキシ基、p-トルエンス

ルホニルオキシ基、メタンスルホニルオキシ基又はトリフルオロメタンスルホニルオキシ基を表す化合物を用いた場合、一般式(S-8)の水酸基を塩基によりフェノラートとして一般式(S-1)と反応させる方法を用いることができる。この場合に使用する塩基としては金属水素化物、金属炭酸塩、金属リン酸塩、金属水酸化物、金属カルボン酸塩、金属アミド及び金属等を挙げることができ、中でもアルカリ金属水素化物、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属炭酸塩、アルカリ金属水酸化物、アルカリ金属アミド及びアルカリ金属が好ましく、アルカリ金属リン酸塩、アルカリ金属水素化物及びアルカリ金属炭酸塩は更に好ましい。アルカリ金属水素化物としては水素化リチウム、水素化ナトリウム及び水素化カリウムを、アルカリ金属リン酸塩としてはリン酸三カリウムを、アルカリ金属炭酸塩としては炭酸ナトリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸セシウム、炭酸カリウム及び炭酸水素カリウムをそれぞれ好ましく挙げることができる。

[0064] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、炭化水素系溶媒、芳香族系溶媒及び極性溶媒等を好ましく用いることができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテル及びt-ブチルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロエタン及び四塩化炭素等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタン及びオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼン及びジクロロベンゼン等を、極性溶媒としてはN,N-ジメチルホルムアミド、N-メチルピロリドン、ジメチルスルホキシド及びスルホラン等を好例として挙げることができる。中でも、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテル等のエーテル系溶媒及びN,N-ジメチルホルムアミド等の極性溶媒がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。

[0065] 反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、0°Cから

150°Cが好ましく、30°Cから120°Cがより好ましい。なお、生成したフェノラートを一度単離してから一般式(S-5)で表される化合物と反応させてもよく、単離せずに反応させてもよいが、作業の容易さから単離せずに反応させたほうがよい。

[0066] Xⁱ³が水酸基を表す化合物を用いた場合、光延反応を用いることが可能である。光延反応はアルコールと活性プロトンを持つ多種多様な求核剤とを脱水的に縮合させる反応であり、トリフェニルホスフィンとアゾジカルボン酸誘導体又はマレイン酸誘導体を組み合わせて用いる。具体的には、一般式(S-8)で表される化合物と一般式(S-1)で表されるアルコール誘導体を三置換ホスフィン誘導体及びアゾジカルボン酸誘導体存在下に反応させることにより一般式(S-6)で表される化合物を得る。

[0067] 三置換ホスフィン誘導体としては、トリアルキルホスフィン、トリフェニルホスフィン等が挙げられるがトリフェニルホスフィンが好ましい。又、アゾジカルボン酸誘導体としては種々の化合物が用いられており、アゾジカルボン酸誘導体に替えてマレイン酸誘導体を用いることが可能であるが、取り扱いの容易さよりトリフェニルホスフィンとアゾジカルボン酸誘導体の組み合わせが望ましい。アゾジカルボン酸誘導体としてはジエチル アゾジカルボキシレート、ジイソプロピル アゾジカルボキシレート、テトラメチル アゾジカルボキシアミド、テトラプロピル アゾジカルボキシアミド、1,1'-(アゾジカルボニル)ジピペリジンが挙げられるが、入手の容易さよりジエチル アゾジカルボキシレートおよびジイソプロピル アゾジカルボキシレートが好ましく、取り扱いの容易さよりジイソプロピル アゾジカルボキシレートがより好ましい。

[0068] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、炭化水素系溶媒および芳香族系溶媒等を好ましく用いることができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよびt-ブチルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロ

エタンおよび四塩化炭素等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼンおよびジクロロベンゼン等を好例として挙げる事ができる。中でも、テトラヒドロフラン等のエーテル系溶媒およびトルエン等の芳香族系溶媒等がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。

[0069] 一般式 (S-6) で表される化合物の脱保護は、酸性条件下で行うことが好ましい。使用する酸としては、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、しゅう酸、p-トルエンスルホン酸等のプロトン酸および三フッ化ほう素等のルイス酸等が挙げられるが、ギ酸を用いるのが好ましい。

[0070] 反応溶媒としては、反応を好適に進行させるものであればいずれでも構わないが、エーテル系溶媒、塩素系溶媒、ケトン系溶媒、炭化水素系溶媒、芳香族系溶媒および極性溶媒等を好ましく用いることができ、無溶媒で反応させてもよい。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよびt-ブチルメチルエーテル等を、塩素系溶媒としてはジクロロメタン、1,2-ジクロロエタン、クロロホルムおよび四塩化炭素等を、ケトン系溶媒としてはアセトンおよび2-ブタノン等を、炭化水素系溶媒としてはペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン、クロロベンゼンおよびジクロロベンゼン等を、極性溶媒としてはアセトニトリルおよびジメチルスルホキシド等を好例として挙げる事ができる。中でも、ペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンおよびオクタン等の炭化水素系溶媒およびベンゼン、トルエン、キシレン等の芳香族系溶媒等がより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。

[0071] 反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行う事ができるが、0°Cから100°Cが好ましく、30°Cから60°Cがより好ましい。

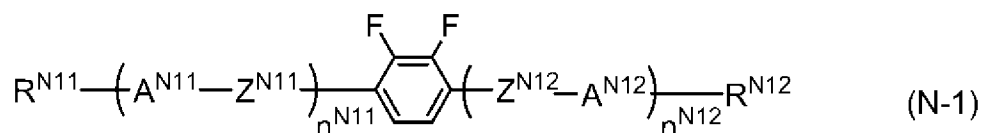
- [0072] こうして得られる式 (S-7) で表される化合物は、シクロヘキサン環に関するシス体およびトランス体の混合物として得られる場合があるが、液晶化合物の中間体として使用するためにはトランス体であることが好ましい。式 (S-7) で表される化合物のシクロヘキサン環に関しては、必要に応じて塩基を作用させることによりシス-トランス異性化を行うことができ、トランス体を過剰に得ることができる。この際使用する塩基としては水酸化ナトリウム、水酸化カリウム等が好ましく、反応溶媒はメタノール、エタノールおよびテトラヒドロフラン等が好ましく、反応温度は -40°C から 20°C が好ましく、 -20°C から 10°C がより好ましい。
- [0073] 式 (S-7) で表される化合物にアルキルリンイリドを反応させることによって一般式 (i) で表される化合物を得ることができる。リンイリドはホスホニウム塩、ホスホン酸エステル等から調整することができるが、アルキルトリフェニルホスホニウム塩から調整することが好ましい。
- [0074] アルキルトリフェニルホスホニウム塩を用いてイリドを調整する場合塩基を作用させて行うが、使用する塩基としてはカリウム-*t*-ブトキシド、*n*-ブチルリチウム、フェニルリチウム、水素化ナトリウム等が好ましく、カリウム-*t*-ブトキシドがより好ましい。反応溶媒はエーテル系溶媒、芳香族系溶媒および極性溶媒等を好ましく用いることができる。エーテル系溶媒としては、1,4-ジオキサン、1,3-ジオキサン、テトラヒドロフラン、ジエチルエーテルおよび*t*-ブチルメチルエーテル等を、芳香族系溶媒としてはベンゼン、トルエン、キシレン、メシチレン等を、極性溶媒としては*N,N*-ジメチルホルムアミド等を好例として挙げるることができる。テトラヒドロフランおよびトルエンがより好ましい。また、前記の各溶媒を単独で使用しても、2種もしくはそれ以上の溶媒を混合して使用してもよい。反応温度は溶媒の凝固点から還流温度範囲で行うことができるが、 -40°C から 30°C が好ましく、 -20°C から 20°C がより好ましい。得られたイリドは単離することなく式(5)で表される化合物と反応させるのが好ましい。また、アルキルトリフェニルホスホニウム塩および式(5)で表される化合物の混合物に対して塩基を加えてもよい。アルキルト

リフェニルホスホニウム塩としてはメチルトリフェニルホスホニウム塩が好ましい。

[0075] 本願発明は、一般式 (S-1) で表される化合物を出発原料として、一般式 (S-6) 及び一般式 (S-7) で表される化合物を経由して一般式 (i) で表される化合物を製造するものであるが、一般式 (S-6) で表される化合物を出発原料として、一般式 (S-7) で表される化合物を経由して一般式 (i) で表される化合物を製造することも好ましく、一般式 (S-7) で表される化合物を出発原料として、一般式 (i) で表される化合物を製造することも好ましい。

[0076] 本発明の組成物は、一般式 (i) で表される化合物とともに、一般式 (N-1) で表される化合物を 1 種類又は 2 種類以上含有することが好ましい。一般式 (N-1) で表されるは誘電的に負の化合物 ($\Delta \epsilon$ の符号が負で、その絶対値が 2 より大きい。) に該当する。

[0077] [化9]



[0078] (式中、 R^{N11} 及び R^{N12} はそれぞれ独立して炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基を表し、該アルキル基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の $-CH_2-$ はそれぞれ独立して $-CH=CH-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ によって置換されていてもよく、

A^{N11} 及び A^{N12} はそれぞれ独立して

(a) 1, 4-シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH_2-$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ に置き換えられてもよい。

) 及び

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

(c) (c) ナフタレン-2, 6-ジイル基、1, 2, 3, 4-テトラヒ

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

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

Z^{N11} 及び Z^{N12} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C\equiv C-$ を表し、

n^{N11} 及び n^{N12} はそれぞれ独立して0~3の整数を表すが、 $n^{N11} + n^{N12}$ は1、2又は3であり、 $A^{N11} \sim A^{N12}$ 、 $Z^{N11} \sim Z^{N12}$ が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良い。)

一般式 (N-1) で表される化合物は、 $\Delta \varepsilon$ が負でその絶対値が3よりも大きな化合物であることが好ましい。

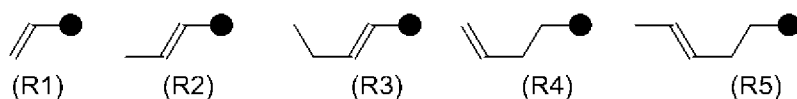
[0079] 一般式 (N-1) 中、 R^{N11} 及び R^{N12} はそれぞれ独立して、炭素原子数1~8のアルキル基、炭素原子数1~8のアルコキシ基、炭素原子数2~8のアルケニル基又は炭素原子数2~8のアルケニルオキシ基が好ましく、炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数1~5のアルコキシ基、炭素原子数2~5のアルケニル基又は炭素原子数2~5のアルケニルオキシ基が好ましく、炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が更に好ましく、炭素原子数2~5のアルキル基又は炭素原子数2~3のアルケニル基が更に好ましく、炭素原子数3のアルケニル基 (プロペニル基) が特に好ましい。

[0080] また、それが結合する環構造がフェニル基 (芳香族) である場合には、直鎖状の炭素原子数1~5のアルキル基、直鎖状の炭素原子数1~4のアルコキシ基及び炭素原子数4~5のアルケニル基が好ましく、それが結合する環

構造がシクロヘキサン、ピラン及びジオキサンなどの飽和した環構造の場合には、直鎖状の炭素原子数 1～5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1～4 のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数 2～5 のアルケニル基が好ましい。ネマチック相を安定化させるためには炭素原子及び存在する場合酸素原子の合計が 5 以下であることが好ましく、直鎖状であることが好ましい。

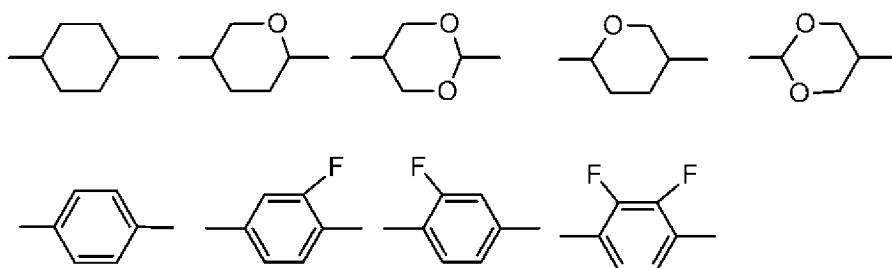
[0081] アルケニル基としては、式 (R1) から式 (R5) のいずれかで表される基から選ばれることが好ましい。(各式中の黒点は環構造中の炭素原子を表す。)

[0082] [化10]



[0083] A^{N11} 及び A^{N12} はそれぞれ独立して Δn を大きくすることが求められる場合には芳香族であることが好ましく、応答速度を改善するためには脂肪族であることが好ましく、トランス-1, 4-シクロヘキシレン基、1, 4-フェニレン基、2-フルオロ-1, 4-フェニレン基、3-フルオロ-1, 4-フェニレン基、3, 5-ジフルオロ-1, 4-フェニレン基、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン基、1, 4-シクロヘキセニレン基、1, 4-ビスクロ [2. 2. 2] オクチレン基、ピペリジン-1, 4-ジイル基、ナフタレン-2, 6-ジイル基、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基又は 1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基を表すことが好ましく、下記の構造を表すことがより好ましく、

[0084] [化11]



[0085] トランス-1, 4-シクロヘキシレン基又は 1, 4-フェニレン基を表すこ

とがより好ましい。

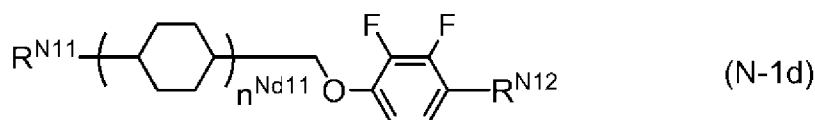
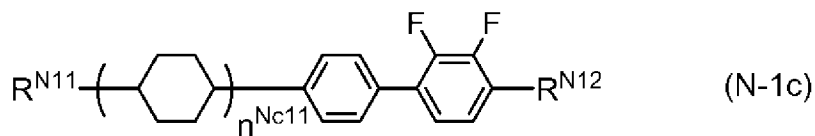
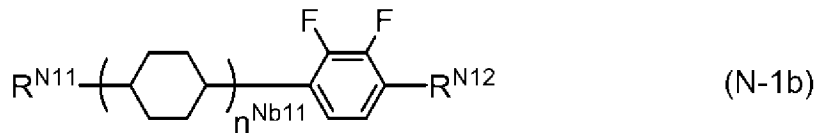
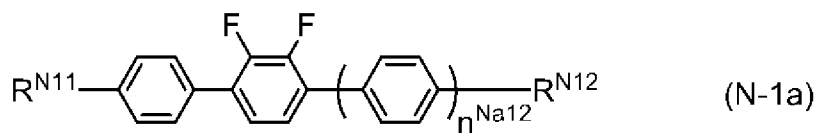
[0086] Z^{N11} 及び Z^{N12} はそれぞれ独立して $-CH_2O-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CF_2CF_2-$ 又は単結合を表すことが好ましく、 $-CH_2O-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 又は単結合が更に好ましく、 $-CH_2O-$ 又は単結合が特に好ましい。

[0087] $n^{N11} + n^{N12}$ は 1 又は 2 が好ましく、 n^{N11} が 1 であり n^{N12} が 0 である組み合わせ、 n^{N11} が 2 であり n^{N12} が 0 である組み合わせ、 n^{N11} が 1 であり n^{N12} が 1 である組み合わせ、 n^{N11} が 2 であり n^{N12} が 1 である組み合わせが好ましい。

[0088] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1) で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1% であり、10% であり、20% であり、30% であり、40% であり、50% であり、55% であり、60% であり、65% であり、70% であり、75% であり、80% である。好ましい含有量の上限值は、95% であり、85% であり、75% であり、65% であり、55% であり、45% であり、35% であり、25% であり、20% である。

[0089] 特に、一般式 (i) で表される化合物と組み合わせると好ましい化合物として、下記の一般式 (N-1a) ~ (N-1d) で表される化合物群を挙げることができる。

[0090] [化12]



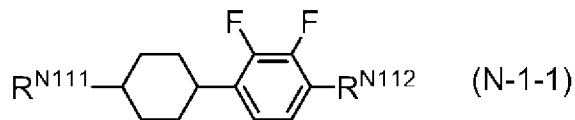
[0091] (式中、 R^{N11} 及び R^{N12} は一般式(N-1)における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表し、 n^{Na11} は0又は1を表し、 n^{Nb11} は0又は1を表し、 n^{Nc11} は0又は1を表し、 n^{Nd11} は0又は1を表す。)

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

[0092] より具体的には、一般式(N-1)で表される化合物は一般式(N-1-1)~(N-1-21)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

[0093] 一般式(N-1-1)で表される化合物は下記の化合物である。

[0094] [化13]



[0095] (式中、 R^{N111} 及び R^{N112} はそれぞれ独立して、一般式(N)における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N111} は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、プロピル基又はペンチル基が好ましい。 R^{N112} は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0096] 一般式(N-1-1)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上

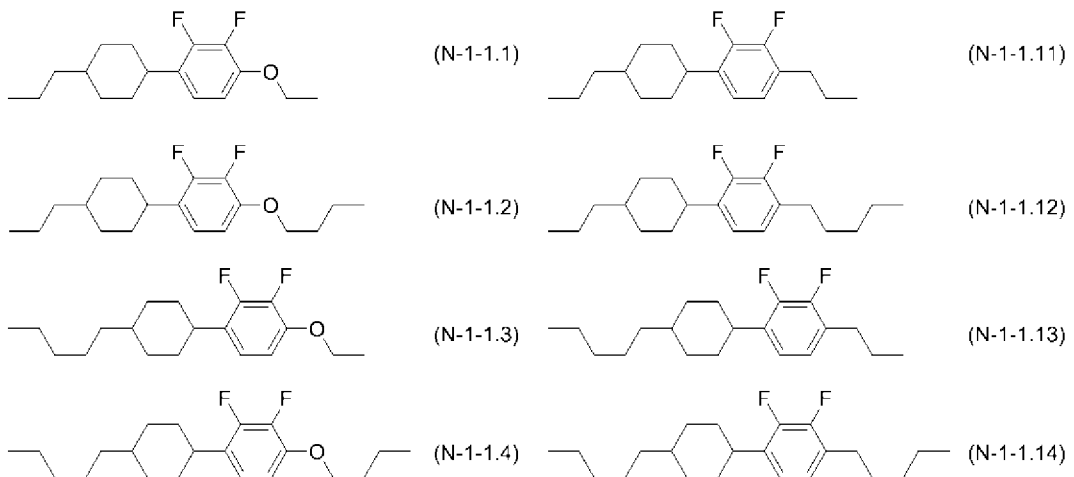
である。

[0097] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0098] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-1) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、33%であり、35%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、50%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%であり、3%である。

[0099] さらに、一般式 (N-1-1) で表される化合物は、式 (N-1-1.1) から式 (N-1-1.14) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N-1-1.1) ~ (N-1-1.4) で表される化合物であることが好ましく、式 (N-1-1.1) 及び式 (N-1-1.3) で表される化合物が好ましい。

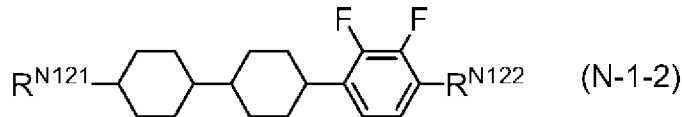
[0100] [化14]



[0101] 式 (N-1-1. 1) ~ (N-1-1. 4) で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対しての単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、33%であり、35%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、50%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%であり、3%である。

[0102] 一般式 (N-1-2) で表される化合物は下記の化合物である。

[0103] [化15]



[0104] (式中、 $\text{R}^{\text{N}121}$ 及び $\text{R}^{\text{N}122}$ はそれぞれ独立して、一般式 (N) における $\text{R}^{\text{N}1}$ 及び $\text{R}^{\text{N}2}$ と同じ意味を表す。)

$\text{R}^{\text{N}121}$ は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基、ブチル基又はペンチル基が好ましい。 $\text{R}^{\text{N}122}$ は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、メチル基、プロピル基、メトキシ基、エトキシ基又はプロポキシ基が好ましい。

[0105] 一般式 (N-1-2) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせて使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせて使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

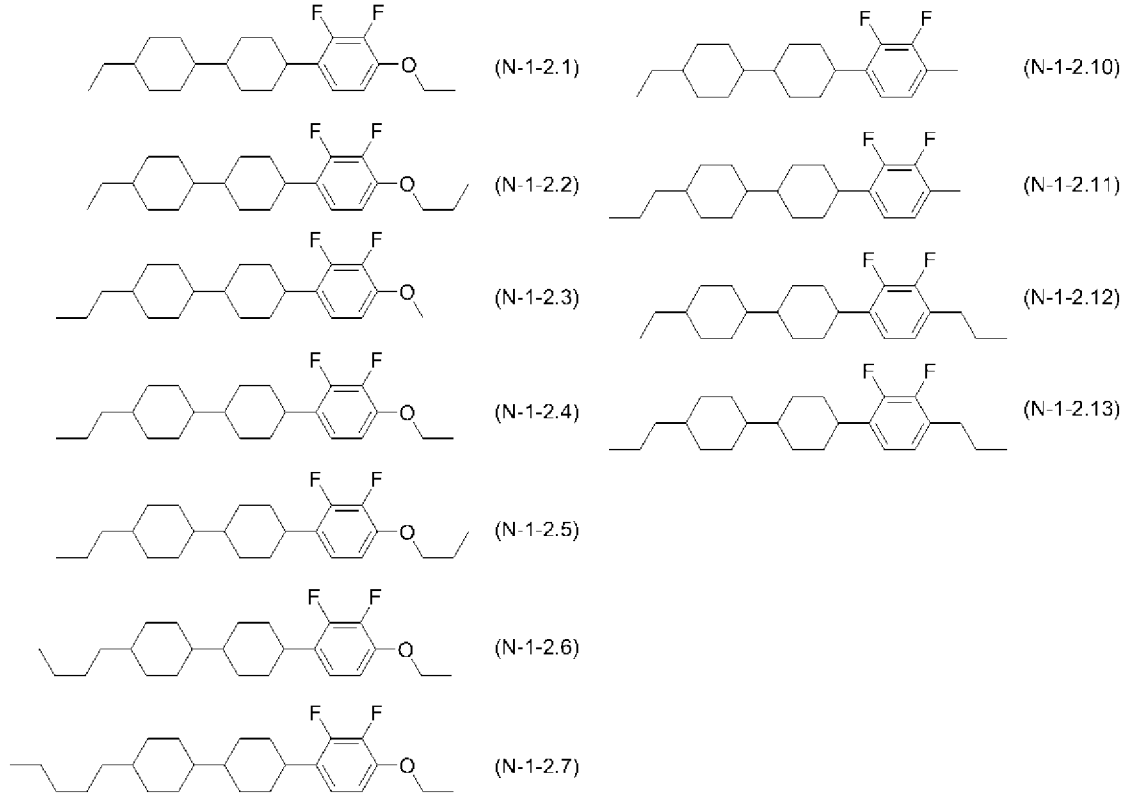
[0106] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高く、 T_{NI} を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0107] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-2) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、7%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、33%であり、35%であり、37%であり、40%であり、42%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、50%であり、48%であり、45%であり、43%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%である。

[0108] さらに、一般式 (N-1-2) で表される化合物は、式 (N-1-2. 1) から式 (N-1-2. 13) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N-1-2. 3) から式 (N-1-2. 7)、式 (N-1-2. 10)、式 (N-1-2. 11) 及び式 (N-1-2. 13) で表される化合物であることが好ましく、 $\Delta \varepsilon$ の改良を重視する場合には式 (N-1-2. 3) から式 (N-1-2. 7) で表される化合物が好ましく、 T_{NI} の改良を重視する場合には式 (N-1-2. 10)、式 (N-1-2. 11) 及び式 (N-1-2. 13) で表される化合物であることが好ましい。

[0109]

[化16]

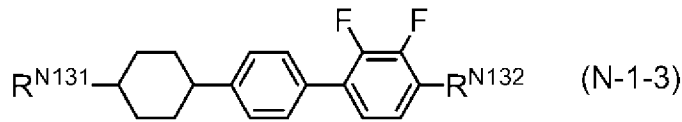


[0110] 式(N-1-2.1)から式(N-1-2.13)で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対するの単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、33%であり、35%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、50%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%であり、3%である。

[0111] 一般式(N-1-3)で表される化合物は下記の化合物である。

[0112]

[化17]



[0113] (式中、 R^{N131} 及び R^{N132} はそれぞれ独立して、一般式(N)における R^{N1} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N131} は炭素原子数1～5のアルキル基又は炭素原子数2～5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N132} は炭素原子数1～5のアルキル基、炭素原子数4～5のアルケニル基又は炭素原子数1～4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

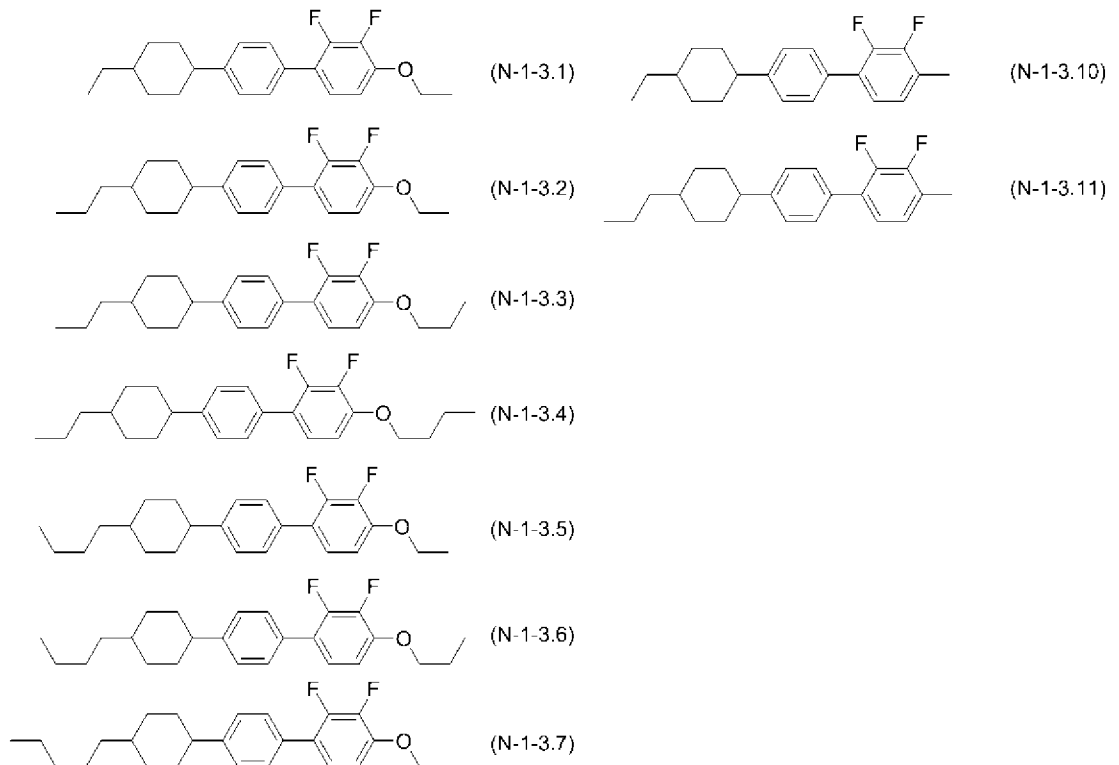
[0114] 一般式(N-1-3)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

[0115] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0116] 本発明の組成物の総量に対しての式(N-1-3)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0117] さらに、一般式 (N-1-3) で表される化合物は、式 (N-1-3. 1) から式 (N-1-3. 11) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N-1-3. 1) ~ (N-1-3. 7) で表される化合物であることが好ましく、式 (N-1-3. 1)、式 (N-1-3. 2)、式 (N-1-3. 3)、式 (N-1-3. 4) 及び式 (N-1-3. 6) で表される化合物が好ましい。

[0118] [化18]

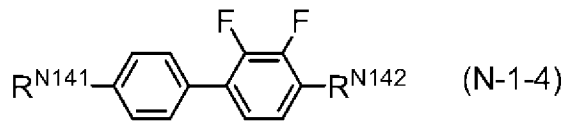


[0119] 式 (N-1-3. 1) ~ 式 (N-1-3. 4) 及び式 (N-1-3. 6) で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、式 (N-1-3. 1) 及び式 (N-1-3. 2) の組み合わせ、式 (N-1-3. 3)、式 (N-1-3. 4) 及び式 (N-1-3. 6) から選ばれる 2 種又は 3 種の組み合わせが好ましい。本発明の組成物の総量に対するの単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%

であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0120] 一般式(N-1-4)で表される化合物は下記の化合物である。

[0121] [化19]



[0122] (式中、 R^{N141} 及び R^{N142} はそれぞれ独立して、一般式(N)における R^{N1} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N141} 及び R^{N142} はそれぞれ独立して、炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、メチル基、プロピル基、エトキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0123] 一般式(N-1-4)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

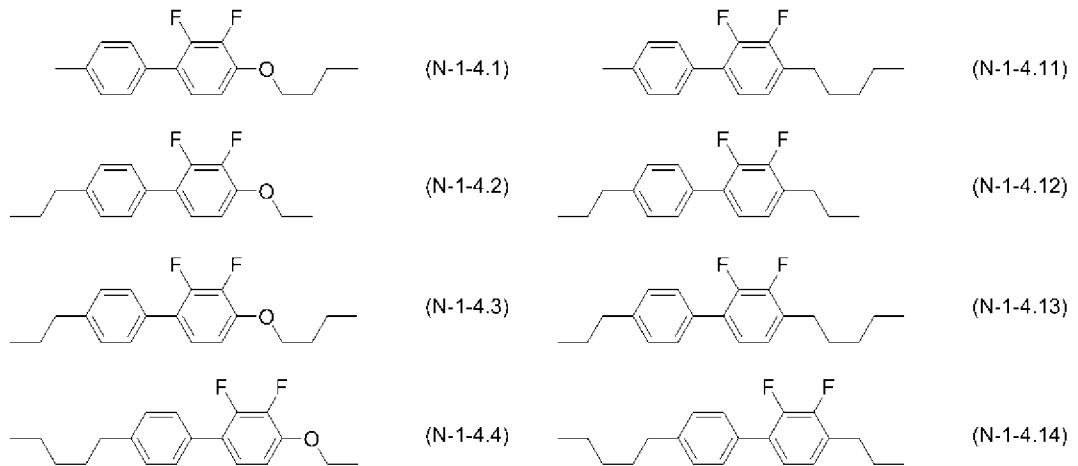
[0124] $\Delta \epsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0125] 本発明の組成物の総量に対しての式(N-1-4)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、11%であり、10%であり、

8%である。

[0126] さらに、一般式 (N-1-4) で表される化合物は、式 (N-1-4. 1) から式 (N-1-4. 14) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N-1-4. 1) ~ (N-1-4. 4) で表される化合物であることが好ましく、式 (N-1-4. 1) 及び式 (N-1-4. 2) で表される化合物が好ましい。

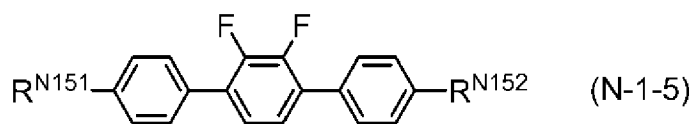
[0127] [化20]



[0128] 式 (N-1-4. 1) ~ (N-1-4. 4) で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対する単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、11%であり、10%であり、8%である。

[0129] 一般式 (N-1-5) で表される化合物は下記の化合物である。

[0130] [化21]



[0131] (式中、R^{N151}及びR^{N152}はそれぞれ独立して、一般式 (N) におけるR^{N1}

¹及びR^{N12}と同じ意味を表す。)

R^{N151}及びR^{N152}はそれぞれ独立して、炭素原子数1～5のアルキル基、炭素原子数4～5のアルケニル基又は炭素原子数1～4のアルコキシ基が好ましくエチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。

[0132] 一般式(N-1-5)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

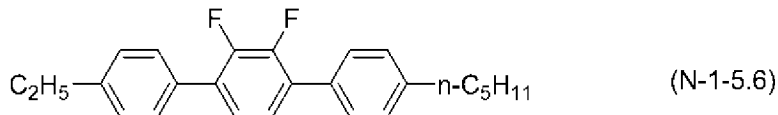
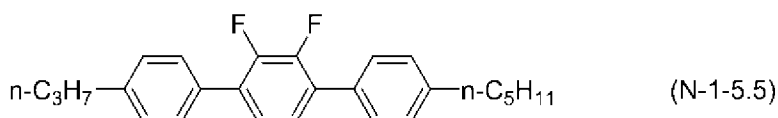
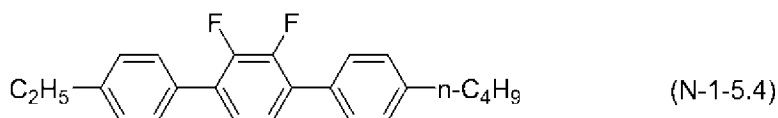
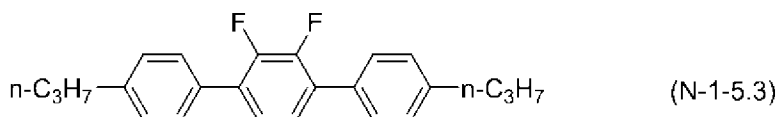
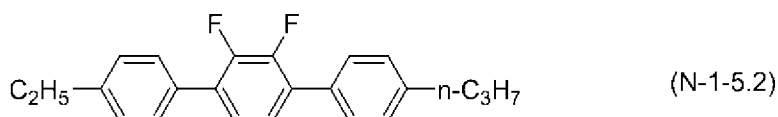
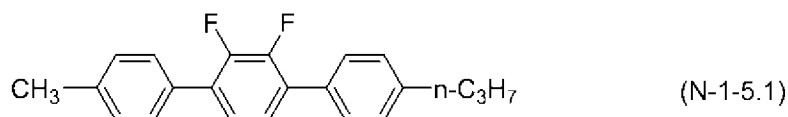
[0133] Δεの改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高く、T_{N1}を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0134] 本発明の組成物の総量に対しての式(N-1-5)で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、5%であり、8%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0135] さらに、一般式(N-1-5)で表される化合物は、式(N-1-5.1)から式(N-1-5.6)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(N-1-3.2)及び式(N-1-3.4)で表される化合物が好ましい。

[0136]

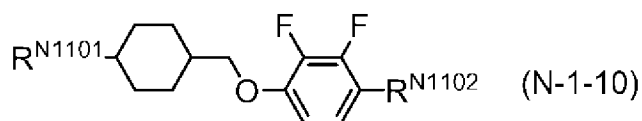
[化22]



[0137] 式(N-1-3.2)及び式(N-1-3.4)で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対するの単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、8%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0138] 一般式(N-1-10)で表される化合物は下記の化合物である。

[0139] [化23]



[0140] (式中、 R^{N1101} 及び R^{N1102} はそれぞれ独立して、一般式(N)における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1101} は炭素原子数1～5のアルキル基又は炭素原子数2～5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1102} は炭素原子数1～5のアルキル基、炭素原子数4～5のアルケニル基又は炭素原子数1～4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

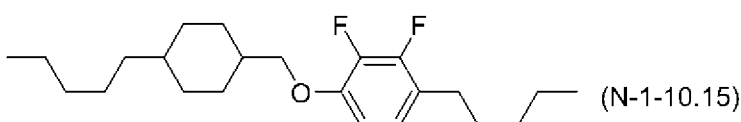
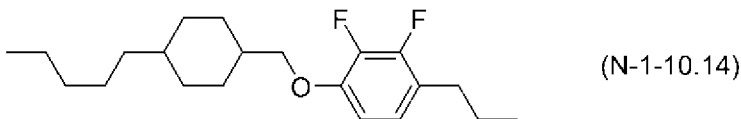
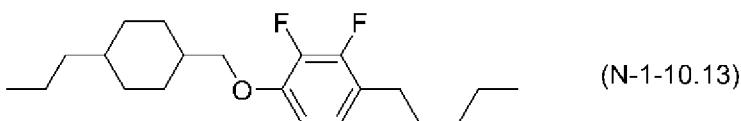
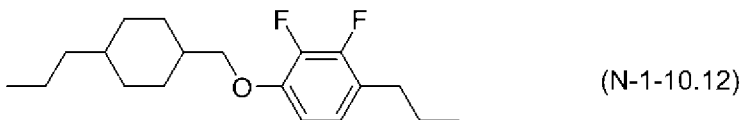
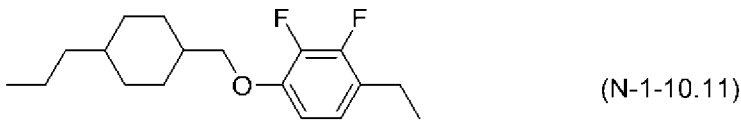
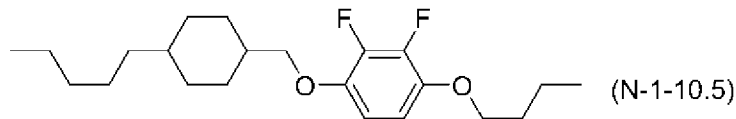
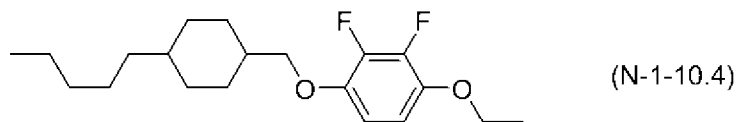
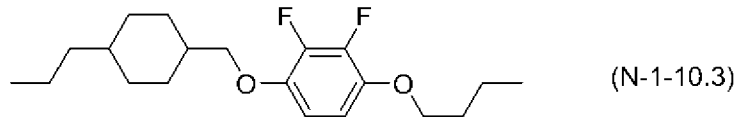
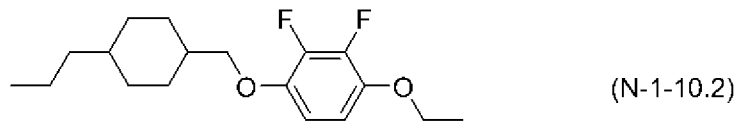
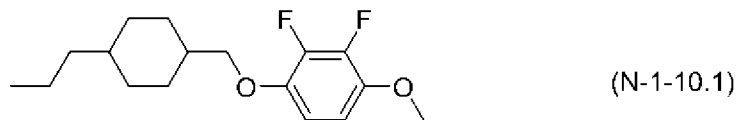
[0141] 一般式(N-1-10)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせて使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせて使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

[0142] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0143] 本発明の組成物の総量に対しての式(N-1-10)で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0144] さらに、一般式(N-1-10)で表される化合物は、式(N-1-10.1)から式(N-1-10.11)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(N-1-10.1)～(N-1-10.5)で表される化合物であることが好ましく、式(N-1-10.1)及び式(N-1-10.2)で表される化合物が好ましい。

[0145] [化24]

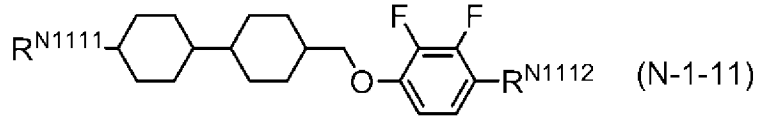


[0146] 式(N-1-10.1)及び式(N-1-10.2)で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対する単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対

して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0147] 一般式 (N-1-11) で表される化合物は下記の化合物である。

[0148] [化25]



[0149] (式中、R^{N1111}及びR^{N1112}はそれぞれ独立して、一般式 (N) におけるR^{N11}及びR^{N12}と同じ意味を表す。)

R^{N1111}は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。R^{N1112}は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0150] 一般式 (N-1-11) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

[0151] Δεの改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、T_Nを重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

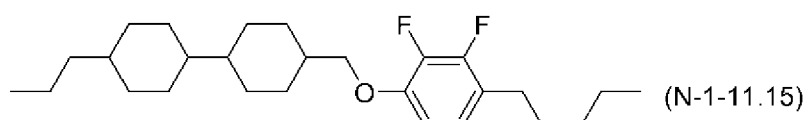
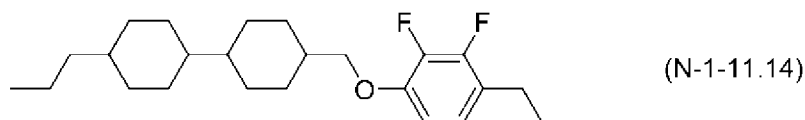
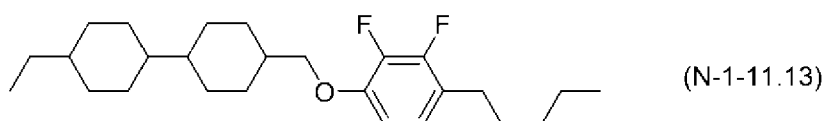
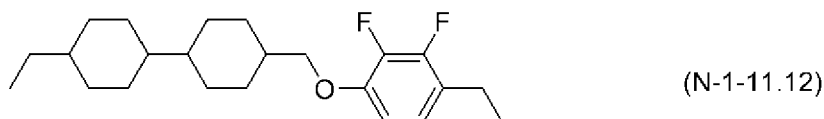
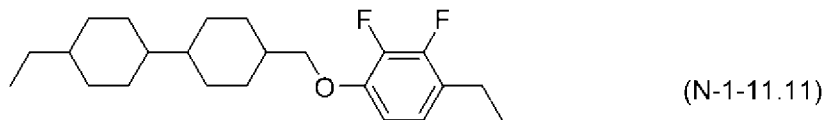
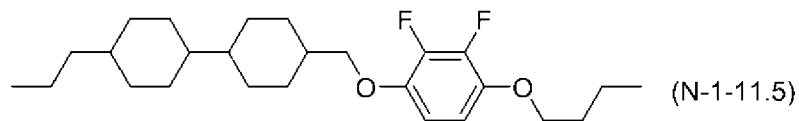
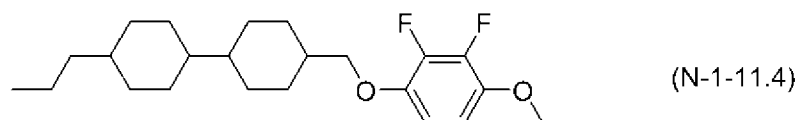
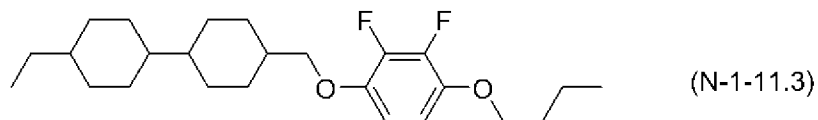
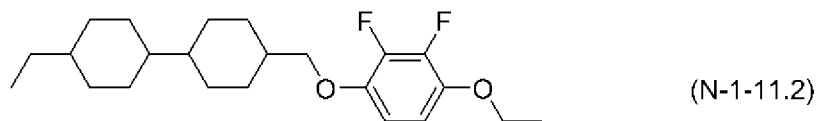
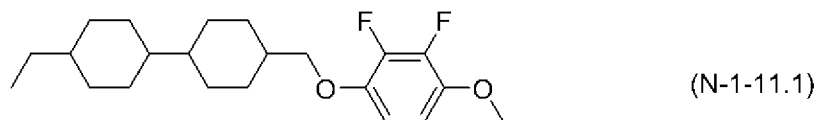
[0152] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-11) で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本

発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0153] さらに、一般式 (N-1-11) で表される化合物は、式 (N-1-11.1) から式 (N-1-11.15) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (N-1-11.1) ~ (N-1-11.15) で表される化合物であることが好ましく、式 (N-1-11.2) 及び式 (N-1-11.4) で表される化合物が好ましい。

[0154]

[化26]

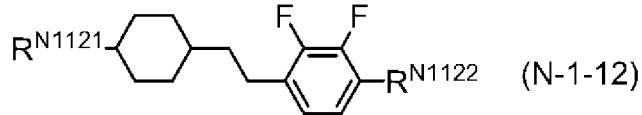


[0155] 式(N-1-11.2)及び式(N-1-11.4)で表される化合物は単独で使用することも、組み合わせて使用することも可能であるが、本発明の組成物の総量に対する単独又はこれら化合物の好ましい含有量の下限值は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対し

て、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0156] 一般式 (N-1-12) で表される化合物は下記の化合物である。

[0157] [化27]



[0158] (式中、 R^{N1121} 及び R^{N1122} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1121} は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1122} は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0159] 一般式 (N-1-12) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

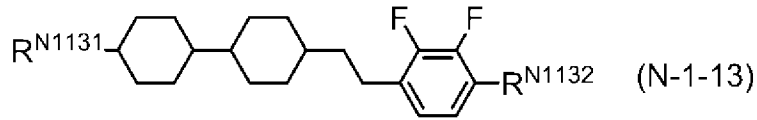
[0160] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0161] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-12) で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本

発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0162] 一般式 (N-1-13) で表される化合物は下記の化合物である。

[0163] [化28]



[0164] (式中、 R^{N1131} 及び R^{N1132} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1131} は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1132} は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0165] 一般式 (N-1-13) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

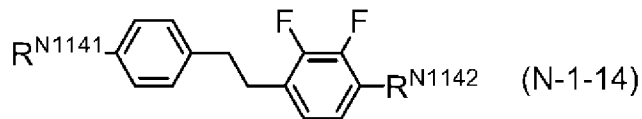
[0166] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0167] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-13) で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、5%であり、10%であり、13%であり、1

5%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0168] 一般式 (N-1-14) で表される化合物は下記の化合物である。

[0169] [化29]



[0170] (式中、 R^{N1141} 及び R^{N1142} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1141} は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1142} は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0171] 一般式 (N-1-14) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

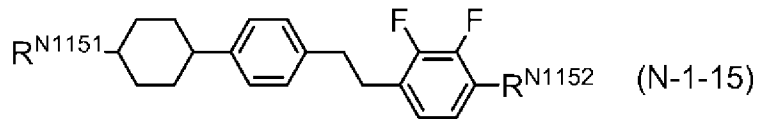
[0172] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0173] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-14) で表される化合物の

好ましい含有量の下限值は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0174] 一般式 (N-1-15) で表される化合物は下記の化合物である。

[0175] [化30]



[0176] (式中、 R^{N1151} 及び R^{N1152} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1151} は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1152} は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

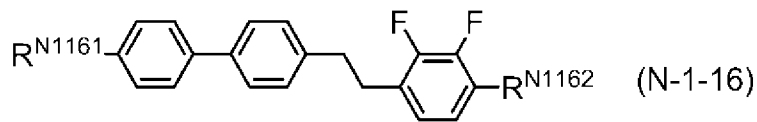
[0177] 一般式 (N-1-15) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

[0178] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0179] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-15) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0180] 一般式 (N-1-16) で表される化合物は下記の化合物である。

[0181] [化31]



[0182] (式中、 R^{N1161} 及び R^{N1162} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1161} は炭素原子数 1~5 のアルキル基又は炭素原子数 2~5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1162} は炭素原子数 1~5 のアルキル基、炭素原子数 4~5 のアルケニル基又は炭素原子数 1~4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0183] 一般式 (N-1-16) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

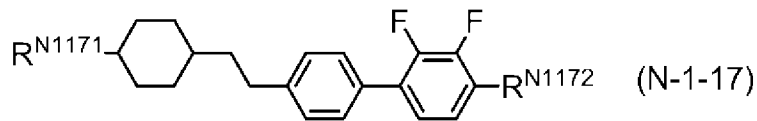
[0184] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好

ましい。

[0185] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-16) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0186] 一般式 (N-1-17) で表される化合物は下記の化合物である。

[0187] [化32]



[0188] (式中、 R^{N1171} 及び R^{N1172} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1171} は炭素原子数 1~5 のアルキル基又は炭素原子数 2~5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1172} は炭素原子数 1~5 のアルキル基、炭素原子数 4~5 のアルケニル基又は炭素原子数 1~4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0189] 一般式 (N-1-17) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

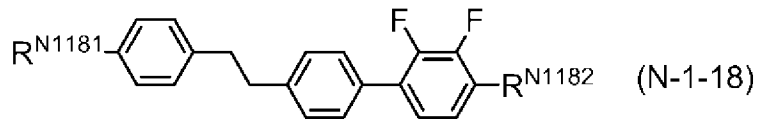
[0190] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕

や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0191] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-17) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0192] 一般式 (N-1-18) で表される化合物は下記の化合物である。

[0193] [化33]



[0194] (式中、 R^{N1181} 及び R^{N1182} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1181} は炭素原子数 1~5 のアルキル基又は炭素原子数 2~5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。 R^{N1182} は炭素原子数 1~5 のアルキル基、炭素原子数 4~5 のアルケニル基又は炭素原子数 1~4 のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基、プロポキシ基又はブトキシ基が好ましい。

[0195] 一般式 (N-1-18) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

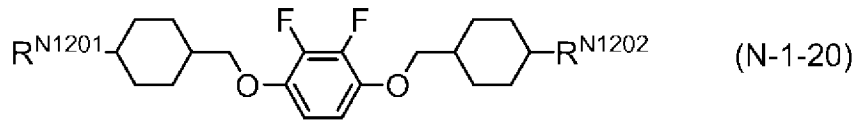
[0196] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N

、を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0197] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-18) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0198] 一般式 (N-1-20) で表される化合物は下記の化合物である。

[0199] [化34]



[0200] (式中、 R^{N1201} 及び R^{N1202} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1201} 及び R^{N1202} はそれぞれ独立して、炭素原子数 1~5 のアルキル基又は炭素原子数 2~5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。

[0201] 一般式 (N-1-20) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

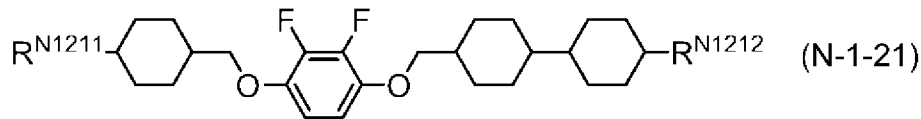
[0202] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N 、を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕

や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0203] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-20) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0204] 一般式 (N-1-21) で表される化合物は下記の化合物である。

[0205] [化35]



[0206] (式中、 R^{N1211} 及び R^{N1212} はそれぞれ独立して、一般式 (N) における R^{N11} 及び R^{N12} と同じ意味を表す。)

R^{N1211} 及び R^{N1212} はそれぞれ独立して、炭素原子数 1~5 のアルキル基又は炭素原子数 2~5 のアルケニル基が好ましく、エチル基、プロピル基又はブチル基が好ましい。

[0207] 一般式 (N-1-21) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

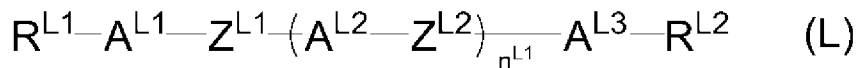
[0208] $\Delta \varepsilon$ の改善を重視する場合には含有量を高めに設定することが好ましく、低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、 T_N を重視する場合は含有量をおおめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好

ましい。

[0209] 本発明の組成物の総量に対しての式 (N-1-21) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、35%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

本発明の組成物は、一般式 (L) で表される化合物を1種類又は2種類以上含有することが好ましい。一般式 (L) で表される化合物は誘電的にほぼ中性の化合物 ($\Delta \epsilon$ の値が $-2 \sim 2$) に該当する。

[0210] [化36]



[0211] (式中、 R^{L1} 及び R^{L2} はそれぞれ独立して炭素原子数 1~8 のアルキル基を表し、該アルキル基中の 1 個又は非隣接の 2 個以上の $-CH_2-$ はそれぞれ独立して $-CH=CH-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ によって置換されていてもよく、

n^{L1} は 0、1、2 又は 3 を表し、

A^{L1} 、 A^{L2} 及び A^{L3} はそれぞれ独立して

(a) 1, 4-シクロヘキシレン基 (この基中に存在する 1 個の $-CH_2-$ 又は隣接していない 2 個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ に置き換えられてもよい。

) 及び

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

(c) (c) ナフタレン-2, 6-ジイル基、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基又はデカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基 (ナフタレン-2, 6-ジイル基又は 1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル基中に存在する 1 個の $-CH=$ 又は隣接してい

ない2個以上の $-CH=$ は $-N=$ に置き換えられても良い。)

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

Z^{L1} 及び Z^{L2} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C\equiv C-$ を表し、

n^{L1} が2又は3であって A^{L2} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良く、 n^{L1} が2又は3であって Z^{L3} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良いが、一般式(i)及び一般式(N-1)で表される化合物を除く。)

一般式(L)で表される化合物は単独で用いてもよいが、組み合わせて使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの所望の性能に応じて適宜組み合わせて使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類である。あるいは本発明の別の実施形態では2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類であり、6種類であり、7種類であり、8種類であり、9種類であり、10種類以上である。

[0212] 本発明の組成物において、一般式(L)で表される化合物の含有量は、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率、プロセス適合性、滴下痕、焼き付き、誘電率異方性などの求められる性能に応じて適宜調整する必要がある。

[0213] 本発明の組成物の総量に対しての式(L)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、10%であり、20%であり、30%であり、40%であり、50%であり、55%であり、60%であり、65%であり、70%であり、75%であり、80%である。好ましい含有量の上限値

は、95%であり、85%であり、75%であり、65%であり、55%であり、45%であり、35%であり、25%である。

[0214] 本発明の組成物の粘度を低く保ち、応答速度が速い組成物が必要な場合は上記の下限值が高く上限値が高いことが好ましい。さらに、本発明の組成物の T_{ni} を高く保ち、温度安定性の良い組成物が必要な場合は上記の下限值が高く上限値が高いことが好ましい。また、駆動電圧を低く保つために誘電率異方性を大きくしたいときは、上記の下限値を低く上限値が低いことが好ましい。

[0215] 信頼性を重視する場合には R^{L1} 及び R^{L2} はともにアルキル基であることが好ましく、化合物の揮発性を低減させることを重視する場合にはアルコキシ基であることが好ましく、粘性の低下を重視する場合には少なくとも一方はアルケニル基であることが好ましい。

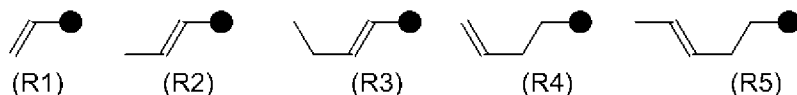
[0216] 分子内に存在するハロゲン原子は0、1、2又は3個が好ましく、0又は1が好ましく、他の液晶分子との相溶性を重視する場合には1が好ましい。

[0217] R^{L1} 及び R^{L2} は、それが結合する環構造がフェニル基（芳香族）である場合には、直鎖状の炭素原子数1～5のアルキル基、直鎖状の炭素原子数1～4のアルコキシ基及び炭素原子数4～5のアルケニル基が好ましく、それが結合する環構造がシクロヘキサン、ピラン及びジオキサンなどの飽和した環構造の場合には、直鎖状の炭素原子数1～5のアルキル基、直鎖状の炭素原子数1～4のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数2～5のアルケニル基が好ましい。ネマチック相を安定化させるためには炭素原子及び存在する場合酸素原子の合計が5以下であることが好ましく、直鎖状であることが好ましい。

[0218] アルケニル基としては、式(R1)から式(R5)のいずれかで表される基から選ばれることが好ましい。（各式中の黒点は環構造中の炭素原子を表す。）

[0219]

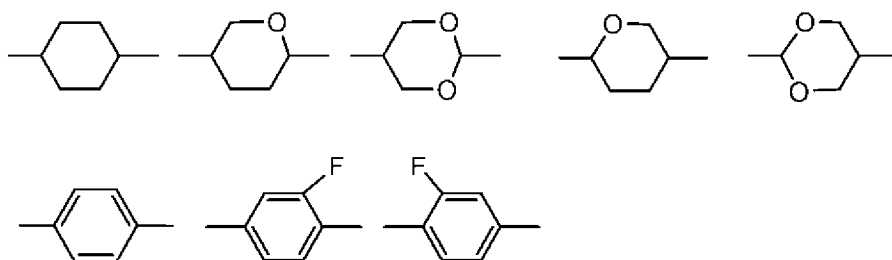
[化37]



[0220] n^{L1} は応答速度を重視する場合には0が好ましく、ネマチック相の上限温度を改善するためには2又は3が好ましく、これらのバランスをとるためには1が好ましい。また、組成物として求められる特性を満たすためには異なる値の化合物を組み合わせることが好ましい。

[0221] A^{L1} 、 A^{L2} 及び A^{L3} は Δn を大きくすることが求められる場合には芳香族であることが好ましく、応答速度を改善するためには脂肪族であることが好ましく、それぞれ独立してトランス-1,4-シクロヘキシレン基、1,4-フェニレン基、2-フルオロ-1,4-フェニレン基、3-フルオロ-1,4-フェニレン基、3,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン基、1,4-シクロヘキセニレン基、1,4-ビスシクロ[2.2.2]オクチレン基、ピペリジン-1,4-ジイル基、ナフタレン-2,6-ジイル基、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル基又は1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル基を表すことが好ましく、下記の構造を表すことがより好ましく、

[0222] [化38]



[0223] トランス-1,4-シクロヘキシレン基又は1,4-フェニレン基を表すことがより好ましい。

[0224] Z^{L1} 及び Z^{L2} は応答速度を重視する場合には単結合であることが好ましい。

[0225] 分子内のハロゲン原子数は0個又は1個が好ましい。

[0226] 一般式 (L) で表される化合物は一般式 (L-1) ~ (L-7) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

[0227] 一般式 (L-1) で表される化合物は下記の化合物である。

[0228] [化39]



[0229] (式中、 R^{L11} 及び R^{L12} はそれぞれ独立して、一般式 (L) における R^{L1} 及び R^{L2} と同じ意味を表す。)

R^{L11} 及び R^{L12} は、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1 ~ 4 のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数 2 ~ 5 のアルケニル基が好ましい。

[0230] 一般式 (L-1) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせ使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用す。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては 1 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

[0231] 好ましい含有量の下限值は、本発明の組成物の総量に対して、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、15%であり、20%であり、25%であり、30%であり、35%であり、40%であり、45%であり、50%であり、55%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、95%であり、90%であり、85%であり、80%であり、75%であり、70%であり、65%であり、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%である。

[0232] 本発明の組成物の粘度を低く保ち、応答速度が速い組成物が必要な場合は上記の下限值が高く上限値が高いことが好ましい。さらに、本発明の組成物

の T_{ni} を高く保ち、温度安定性の良い組成物が必要な場合は上記の下限値が中庸で上限値が中庸であることが好ましい。また、駆動電圧を低く保つために誘電率異方性を大きくしたいときは、上記の下限値が低く上限値が低いことが好ましい。

[0233] 一般式 (L-1) で表される化合物は一般式 (L-1-1) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

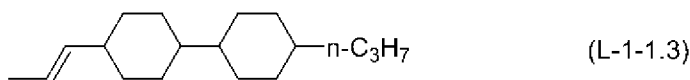
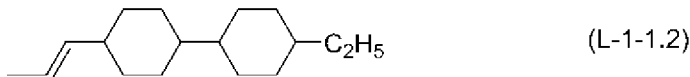
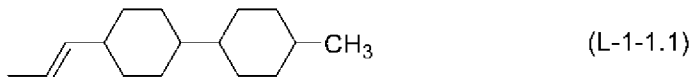
[0234] [化40]



[0235] (式中 R^{L12} は一般式 (L-1) における意味と同じ意味を表す。)

一般式 (L-1-1) で表される化合物は、式 (L-1-1.1) から式 (L-1-1.3) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式 (L-1-1.2) 又は式 (L-1-1.3) で表される化合物であることが好ましく、特に、式 (L-1-1.3) で表される化合物であることが好ましい。

[0236] [化41]



[0237] 本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-1.3) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%であり、3%である。

[0238] 一般式 (L-1) で表される化合物は一般式 (L-1-2) で表される化

化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

[0239] [化42]

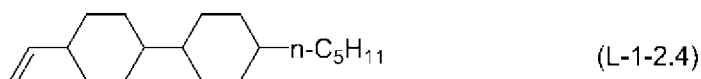
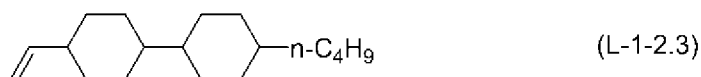
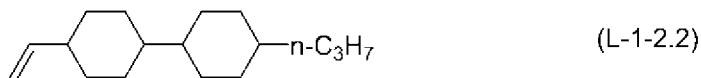
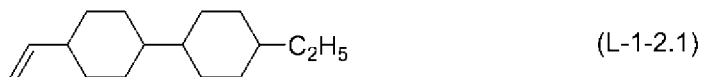


[0240] (式中 R^{L12} は一般式(L-1)における意味と同じ意味を表す。)

本発明の組成物の総量に対しての式(L-1-2)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、5%であり、10%であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、35%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、42%であり、40%であり、38%であり、35%であり、33%であり、30%である。

[0241] さらに、一般式(L-1-2)で表される化合物は、式(L-1-2.1)から式(L-1-2.4)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(L-1-2.2)から式(L-1-2.4)で表される化合物であることが好ましい。特に、式(L-1-2.2)で表される化合物は本発明の組成物の応答速度を特に改善するため好ましい。また、応答速度よりも高い T_{ni} を求めるときは、式(L-1-2.3)又は式(L-1-2.4)で表される化合物を用いることが好ましい。式(L-1-2.3)及び式(L-1-2.4)で表される化合物の含有量は、低温での溶解度を良くするために30%以上にするのは好ましくない。

[0242] [化43]



[0243] 本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-2, 2) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、10%であり、15%であり、18%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、33%であり、35%であり、38%であり、40%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、43%であり、40%であり、38%であり、35%であり、32%であり、30%であり、27%であり、25%であり、22%である。

[0244] 本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-1, 3) で表される化合物及び式 (L-1-2, 2) で表される化合物の合計の好ましい含有量の下限値は、10%であり、15%であり、20%であり、25%であり、27%であり、30%であり、35%であり、40%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、43%であり、40%であり、38%であり、35%であり、32%であり、30%であり、27%であり、25%であり、22%である。

[0245] 一般式 (L-1) で表される化合物は一般式 (L-1-3) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

[0246] [化44]



[0247] (式中 R^{L13} 及び R^{L14} はそれぞれ独立して炭素原子数 1~8 のアルキル基又は炭素原子数 1~8 のアルコキシ基を表す。)

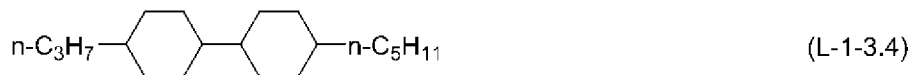
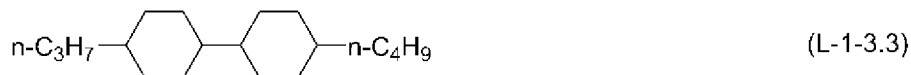
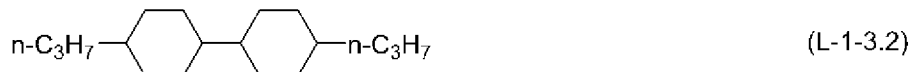
R^{L13} 及び R^{L14} は、直鎖状の炭素原子数 1~5 のアルキル基、直鎖状の炭素原子数 1~4 のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数 2~5 のアルケニル基が好ましい。

[0248] 本発明の組成物の総量に対しての式 (L-1-3) で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、5%であり、10%であり、13%

であり、15%であり、17%であり、20%であり、23%であり、25%であり、30%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、60%であり、55%であり、50%であり、45%であり、40%であり、37%であり、35%であり、33%であり、30%であり、27%であり、25%であり、23%であり、20%であり、17%であり、15%であり、13%であり、10%である。

さらに、一般式(L-1-3)で表される化合物は、式(L-1-3.1)から式(L-1-3.12)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(L-1-3.1)、式(L-1-3.3)又は式(L-1-3.4)で表される化合物であることが好ましい。特に、式(L-1-3.1)で表される化合物は本発明の組成物の応答速度を特に改善するため好ましい。また、応答速度よりも高い T_{ni} を求めるときは、式(L-1-3.3)、式(L-1-3.4)、式(L-1-3.11)及び式(L-1-3.12)で表される化合物を用いることが好ましい。式(L-1-3.3)、式(L-1-3.4)、式(L-1-3.11)及び式(L-1-3.12)で表される化合物の合計の含有量は、低温での溶解度を良くするために20%以上にすることは好ましくない。

[0249] [化45]

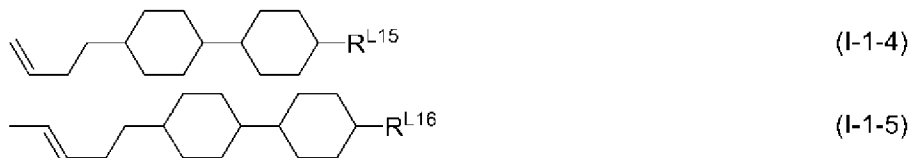


[0250] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-1-3.1)で表される化合物

の好ましい含有量の下限值は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、13%であり、15%であり、18%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、20%であり、17%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%である。

[0251] 一般式(L-1)で表される化合物は一般式(L-1-4)及び/又は(L-1-5)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましい。

[0252] [化46]



[0253] (式中 R^{L15} 及び R^{L16} はそれぞれ独立して炭素原子数1~8のアルキル基又は炭素原子数1~8のアルコキシ基を表す。)

R^{L15} 及び R^{L16} は、直鎖状の炭素原子数1~5のアルキル基、直鎖状の炭素原子数1~4のアルコキシ基及び直鎖状の炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましい。

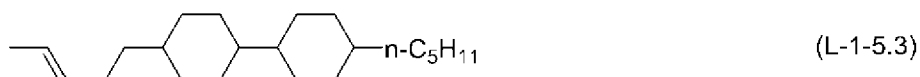
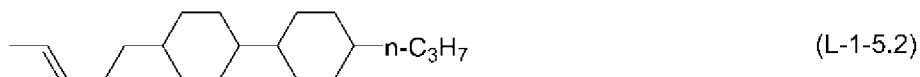
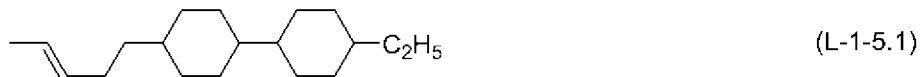
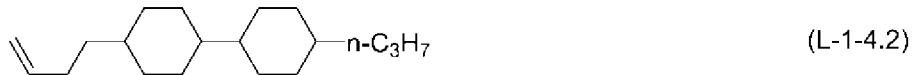
[0254] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-1-4)で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1%であり、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、25%であり、23%であり、20%であり、17%であり、15%であり、13%であり、10%である。

[0255] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-1-5)で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1%であり、5%であり、10%であり、13%であり、15%であり、17%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、25%であり、23%であり、20%であり、17%であり、15%であり、13%であり、10%である。

[0256] さらに、一般式(L-1-4)及び(L-1-5)で表される化合物は、

式(L-1-4.1)から式(L-1-5.3)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(L-1-4.2)又は式(L-1-5.2)で表される化合物であることが好ましい。

[0257] [化47]



[0258] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-1-4.2)で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、13%であり、15%であり、18%であり、20%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、20%であり、17%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%である。

[0259] 式(L-1-1.3)、式(L-1-2.2)、式(L-1-3.1)、式(L-1-3.3)、式(L-1-3.4)、式(L-1-3.11)及び式(L-1-3.12)で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましく、式(L-1-1.3)、式(L-1-2.2)、式(L-1-3.1)、式(L-1-3.3)、式(L-1-3.4)及び式(L-1-4.2)で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましく、これら化合物の合計の含有量の好ましい含有量の下限值は、本発明の組成物の総量に対して、1%であり、2%であ

り、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、13%であり、15%であり、18%であり、20%であり、23%であり、25%であり、27%であり、30%であり、33%であり、35%であり、上限値は、本発明の組成物の総量に対して、80%であり、70%であり、60%であり、50%であり、45%であり、40%であり、37%であり、35%であり、33%であり、30%であり、28%であり、25%であり、23%であり、20%である。組成物の信頼性を重視する場合には、式(L-1-3.1)、式(L-1-3.3)及び式(L-1-3.4)で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましく、組成物の応答速度を重視する場合には、式(L-1-1.3)、式(L-1-2.2)で表される化合物から選ばれる2種以上の化合物を組み合わせることが好ましい。

[0260] 一般式(L-2)で表される化合物は下記の化合物である。

[0261] [化48]



[0262] (式中、 R^{L21} 及び R^{L22} はそれぞれ独立して、一般式(L)における R^{L1} 及び R^{L2} と同じ意味を表す。)

R^{L21} は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、 R^{L22} は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましい。

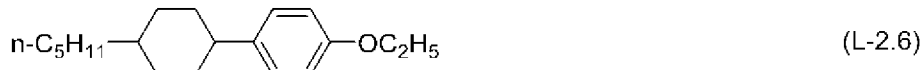
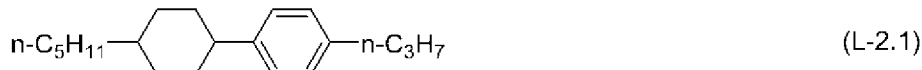
[0263] 一般式(L-1)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

[0264] 低温での溶解性を重視する場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、反対に、応答速度を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0265] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-2)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%である。好ましい含有量の上限値は、本発明の組成物の総量に対して、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%であり、3%である。

[0266] さらに、一般式(L-2)で表される化合物は、式(L-2.1)から式(L-2.6)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(L-2.1)、式(L-2.3)、式(L-2.4)及び式(L-2.6)で表される化合物であることが好ましい。

[0267] [化49]



[0268] 一般式(L-3)で表される化合物は下記の化合物である。

[0269] [化50]



[0270] (式中、 $\text{R}^{\text{L}31}$ 及び $\text{R}^{\text{L}32}$ はそれぞれ独立して、一般式(L)における $\text{R}^{\text{L}1}$ 及

び R^{L2} と同じ意味を表す。)

R^{L31} 及び R^{L32} はそれぞれ独立して炭素原子数1～5のアルキル基、炭素原子数4～5のアルケニル基又は炭素原子数1～4のアルコキシ基が好ましい。

[0271] 一般式(L-3)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせて使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

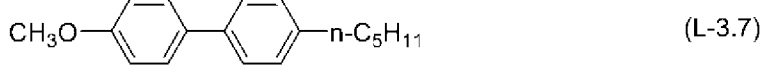
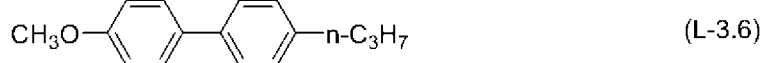
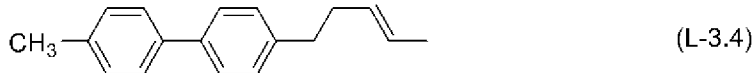
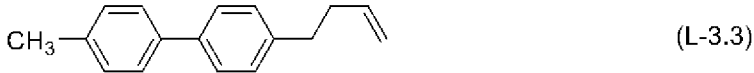
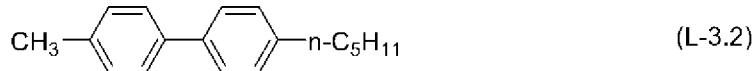
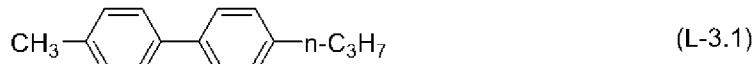
[0272] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-3)で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%である。好ましい含有量の上限值は、本発明の組成物の総量に対して、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%であり、7%であり、6%であり、5%であり、3%である。

[0273] 高い複屈折率を得る場合は含有量を多めに設定すると効果が高く、反対に、高い T_{ni} を重視する場合は含有量を少なめに設定すると効果が高い。さらに、滴下痕や焼き付き特性を改良する場合は、含有量の範囲を中間に設定することが好ましい。

[0274] さらに、一般式(L-3)で表される化合物は、式(L-3.1)から式(L-3.4)で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、式(L-3.2)から式(L-3.7)で表される化合物であることが好ましい。

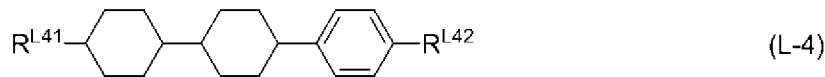
[0275]

[化51]



[0276] 一般式 (L-4) で表される化合物は下記の化合物である。

[0277] [化52]



[0278] (式中、 $\text{R}^{\text{L}41}$ 及び $\text{R}^{\text{L}42}$ はそれぞれ独立して、一般式 (L) における $\text{R}^{\text{L}1}$ 及び $\text{R}^{\text{L}2}$ と同じ意味を表す。)

$\text{R}^{\text{L}41}$ は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、 $\text{R}^{\text{L}42}$ は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましい。)

一般式 (L-4) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせ使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせ使用する。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

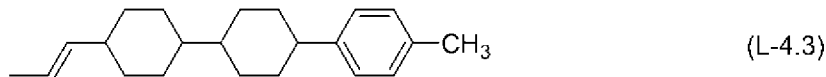
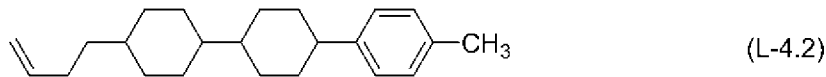
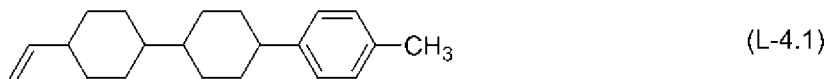
[0279] 本発明の組成物において、一般式 (L-4) で表される化合物の含有量は、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率、プロセス適合性

、滴下痕、焼き付き、誘電率異方性などの求められる性能に応じて適宜調整する必要がある。

[0280] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-4)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、14%であり、16%であり、20%であり、23%であり、26%であり、30%であり、35%であり、40%である。本発明の組成物の総量に対しての式(L-4)で表される化合物の好ましい含有量の上限値は、50%であり、40%であり、35%であり、30%であり、20%であり、15%であり、10%であり、5%である。

[0281] 一般式(L-4)で表される化合物は、例えば式(L-4.1)から式(L-4.3)で表される化合物であることが好ましい。

[0282] [化53]



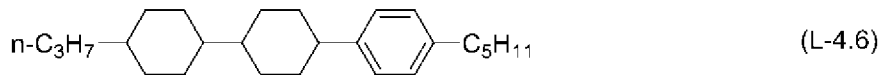
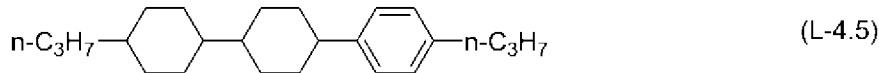
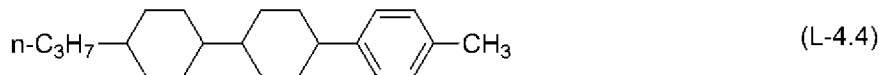
[0283] 低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて、式(L-4.1)で表される化合物を含有していても、式(L-4.2)で表される化合物を含有していても、式(L-4.1)で表される化合物と式(L-4.2)で表される化合物との両方を含有していても良いし、式(L-4.1)から式(L-4.3)で表される化合物を全て含んでいても良い。本発明の組成物の総量に対しての式(L-4.1)又は式(L-4.2)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、3%であり、5%であり、7%であり、9%であり、11%であり、12%であり、13%であり、18%であり、21%であり、好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%で

あり、8%である。

[0284] 式(L-4.1)で表される化合物と式(L-4.2)で表される化合物との両方を含有する場合は、本発明の組成物の総量に対しての両化合物の好ましい含有量の下限値は、15%であり、19%であり、24%であり、30%であり、好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

[0285] 一般式(L-4)で表される化合物は、例えば式(L-4.4)から式(L-4.6)で表される化合物であることが好ましく、式(L-4.4)で表される化合物であることが好ましい。

[0286] [化54]



[0287] 低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて、式(L-4.4)で表される化合物を含有していても、式(L-4.5)で表される化合物を含有していても、式(L-4.4)で表される化合物と式(L-4.5)で表される化合物との両方を含有していても良い。

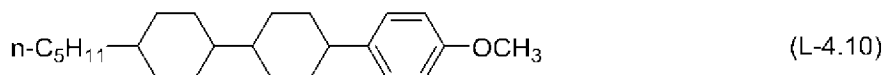
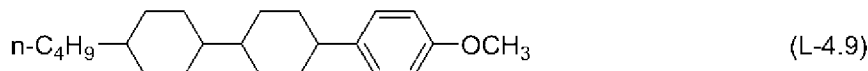
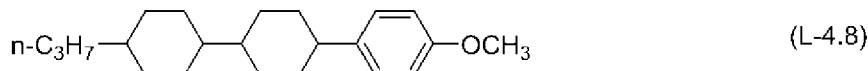
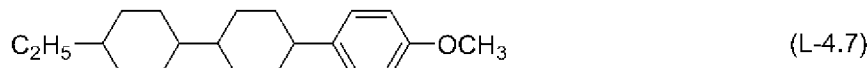
[0288] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-4.4)又は式(L-4.5)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、3%であり、5%であり、7%であり、9%であり、11%であり、12%であり、13%であり、18%であり、21%である。好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%であり、10%であり、8%である。

[0289] 式(L-4.4)で表される化合物と式(L-4.5)で表される化合物

との両方を含有する場合は、本発明の組成物の総量に対しての両化合物の好ましい含有量の下限値は、15%であり、19%であり、24%であり、30%であり、好ましい上限値は、45%であり、40%であり、35%であり、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、13%である。

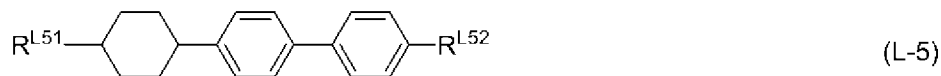
[0290] 一般式(L-4)で表される化合物は、式(L-4.7)から式(L-4.10)で表される化合物であることが好ましく、特に、式(L-4.9)で表される化合物が好ましい。

[0291] [化55]



[0292] 一般式(L-5)で表される化合物は下記の化合物である。

[0293] [化56]



[0294] (式中、 R^{L51} 及び R^{L52} はそれぞれ独立して、一般式(L)における R^{L1} 及び R^{L2} と同じ意味を表す。)

R^{L51} は炭素原子数1~5のアルキル基又は炭素原子数2~5のアルケニル基が好ましく、 R^{L52} は炭素原子数1~5のアルキル基、炭素原子数4~5のアルケニル基又は炭素原子数1~4のアルコキシ基が好ましい。

[0295] 一般式(L-5)で表される化合物は単独で使用することもできるが、2以上の化合物を組み合わせることもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせることもできる。

る。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類であり、5種類以上である。

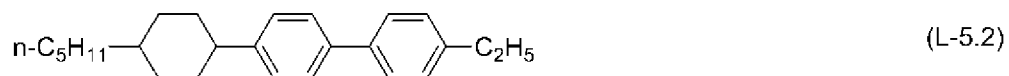
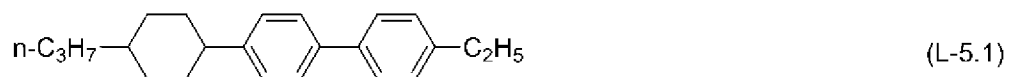
[0296] 本発明の組成物において、一般式(L-5)で表される化合物の含有量は、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率、プロセス適合性、滴下痕、焼き付き、誘電率異方性などの求められる性能に応じて適宜調整する必要がある。

[0297] 本発明の組成物の総量に対しての式(L-5)で表される化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、14%であり、16%であり、20%であり、23%であり、26%であり、30%であり、35%であり、40%である。本発明の組成物の総量に対しての式(L-5)で表される化合物の好ましい含有量の上限値は、50%であり、40%であり、35%であり、30%であり、20%であり、15%であり、10%であり、5%である

一般式(L-5)で表される化合物は、式(L-5.1)又は式(L-5.2)で表される化合物であることが好ましく、特に、式(L-5.1)で表される化合物であることが好ましい。

[0298] 本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%である。これら化合物の好ましい含有量の上限値は、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、9%である。

[0299] [化57]

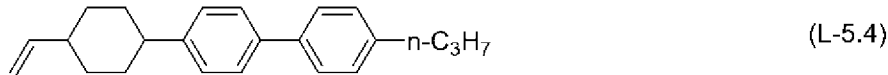
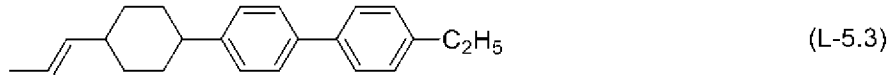


[0300] 一般式(L-5)で表される化合物は、式(L-5.3)又は式(L-5.4)で表される化合物であることが好ましい。

[0301] 本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限値

は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%である。これら化合物の好ましい含有量の上限値は、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、9%である。

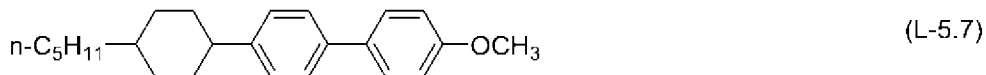
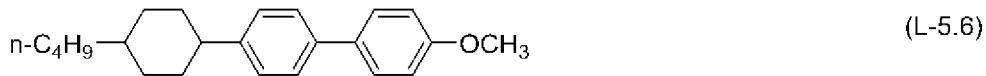
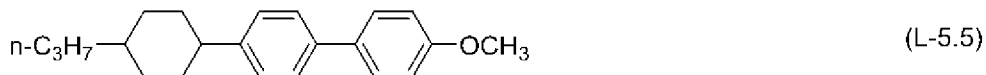
[0302] [化58]



[0303] 一般式 (L-5) で表される化合物は、式 (L-5.5) から式 (L-5.7) で表される化合物群から選ばれる化合物であることが好ましく、特に式 (L-5.7) で表される化合物であることが好ましい。

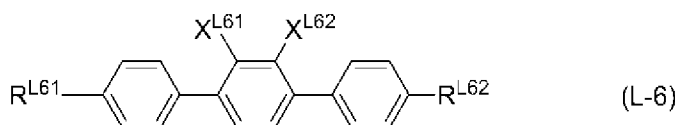
[0304] 本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%である。これら化合物の好ましい含有量の上限値は、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、9%である。

[0305] [化59]



[0306] 一般式 (L-6) で表される化合物は下記の化合物である。

[0307] [化60]



[0308] (式中、 R^{L61} 及び R^{L62} はそれぞれ独立して、一般式 (L) における R^{L1} 及び R^{L2} と同じ意味を表し、 X^{L61} 及び X^{L62} はそれぞれ独立して水素原子又はフッ素原子を表す。)

R^{L61} 及び R^{L62} はそれぞれ独立して炭素原子数1~5のアルキル基又は炭

素原子数 2～5 のアルケニル基が好ましく、 X^{L61} 及び X^{L62} のうち一方がフッ素原子他方が水素原子であることが好ましい。

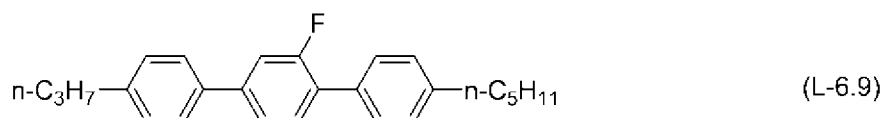
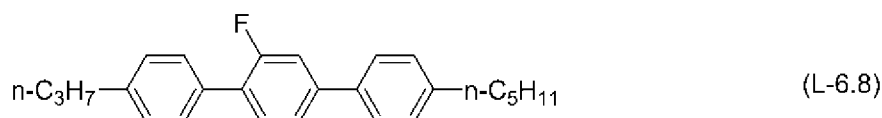
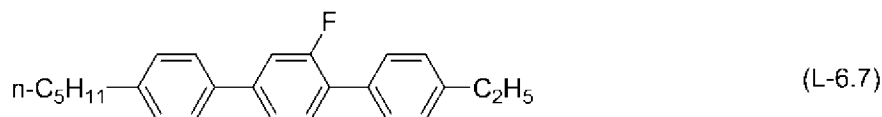
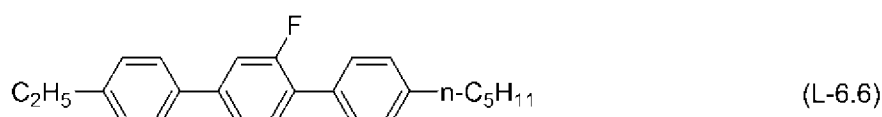
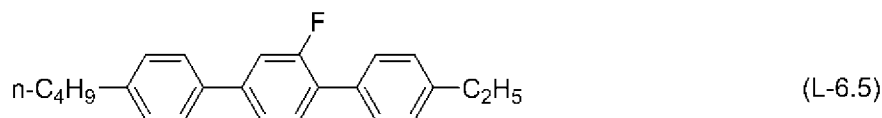
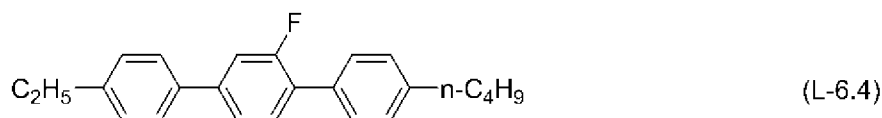
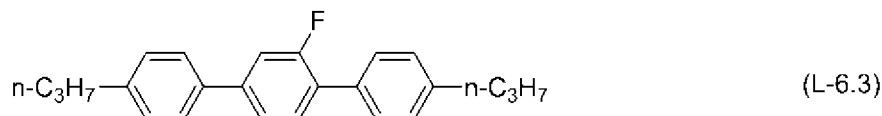
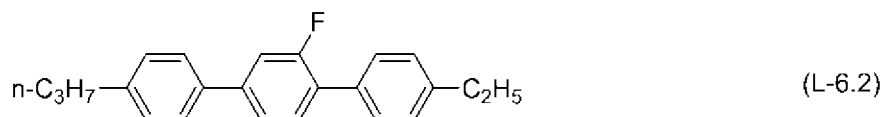
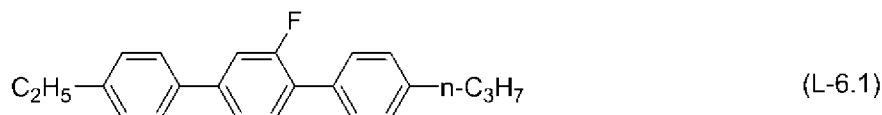
[0309] 一般式 (L-6) で表される化合物は単独で使用することもできるが、2 以上の化合物を組み合わせて使用することもできる。組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて適宜組み合わせる。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては 1 種類であり、2 種類であり、3 種類であり、4 種類であり、5 種類以上である。

[0310] 本発明の組成物の総量に対しての式 (L-6) で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、14%であり、16%であり、20%であり、23%であり、26%であり、30%であり、35%であり、40%である。本発明の組成物の総量に対しての式 (L-6) で表される化合物の好ましい含有量の上限值は、50%であり、40%であり、35%であり、30%であり、20%であり、15%であり、10%であり、5%である。 Δn を大きくすることに重点を置く場合には含有量を多くした方が好ましく、低温での析出に重点を置いた場合には含有量は少ない方が好ましい。

[0311] 一般式 (L-6) で表される化合物は、式 (L-6.1) から式 (L-6.9) で表される化合物であることが好ましい。

[0312]

[化61]

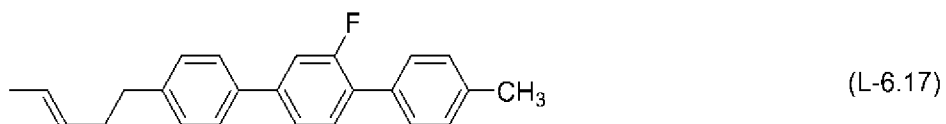
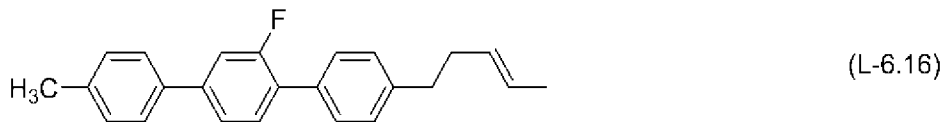
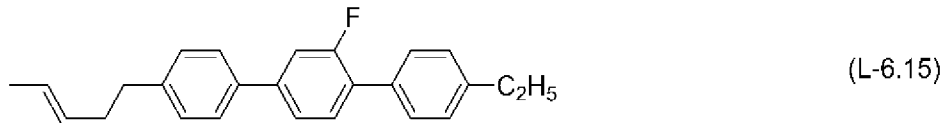
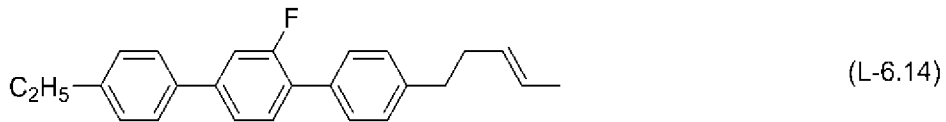
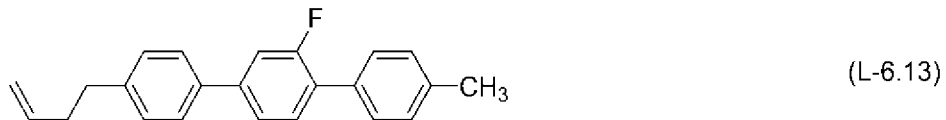
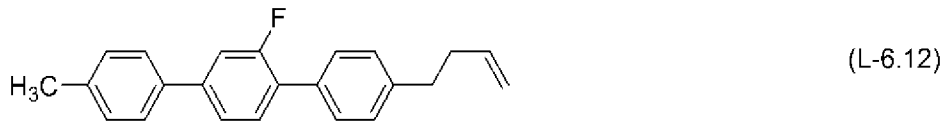
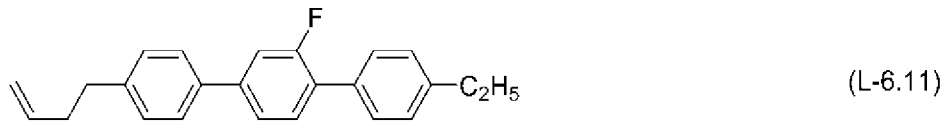
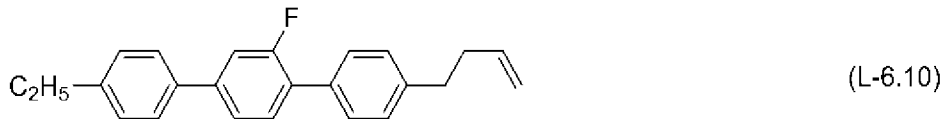


[0313] 組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、これらの化合物の中から1種～3種類含有することが好ましく、1種～4種類含有することがさらに好ましい。また、選ぶ化合物の分子量分布が広いことも溶解性に有効であるため、例えば、式(L-6.1)又は(L-6.2)で表される化合物から1種類、式(L-6.4)又は(L-6.5)で表される化合物から1種類、式(L-6.6)又は式(L-6.7)で表される化合物から1種類、式(L-6.8)又は(L-6.9)で表される化合物から1種類の化合物を選び、これらを適宜組み合わせることが好ましい。その中でも

、式 (L-6. 1)、式 (L-6. 3) 式 (L-6. 4)、式 (L-6. 6) 及び式 (L-6. 9) で表される化合物を含むことが好ましい。

[0314] さらに、一般式 (L-6) で表される化合物は、例えば式 (L-6. 10) から式 (L-6. 17) で表される化合物であることが好ましく、その中でも、式 (L-6. 11) で表される化合物であることが好ましい。

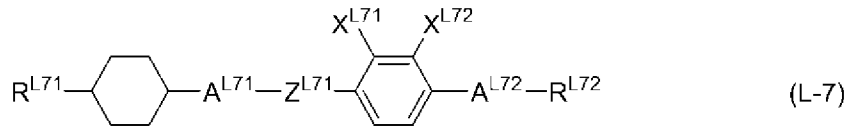
[0315] [化62]



[0316] 本発明の組成物の総量に対してのこれら化合物の好ましい含有量の下限値は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%である。これら化合物の好ましい含有量の上限值は、20%であり、15%であり、13%であり、10%であり、9%である。

[0317] 一般式（L-7）で表される化合物は下記の化合物である。

[0318] [化63]



[0319] (式中、 R^{L71} 及び R^{L72} はそれぞれ独立して一般式（L）における R^{L1} 及び R^{L2} と同じ意味を表し、 A^{L71} 及び A^{L72} はそれぞれ独立して一般式（L）における A^{L2} 及び A^{L3} と同じ意味を表すが、 A^{L71} 及び A^{L72} 上の水素原子はそれぞれ独立してフッ素原子によって置換されていてもよく、 Z^{L71} は一般式（L）における Z^{L2} と同じ意味を表し、 X^{L71} 及び X^{L72} はそれぞれ独立してフッ素原子又は水素原子を表す。)

式中、 R^{L71} 及び R^{L72} はそれぞれ独立して炭素原子数1～5のアルキル基、炭素原子数2～5のアルケニル基又は炭素原子数1～4のアルコキシ基が好ましく、 A^{L71} 及び A^{L72} はそれぞれ独立して1,4-シクロヘキシレン基又は1,4-フェニレン基が好ましく、 A^{L71} 及び A^{L72} 上の水素原子はそれぞれ独立してフッ素原子によって置換されていてもよく、 Z^{L71} は単結合又はCOO-が好ましく、単結合が好ましく、 X^{L71} 及び X^{L72} は水素原子が好ましい。

[0320] 組み合わせることができる化合物の種類に特に制限は無いが、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率などの求められる性能に応じて組み合わせる。使用する化合物の種類は、例えば本発明の一つの実施形態としては1種類であり、2種類であり、3種類であり、4種類である。

[0321] 本発明の組成物において、一般式（L-7）で表される化合物の含有量は、低温での溶解性、転移温度、電気的な信頼性、複屈折率、プロセス適合性、滴下痕、焼き付き、誘電率異方性などの求められる性能に応じて適宜調整する必要がある。

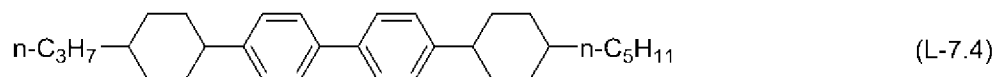
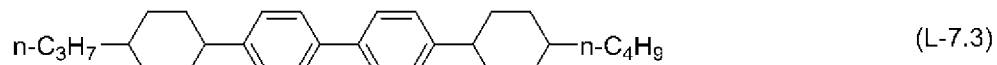
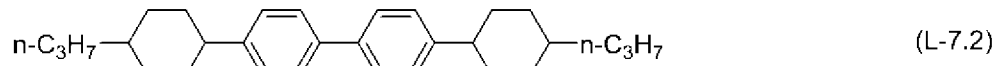
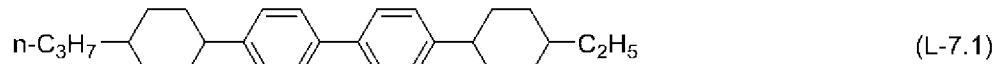
[0322] 本発明の組成物の総量に対しての式（L-7）で表される化合物の好ましい含有量の下限值は、1%であり、2%であり、3%であり、5%であり、7%であり、10%であり、14%であり、16%であり、20%である。

本発明の組成物の総量に対しての式 (L-7) で表される化合物の好ましい含有量の上限值は、30%であり、25%であり、23%であり、20%であり、18%であり、15%であり、10%であり、5%である。

[0323] 本発明の組成物が高い T_{ni} の実施形態が望まれる場合は式 (L-7) で表される化合物の含有量を多めにするのが好ましく、低粘度の実施形態が望まれる場合は含有量を少なめにするのが好ましい。

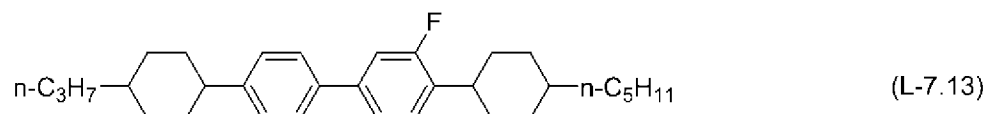
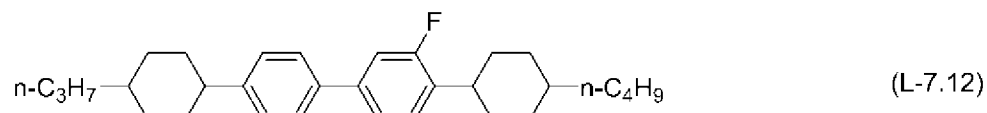
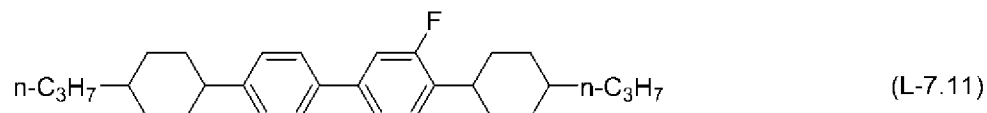
[0324] さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.1) から式 (L-7.4) で表される化合物であることが好ましく、式 (L-7.2) で表される化合物であることが好ましい。

[0325] [化64]



[0326] さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.11) から式 (L-7.13) で表される化合物であることが好ましく、式 (L-7.11) で表される化合物であることが好ましい。

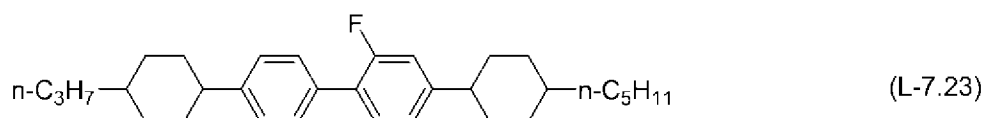
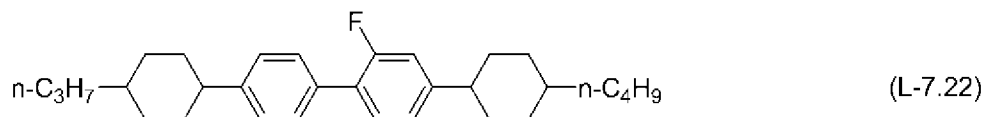
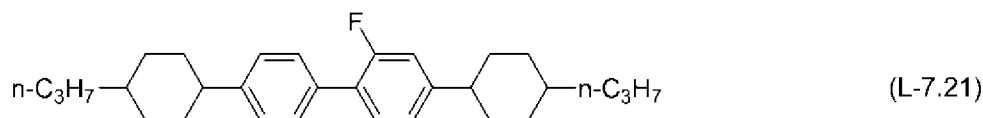
[0327] [化65]



[0328] さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.21) から式 (L-7.23) で表される化合物である。式 (L-7.21) で表され

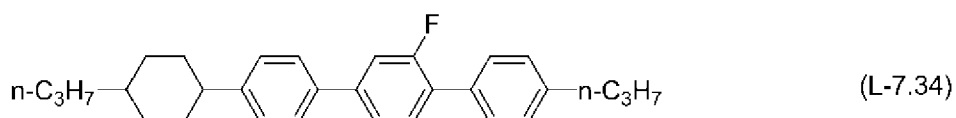
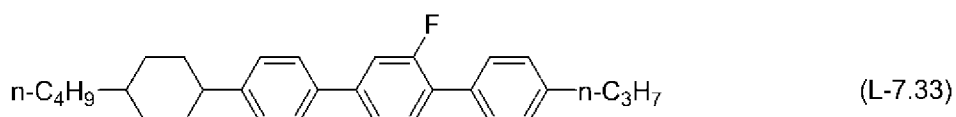
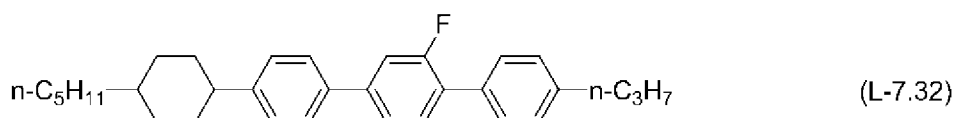
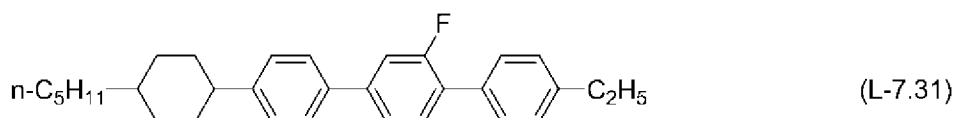
る化合物であることが好ましい。

[0329] [化66]



[0330] さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.31) から式 (L-7.34) で表される化合物であることが好ましく、式 (L-7.31) 又は/及び式 (L-7.32) で表される化合物であることが好ましい。

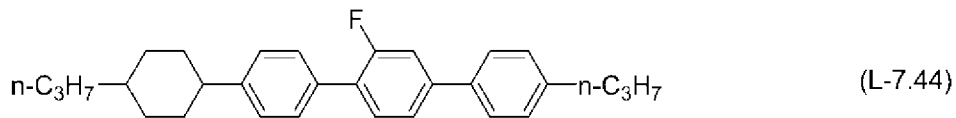
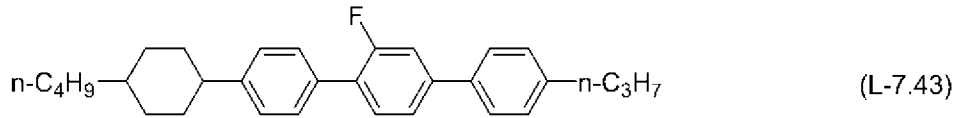
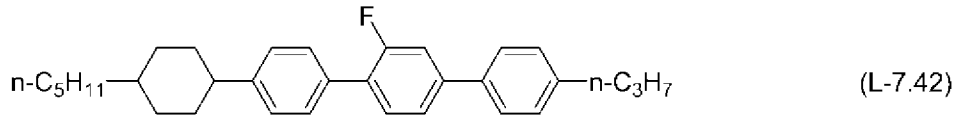
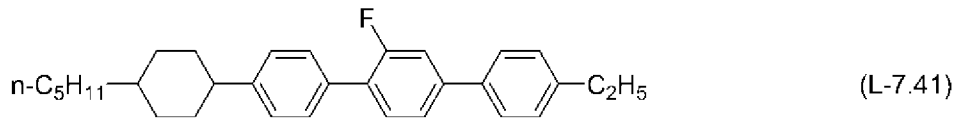
[0331] [化67]



[0332] さらに、一般式 (L-7) で表される化合物は、式 (L-7.41) から式 (L-7.44) で表される化合物であることが好ましく、式 (L-7.41) 又は/及び式 (L-7.42) で表される化合物であることが好ましい。

[0333]

[化68]



[0334] 本発明の組成物の総量に対しての一般式 (i)、一般式 (L) 及び (N) で表される化合物の合計の好ましい含有量の下限値は、80%であり、85%であり、88%であり、90%であり、92%であり、93%であり、94%であり、95%であり、96%であり、97%であり、98%であり、99%であり、100%である。好ましい含有量の上限値は、100%であり、99%であり、98%であり、95%である。

[0335] 本発明の組成物の総量に対しての一般式 (i)、一般式 (L-1) から (L-7) 及び (M-1) から (M-8) で表される化合物の合計の好ましい含有量の下限値は、80%であり、85%であり、88%であり、90%であり、92%であり、93%であり、94%であり、95%であり、96%であり、97%であり、98%であり、99%であり、100%である。好ましい含有量の上限値は、100%であり、99%であり、98%であり、95%である。

[0336] 本願発明の組成物は、分子内に過酸 (-CO-O-O-) 構造等の酸素原子同士が結合した構造を持つ化合物を含有しないことが好ましい。

[0337] 組成物の信頼性及び長期安定性を重視する場合にはカルボニル基を有する化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して5%以下とすることが好ましく、3%以下とすることがより好ましく、1%以下とすることが更に好まし

く、実質的に含有しないことが最も好ましい。

[0338] UV照射による安定性を重視する場合、塩素原子が置換している化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して15%以下とすることが好ましく、10%以下とすることが好ましく、8%以下とすることが好ましく、5%以下とすることがより好ましく、3%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

[0339] 分子内の環構造がすべて6員環である化合物の含有量を多くすることが好ましく、分子内の環構造がすべて6員環である化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して80%以上とすることが好ましく、90%以上とすることがより好ましく、95%以上とすることが更に好ましく、実質的に分子内の環構造がすべて6員環である化合物のみで組成物を構成することが最も好ましい。

[0340] 組成物の酸化による劣化を抑えるためには、環構造としてシクロヘキセニレン基を有する化合物の含有量を少なくすることが好ましく、シクロヘキセニレン基を有する化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して10%以下とすることが好ましく、8%以下とすることが好ましく、5%以下とすることがより好ましく、3%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

[0341] 粘度の改善及び T_{ni} の改善を重視する場合には、水素原子がハロゲンに置換されていてもよい2-メチルベンゼン-1,4-ジイル基を分子内に持つ化合物の含有量を少なくすることが好ましく、前記2-メチルベンゼン-1,4-ジイル基を分子内に持つ化合物の含有量を前記組成物の総質量に対して10%以下とすることが好ましく、8%以下とすることが好ましく、5%以下とすることがより好ましく、3%以下とすることが好ましく、実質的に含有しないことが更に好ましい。

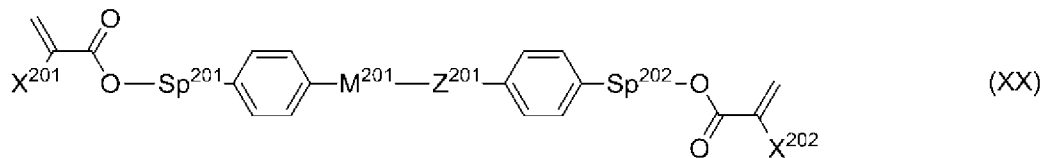
[0342] 本願において実質的に含有しないとは、意図せずに含有する物を除いて含有しないという意味である。

[0343] 本発明の第一実施形態の組成物に含有される化合物が、側鎖としてアルケ

ニル基を有する場合、前記アルケニル基がシクロヘキサンに結合している場合には当該アルケニル基の炭素原子数は2～5であることが好ましく、前記アルケニル基がベンゼンに結合している場合には当該アルケニル基の炭素原子数は4～5であることが好ましく、前記アルケニル基の不飽和結合とベンゼンは直接結合していないことが好ましい。

[0344] 本発明の組成物には、PSモード、横電界型PSAモード又は横電界型PSVAモードなどの液晶表示素子を作製するために、重合性化合物を含有することができる。使用できる重合性化合物として、光などのエネルギー線により重合が進行する光重合性モノマーなどが挙げられ、構造として、例えば、ビフェニル誘導体、ターフェニル誘導体などの六員環が複数連結した液晶骨格を有する重合性化合物などが挙げられる。更に具体的には、一般式(X)

[0345] [化69]



[0346] (式中、 X^{201} 及び X^{202} はそれぞれ独立して、水素原子又はメチル基を表し、
、
 Sp^{201} 及び Sp^{202} はそれぞれ独立して、単結合、炭素原子数1～8のアルキレン基又は $-O-(CH_2)_s-$ (式中、 s は2から7の整数を表し、酸素原子は芳香環に結合するものとする。)が好ましく、
 Z^{201} は $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CF_2CF_2-$ 、 $-CH=CH-COO-$ 、 $-CH=CH-OCO-$ 、 $-COO-CH=CH-$ 、 $-OCO-CH=CH-$ 、 $-COO-CH_2CH_2-$ 、 $-OCO-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-COO-$ 、 $-CH_2CH_2-OCO-$ 、 $-COO-CH_2-$ 、 $-OCO-CH_2-$ 、 $-CH_2-COO-$ 、 $-CH_2-OCO-$ 、 $-CY^1=C Y^2-$ (式中、 Y^1 及び Y^2 はそれぞれ独立して、フッ素原子又は水素原子を表す。)、 $-C\equiv C$

—又は単結合を表し、

M^{201} は1, 4-フェニレン基、トランス-1, 4-シクロヘキシレン基又は単結合を表し、式中の全ての1, 4-フェニレン基は、任意の水素原子がフッ素原子により置換されていても良い。)で表される二官能モノマーが好ましい。

[0347] X^{201} 及び X^{202} は、何れも水素原子を表すジアクリレート誘導体、何れもメチル基を有するジメタクリレート誘導体の何れも好ましく、一方が水素原子を表しもう一方がメチル基を表す化合物も好ましい。これらの化合物の重合速度は、ジアクリレート誘導体が最も早く、ジメタクリレート誘導体が遅く、非対称化合物がその中間であり、その用途により好ましい態様を用いることができる。PSA表示素子においては、ジメタクリレート誘導体が特に好ましい。

[0348] $S p^{201}$ 及び $S p^{202}$ はそれぞれ独立して、単結合、炭素原子数1~8のアルキレン基又は $-O-(CH_2)_s-$ を表すが、PSA表示素子においては少なくとも一方が単結合であることが好ましく、共に単結合を表す化合物又は一方が単結合でもう一方が炭素原子数1~8のアルキレン基又は $-O-(CH_2)_s-$ を表す態様が好ましい。この場合1~4のアルキル基が好ましく、 s は1~4が好ましい。

[0349] Z^{201} は、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CF_2CF_2-$ 又は単結合が好ましく、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 又は単結合がより好ましく、単結合が特に好ましい。

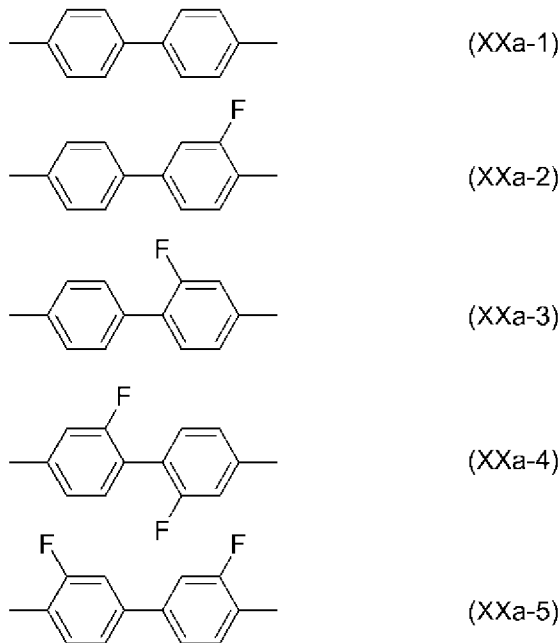
[0350] M^{201} は任意の水素原子がフッ素原子により置換されていても良い1, 4-フェニレン基、トランス-1, 4-シクロヘキシレン基又は単結合を表すが、1, 4-フェニレン基又は単結合が好ましい。Cが単結合以外の環構造を表す場合、 Z^{201} は単結合以外の連結基も好ましく、 M^{201} が単結合の場合、 Z^{201} は単結合が好ましい。

[0351] これらの点から、一般式(XX)において、 $S p^{201}$ 及び $S p^{202}$ の間の環

構造は、具体的には次に記載する構造が好ましい。

[0352] 一般式 (XX) において、 M^{201} が単結合を表し、環構造が二つの環で形成される場合において、次の式 (XXa-1) から式 (XXa-5) を表すことが好ましく、式 (XXa-1) から式 (XXa-3) を表すことがより好ましく、式 (XXa-1) を表すことが特に好ましい。

[0353] [化70]



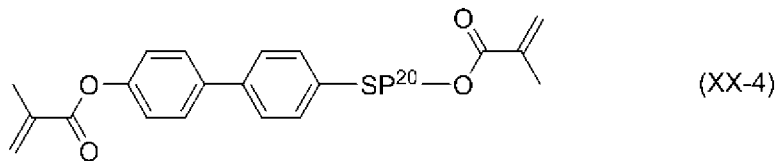
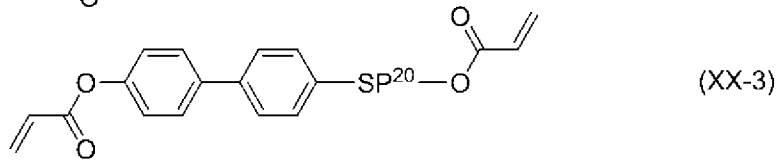
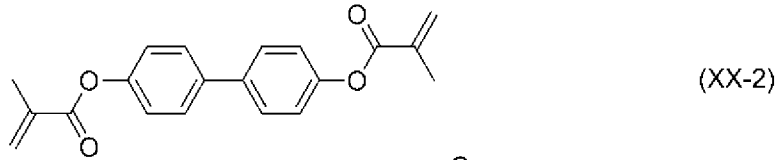
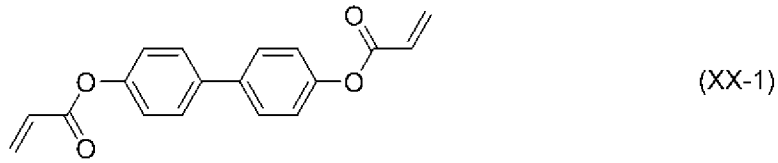
[0354] (式中、両端は Sp^{201} 又は Sp^{202} に結合するものとする。)

これらの骨格を含む重合性化合物は重合後の配向規制力がP S A型液晶表示素子に最適であり、良好な配向状態が得られることから、表示ムラが抑制されるか、又は、全く発生しない。

[0355] 以上のことから、重合性モノマーとしては、一般式 (XX-1) ~ 一般式 (XX-4) が特に好ましく、中でも一般式 (XX-2) が最も好ましい。

[0356]

[化71]

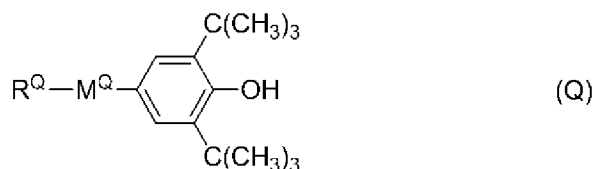


[0357] (式中、 Sp^{20} は炭素原子数2から5のアルキレン基を表す。)

本発明の組成物にモノマーを添加する場合において、重合開始剤が存在しない場合でも重合は進行するが、重合を促進するために重合開始剤を含有していてもよい。重合開始剤としては、ベンゾインエーテル類、ベンゾフェノン類、アセトフェノン類、ベンジルケタール類、アシルフォスフィンオキサイド類等が挙げられる。

[0358] 本発明における組成物は、さらに、一般式(Q)で表される化合物を含有することができる。

[0359] [化72]



[0360] (式中、 R^Q は炭素原子数1から22の直鎖アルキル基又は分岐鎖アルキル基を表し、該アルキル基中の1つ又は2つ以上の CH_2 基は、酸素原子が直接隣接しないように、 $-O-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-COO-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ で置換されてよく、 M^Q はトラ

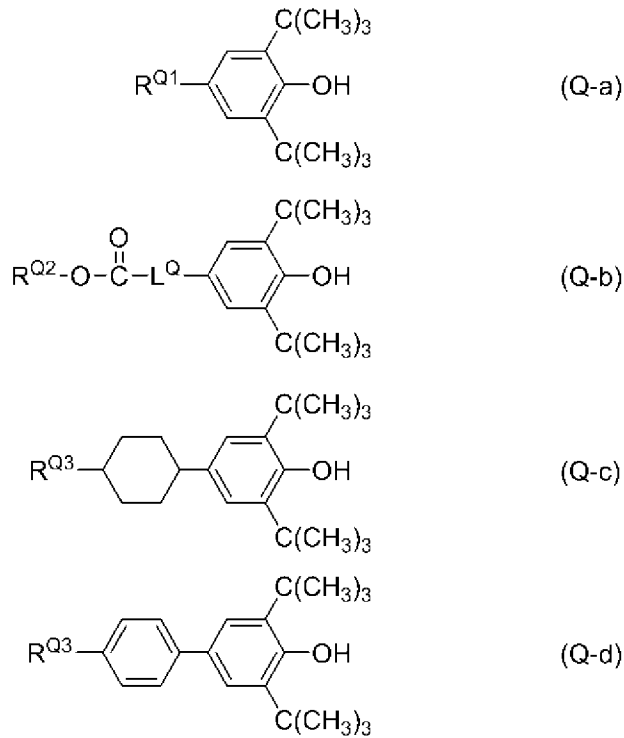
ンスー1, 4-シクロヘキシレン基、1, 4-フェニレン基又は単結合を表す。))

R^Qは炭素原子数1から22の直鎖アルキル基又は分岐鎖アルキル基を表し、該アルキル基中の1つ又は2つ以上のCH₂基は、酸素原子が直接隣接しないように、-O-、-CH=CH-、-CO-、-OCO-、-COO-、-C≡C-、-CF₂O-、-OCF₂-で置換されてよいが、炭素原子数1から10の直鎖アルキル基、直鎖アルコキシ基、1つのCH₂基が-OCO-又は-COO-に置換された直鎖アルキル基、分岐鎖アルキル基、分岐アルコキシ基、1つのCH₂基が-OCO-又は-COO-に置換された分岐鎖アルキル基が好ましく、炭素原子数1から20の直鎖アルキル基、1つのCH₂基が-OCO-又は-COO-に置換された直鎖アルキル基、分岐鎖アルキル基、分岐アルコキシ基、1つのCH₂基が-OCO-又は-COO-に置換された分岐鎖アルキル基が更に好ましい。M^Qはトランスー1, 4-シクロヘキシレン基、1, 4-フェニレン基又は単結合を表すが、トランスー1, 4-シクロヘキシレン基又は1, 4-フェニレン基が好ましい。

[0361] 一般式(Q)で表される化合物は、より具体的には、下記の一般式(Q-a)から一般式(Q-d)で表される化合物が好ましい。

[0362]

[化73]



[0363] 式中、 R^{Q1} は炭素原子数1から10の直鎖アルキル基又は分岐鎖アルキル基が好ましく、 R^{Q2} は炭素原子数1から20の直鎖アルキル基又は分岐鎖アルキル基が好ましく、 R^{Q3} は炭素原子数1から8の直鎖アルキル基、分岐鎖アルキル基、直鎖アルコキシ基又は分岐鎖アルコキシ基が好ましく、 L^Q は炭素原子数1から8の直鎖アルキレン基又は分岐鎖アルキレン基が好ましい。一般式(Q-a)から一般式(Q-d)で表される化合物中、一般式(Q-c)及び一般式(Q-d)で表される化合物が更に好ましい。

[0364] 本願発明の組成物において、一般式(Q)で表される化合物を1種又は2種を含有することが好ましく、1種から5種含有することが更に好ましく、その含有量は0.001から1%であることが好ましく、0.001から0.1%が更に好ましく、0.001から0.05%が特に好ましい。

[0365] 本発明の重合性化合物を含有した組成物は、これに含まれる重合性化合物が紫外線照射により重合することで液晶配向能が付与され、組成物の複屈折を利用して光の透過量を制御する液晶表示素子に使用される。液晶表示素子として、AM-LCD(アクティブマトリックス液晶表示素子)、TN(

ネマチック液晶表示素子)、STN-LCD(超ねじれネマチック液晶表示素子)、OCB-LCD及びIPS-LCD(インプレーンスイッチング液晶表示素子)に有用であるが、AM-LCDに特に有用であり、透過型あるいは反射型の液晶表示素子に用いることができる。

[0366] 液晶表示素子に使用される液晶セルの2枚の基板はガラス又はプラスチックの如き柔軟性をもつ透明な材料を用いることができ、一方はシリコン等の不透明な材料でも良い。透明電極層を有する透明基板は、例えば、ガラス板等の透明基板上にインジウムスズオキシド(ITO)をスパッタリングすることにより得ることができる。

[0367] カラーフィルターは、例えば、顔料分散法、印刷法、電着法又は、染色法等によって作成することができる。顔料分散法によるカラーフィルターの作成方法を一例に説明すると、カラーフィルター用の硬化性着色組成物を、該透明基板上に塗布し、パターンニング処理を施し、そして加熱又は光照射により硬化させる。この工程を、赤、緑、青の3色についてそれぞれ行うことで、カラーフィルター用の画素部を作成することができる。その他、該基板上に、TFT、薄膜ダイオード、金属絶縁体金属比抵抗素子等の能動素子を設けた画素電極を設置してもよい。

[0368] 前記基板を、透明電極層が内側となるように対向させる。その際、スペーサーを介して、基板の間隔を調整してもよい。このときは、得られる調光層の厚さが1~100 μm となるように調整するのが好ましい。1.5から10 μm が更に好ましく、偏光板を使用する場合は、コントラストが最大になるように液晶の屈折率異方性 Δn とセル厚 d との積を調整することが好ましい。又、二枚の偏光板がある場合は、各偏光板の偏光軸を調整して視野角やコントラストが良好になるように調整することもできる。更に、視野角を広げるための位相差フィルムも使用することもできる。スペーサーとしては、例えば、ガラス粒子、プラスチック粒子、アルミナ粒子、フォトレジスト材料などからなる柱状スペーサー等が挙げられる。その後、エポキシ系熱硬化性組成物等のシール剤を、液晶注入口を設けた形で該基板にスクリーン印刷し

、該基板同士を貼り合わせ、加熱しシール剤を熱硬化させる。

[0369] 2枚の基板間に重合性化合物含有組成物を挟持させる方法は、通常の真空注入法又はODF法などを用いることができるが、真空注入法においては滴下痕が発生しないものの、注入の跡が残る課題を有しているものであるが、本願発明においては、ODF法を用いて製造する表示素子により好適に使用することができる。ODF法の液晶表示素子製造工程においては、バックプレーン又はフロントプレーンのどちらか一方の基板にエポキシ系光熱併用硬化性などのシール剤を、ディスペンサーを用いて閉ループ土手状に描画し、その中に脱気下で所定量の組成物を滴下後、フロントプレーンとバックプレーンを接合することによって液晶表示素子を製造することができる。本発明の組成物は、ODF工程における組成物の滴下が安定的に行えるため、好適に使用することができる。

[0370] 重合性化合物を重合させる方法としては、液晶の良好な配向性能を得るためには、適度な重合速度が望ましいので、紫外線又は電子線等の活性エネルギー線を単一又は併用又は順番に照射することによって重合させる方法が好ましい。紫外線を使用する場合、偏光光源を用いても良いし、非偏光光源を用いても良い。また、重合性化合物含有組成物を2枚の基板間に挟持させて状態で重合を行う場合には、少なくとも照射面側の基板は活性エネルギー線に対して適度な透明性が与えられていなければならない。また、光照射時にマスクを用いて特定の部分のみを重合させた後、電場や磁場又は温度等の条件を変化させることにより、未重合部分の配向状態を変化させて、更に活性エネルギー線を照射して重合させるという手段を用いても良い。特に紫外線露光する際には、重合性化合物含有組成物に交流電界を印加しながら紫外線露光することが好ましい。印加する交流電界は、周波数10Hzから10kHzの交流が好ましく、周波数60Hzから10kHzがより好ましく、電圧は液晶表示素子の所望のプレチルト角に依存して選ばれる。つまり、印加する電圧により液晶表示素子のプレチルト角を制御することができる。横電界型MVAモードの液晶表示素子においては、配向安定性及びコントラスト

の観点からプレチルト角を80度から89.9度に制御することが好ましい。

[0371] 照射時の温度は、本発明の組成物の液晶状態が保持される温度範囲内であることが好ましい。室温に近い温度、即ち、典型的には15～35℃での温度で重合させることが好ましい。紫外線を発生させるランプとしては、メタルハライドランプ、高圧水銀ランプ、超高圧水銀ランプ等を用いることができる。また、照射する紫外線の波長としては、組成物の吸収波長域でない波長領域の紫外線を照射することが好ましく、必要に応じて、紫外線をカットして使用することが好ましい。照射する紫外線の強度は、0.1mW/cm²～100W/cm²が好ましく、2mW/cm²～50W/cm²がより好ましい。照射する紫外線のエネルギー量は、適宜調整することができるが、10mJ/cm²から500J/cm²が好ましく、100mJ/cm²から200J/cm²がより好ましい。紫外線を照射する際に、強度を変化させても良い。紫外線を照射する時間は照射する紫外線強度により適宜選択されるが、10秒から3600秒が好ましく、10秒から600秒がより好ましい。

[0372] 本発明の組成物を用いた液晶表示素子は高速応答と表示不良の抑制を両立させた有用なものであり、特に、アクティブマトリックス駆動用液晶表示素子に有用であり、VAモード、PSVAモード、PSAモード、IPSモード又はECBモード用液晶表示素子に適用できる。

実施例

[0373] 以下、実施例を挙げて本発明を更に記述するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。以下の実施例及び比較例の組成物における「%」は『質量%』を意味する。化合物の純度はGC又はUPLCによって分析した。化合物および反応溶媒の略称は以下の通りである：テトラヒドロフラン（THF）、リチウムジイソプロピルアミド（LDA）

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

る「%」は『質量%』を意味する。

実施例において化合物の記載について以下の略号を用いる。

(側鎖及び連結構造)

-n : $-C_nH_{2n+1}$ 炭素原子数 n の直鎖状のアルキル基

n- : $C_nH_{2n+1}-$ 炭素原子数 n の直鎖状のアルキル基

-0n : $-OC_nH_{2n+1}$ 炭素原子数 n の直鎖状のアルコキシル基

n0- : $C_nH_{2n+1}O-$ 炭素原子数 n の直鎖状のアルコキシル基

-V : $-CH=CH_2$

V- : $CH_2=CH-$

-V1 : $-CH=CH-CH_3$

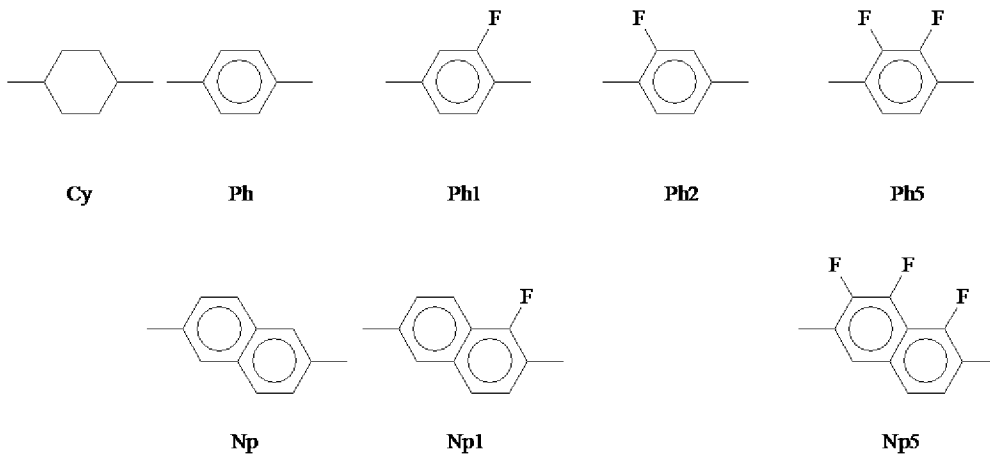
1V- : $CH_3-CH=CH-$

-0n- : $-OCH_n-$ 炭素原子数 n の直鎖状のアルコキシル連結基

-n0- : $-CH_nO-$ 炭素原子数 n の直鎖状のアルコキシル連結基

(環構造)

[0374] [化74]



[0375] 実施例中、測定した特性は以下の通りである。

[0376] T_{ni} : ネマチック相－等方性液体相転移温度 (°C)

T_{cn} : 固体相 (スメクチック相)－ネマチック相転移温度 (°C)

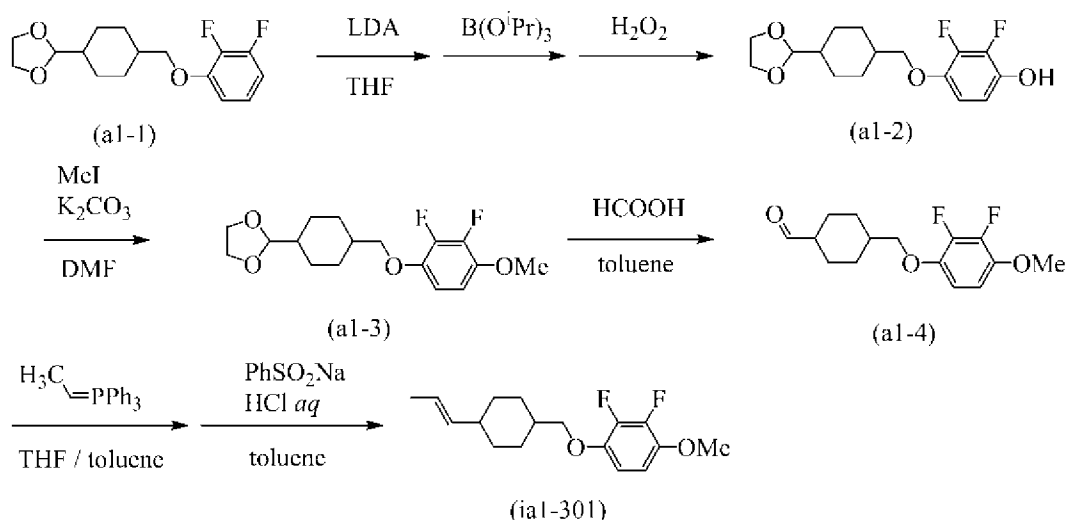
Δn : 20°Cにおける屈折率異方性

$\Delta \epsilon$: 20°Cにおける誘電率異方性

γ_1 : 20°Cにおける回転粘性 (mPa·s)

(実施例1) 化合物 (i a 1 - 3 0 1) の製造

[0377] [化75]



[0378] (化合物 (a 1 - 2) の合成) 窒素雰囲気下、攪拌装置、温度計、滴下ロートを備えた反応容器に、ジイソプロピルアミン65.3gおよびTHF500mlを加え、 -10°C に冷却した。1.6Mブチルリチウム/ヘキサン溶液374mlを -10°C にて滴下し、1時間攪拌し、次にあらかじめTHF500mlに溶解しておいた化合物 (a 1 - 1) 137.5gおよびホウ酸トリイソプロピル130.0gを -10°C にて同時に滴下し、1時間攪拌した。この反応混合物を 0°C に昇温した後、10%塩化アンモニウム水溶液700mlを加えて攪拌後、有機層を分けとり、さらに水層をTHF200mlで抽出した。得られた有機層を合わせた後、10%塩化アンモニウム水溶液500mlと飽和食塩水500mlで洗浄し、無水硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。得られた溶液を 0°C に冷却し、30%過酸化水素水71gと水210mlの混合物を加え、室温に昇温し、2時間半攪拌した。この反応混合物に亜硫酸ナトリウム水溶液700mlを加えた後、有機層を分離し、さらに水層をTHF/トルエン(体積比1/2)300mlで抽出した。得られた有機層を合わせた後、水500ml、飽和食塩水500mlで洗浄し、無水硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。得られた溶液を濃縮し、化合物 (a 1 - 2) の粗体189.4gを得た。

- [0379] (化合物 (a 1 - 3) の合成) 窒素雰囲気下、攪拌装置、温度計、冷却管を備えた反応容器に、上記のとおり得られた化合物 (a 1 - 2) の粗体 189.4 g、ヨウ化メチル 72.0 g、炭酸カリウム 95.6 g および DMF 500 ml を加え、80°C で 1 時間半攪拌した。反応混合物を室温に冷却後、THF / トルエン (体積比 1 / 1) 1000 ml、水 1000 ml を加え有機層を分離し、さらに水層をトルエン 300 ml で抽出した。得られた有機層を合わせた後、水 500 ml、飽和食塩水 500 ml で洗浄し、無水硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。得られた溶液を濃縮し、化合物 (a 1 - 3) の粗体 192.9 g を得た。
- [0380] (化合物 (a 1 - 4) の合成) 窒素雰囲気下、攪拌装置、温度計を備えた反応容器に、上記のとおり得られた化合物 (a 1 - 3) の粗体 192.9 g、トルエン 800 ml およびギ酸 (51.3 ml) を加え、50°C 加温下 3 時間攪拌した後、室温まで冷却し、水 500 ml を加えた。水層から、トルエン 200 ml で抽出した後、得られた有機層を合わせ、水 300 ml、飽和重曹水 300 ml 及び飽和食塩水 300 ml で洗浄した。得られた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥した後、減圧下濃縮することで、化合物 (a 1 - 4) の粗体 164.3 g を得た。
- [0381] (化合物 (i a 1 - 301) の合成) エチルトリフェニルホスホニウムブロミド 222.5 g を THF 500 ml に分散し、-20°C でカリウム - t - ブトキシド 64.7 g を加え、30 分攪拌した。その後、上記のとおり得られた化合物 (a 1 - 4) の粗体 192.9 g をトルエン 500 ml に溶解した溶液を滴下し、1 時間攪拌した。水 30 ml を加えた後溶媒を減圧留去し、残渣にヘキサン 600 ml、トルエン 200 ml、次亜塩素酸ナトリウム水溶液 50 ml、水 450 ml およびメタノール 1000 ml を加え有機層を分離し、さらに水層をヘキサン / トルエン (体積比 3 / 1) 400 ml で抽出した。得られた有機層を合わせた後、水 / メタノール (体積比 2 / 1) 450 ml で 2 回洗浄し、無水硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。得られた溶液を濃縮し、化合物 (i a 1 - 301) の粗体 193.2 g を得た。カ

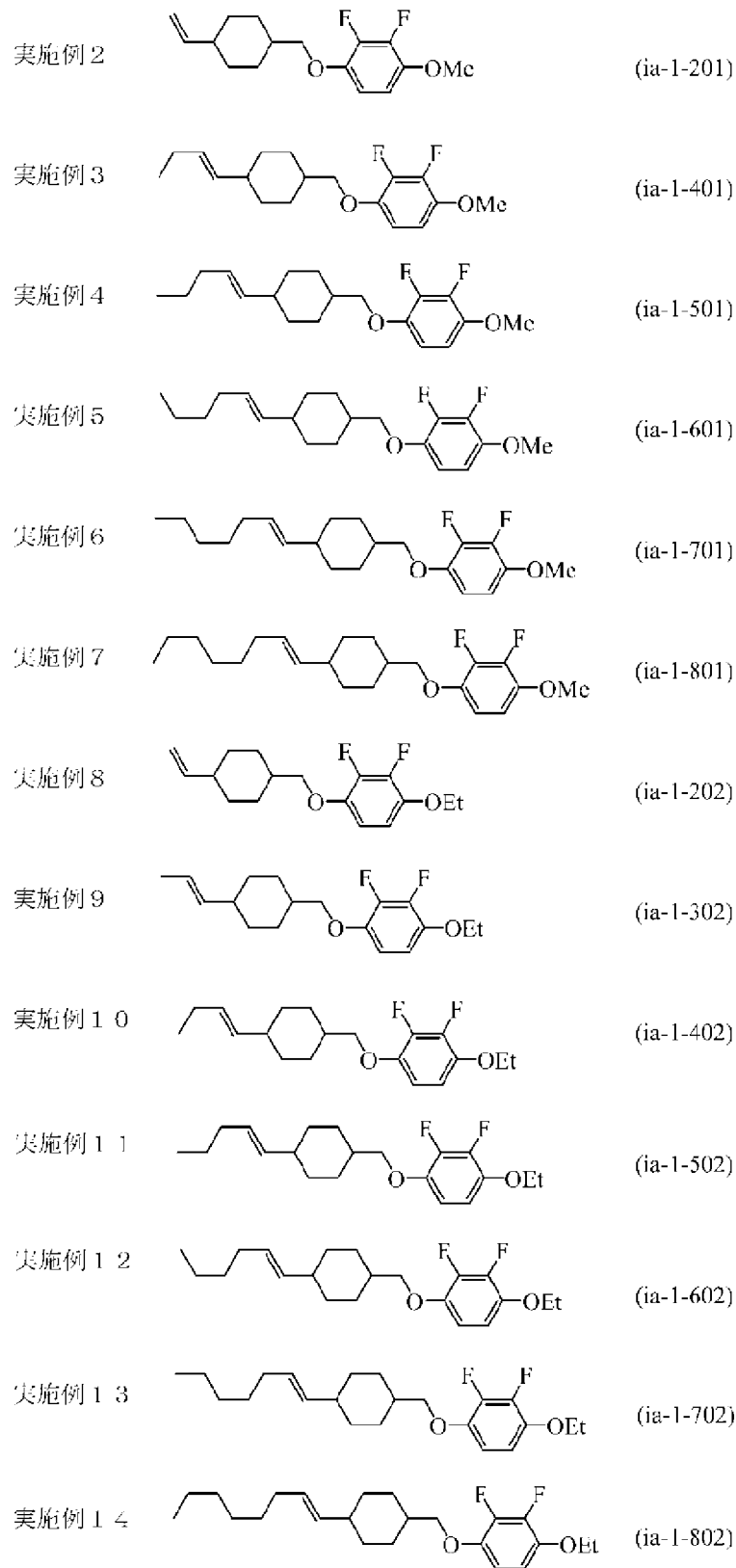
ラムクロマトグラフィー（シリカゲル200g）に対し、あらかじめヘキサン／トルエン（体積比4／1）400mlに溶解しておいた粗体を通し、さらにヘキサン／トルエン（体積比4／1）1200mlで溶出させた。得られた溶液を濃縮し、化合物（ia1-301）の粗体184.0gを得た。窒素雰囲気下、攪拌装置、温度計、滴下ロートを備えた反応容器に、得られた化合物（ia1-301）の粗体184.0g、ベンゼンスルフィン酸ナトリウム3.8g、10%塩酸16.8gおよびトルエン400mlを加え、85℃加温下3時間攪拌した後、室温まで冷却し、飽和重曹水400mlを加えた。水層から、トルエン200mlで抽出した後、得られた有機層を合わせ、水300mlおよび飽和食塩水300mlで洗浄した。得られた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥した後、減圧下濃縮することで、化合物（ia1-301）の粗体145.3gを得た。カラムクロマトグラフィー（シリカゲル200g）に対し、あらかじめヘキサン／トルエン（体積比4／1）300mlに溶解しておいた粗体を通し、さらにヘキサン／トルエン（体積比4／1）1200mlで溶出させた。得られた溶液を濃縮し、化合物（ia1-301）の粗体114.4gを得た。アセトン／メタノール混合溶媒を用いて再結晶を繰り返すことで、化合物（ia-1-302）55.5gを得た。転移点はC681。

GC-MS : m/z [M⁺]

実施例1と同様の反応、および必要に応じて公知の方法に準拠した方法を用いて、実施例2（化合物（ia-1-201））～実施例28（化合物（ia-2-802））を合成した。

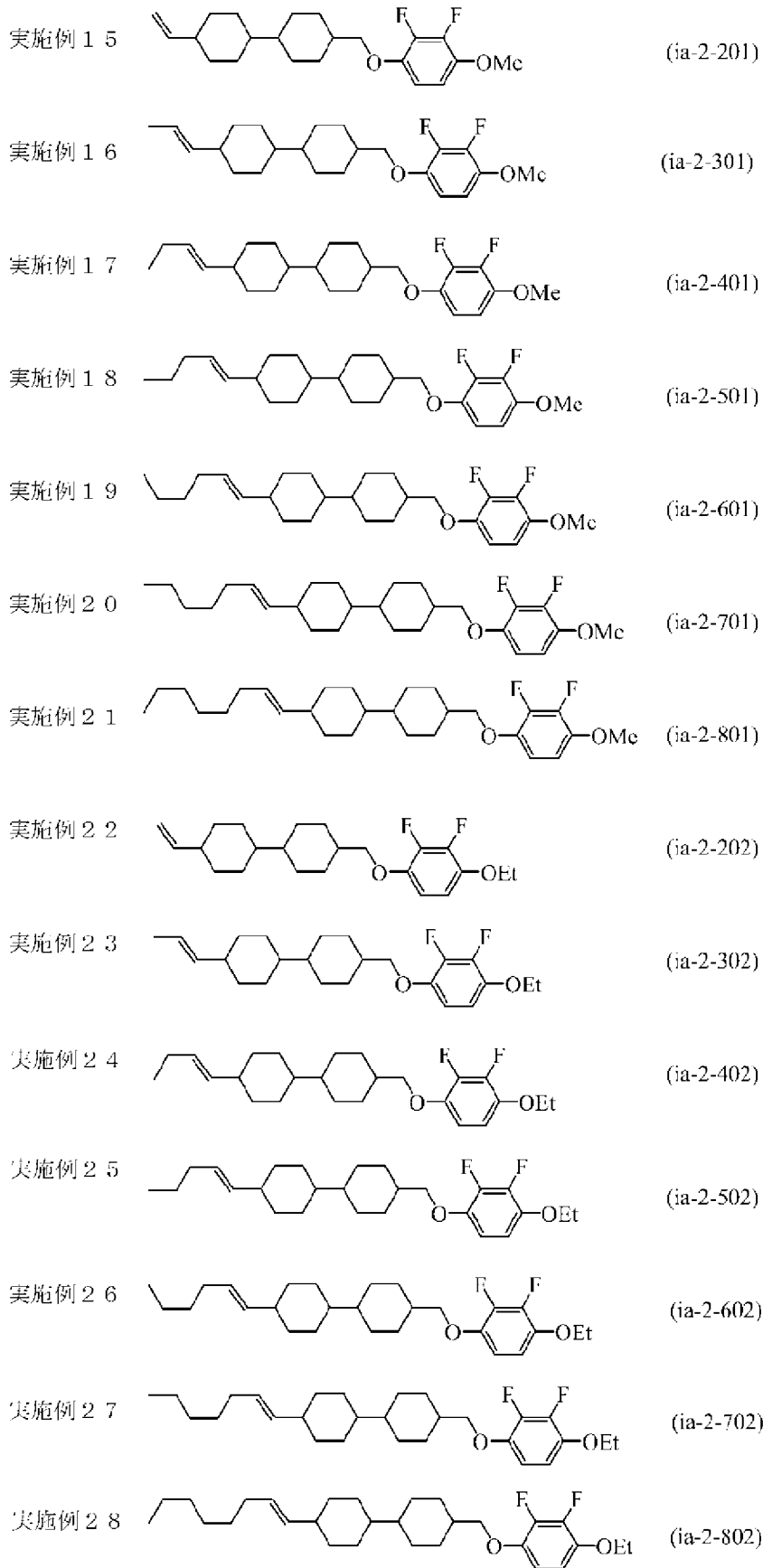
[0382]

[化76]



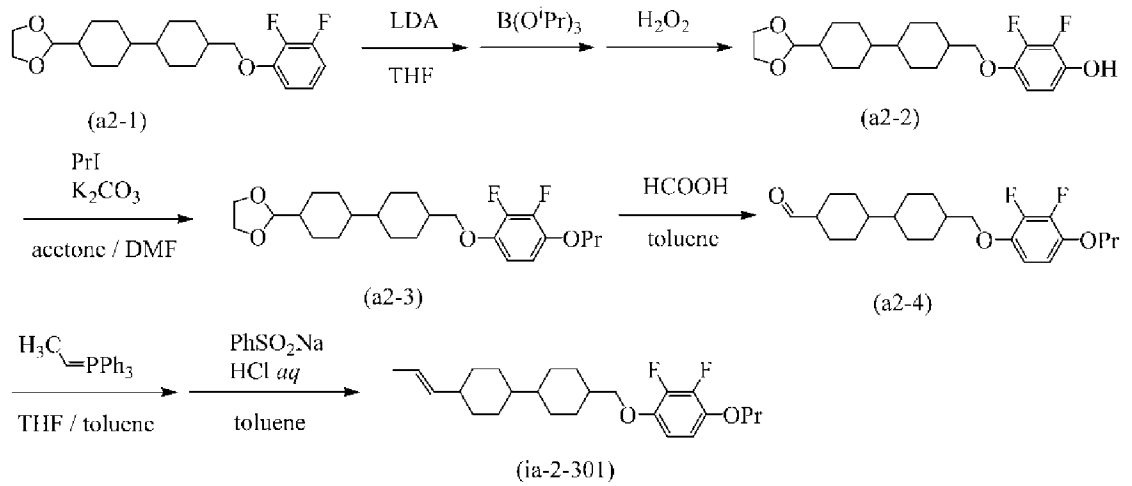
[0383]

[化77]



[0384] (実施例2) 化合物 (i a - 2 - 3 0 1) の製造

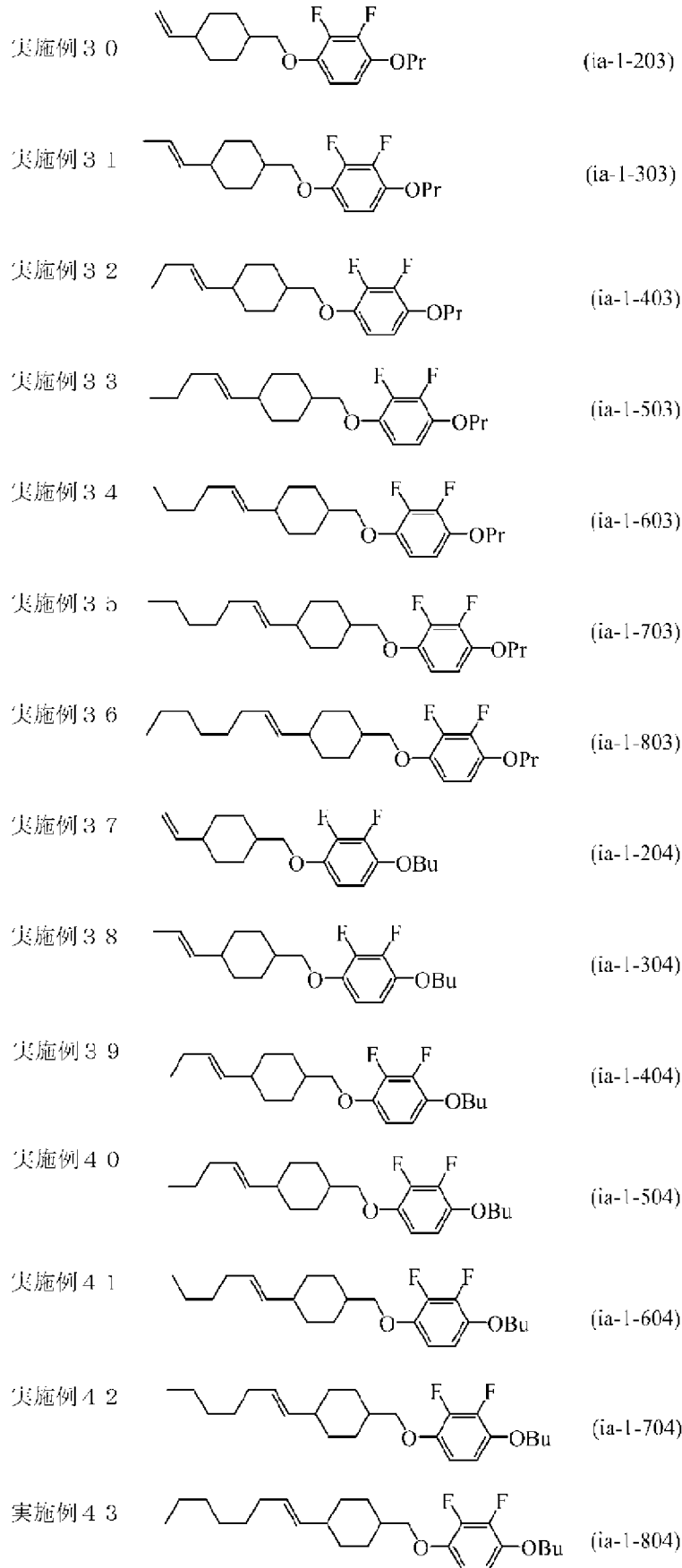
[0385] [化78]



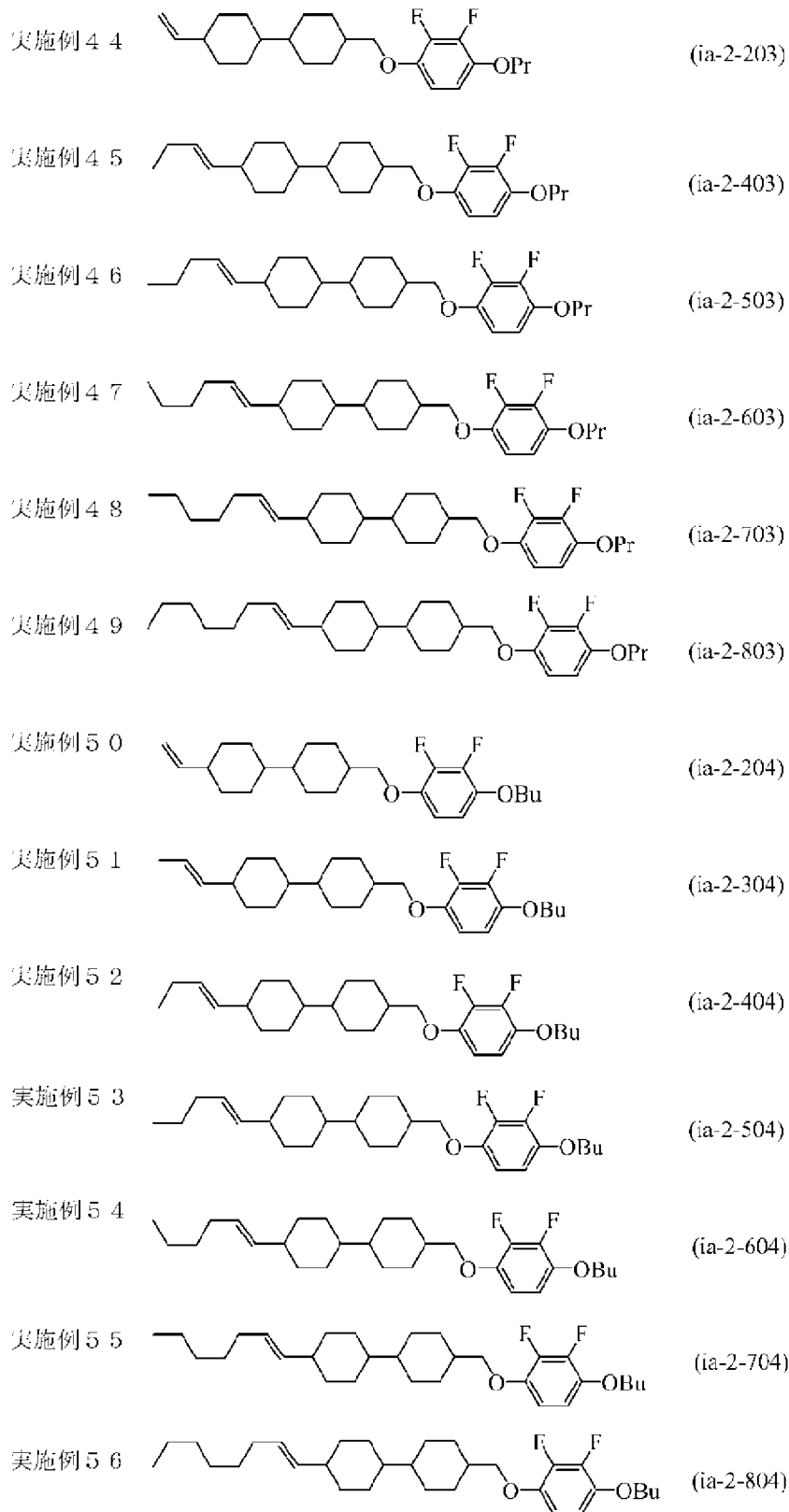
[0386] 実施例1において、式 (a 1 - 1) で表される化合物に代えて、式 (a 2 - 1) で表される化合物を用いる以外は同様にして実施例30 (化合物 (i a - 1 - 2 0 3)) ~ 実施例56 (化合物 (i a - 2 - 8 0 4)) を合成した。

[0387]

[化79]



[0388] [化80]



[0389] (実施例 3、実施例 4、比較例 1 及び比較例 2)

LC-1（実施例3）、LC-2（実施例4）、LC-A（比較例1）、LC-B（比較例2）の液晶組成物を調製し、その物性値を測定した。液晶組成物の構成とその物性値の結果は下記の表のとおりであった。

[0390] [表1]

	実施例 3	実施例 4	比較例 1	比較例 2
	LC-1	LC-2	LC-A	LC-B
3-Cy-Cy-V	20	20	20	22
3-Ph-Ph-1	7	7	7	8
3-Cy-Ph-Ph-2			7	
3-Cy-Ph5-02		11		
3-Cy-10-Ph5-02			8	7
1V-Cy-10-Ph5-01	10	10		
3-Cy-Cy-Ph5-02	13	13	13	13
3-Cy-Cy-10-Ph5-02	16	16	16	16
2-Cy-Ph-Ph5-02	7	7	7	7
3-Cy-Ph-Ph5-02	7	7	7	7
3-Ph-Ph5-02	11		11	11
3-Ph-Ph5-Ph-2	9	9	4	9
Tni	79.2	80	85.6	83.3
Ten	-46	-50	-49	-48
Δn	0.127	0.118	0.126	0.127
$\gamma 1$	167	162	168	167
$\Delta \varepsilon$	-4.8	-4.9	-4.4	-4.6

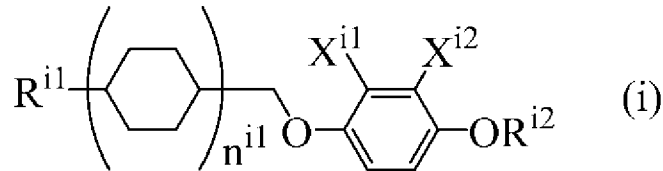
[0391] 本発明の液晶組成物LC-1は、 Δn 及び $\Delta \varepsilon$ 絶対値が大きな値を示した。これに対し、本願の一般式(i)で表される化合物である1V-Cy-10-Ph5-01を骨格が共通する3-Cy-10-Ph5-02に置き換え、 Δn を調整したLC-Aは、Tniが上昇するものの、 $\Delta \varepsilon$ が低下してしまうことがわかった。LC-Aに対し、 Δn 及び $\gamma 1$ を保ったまま、TniをLC-1と同程度になるよう調製したものが、LC-Bであるが、 $\Delta \varepsilon$ をLC-1と同程度まで上昇させることはできなかった。

[0392] 以上のことから、本発明の液晶組成物は、屈折率異方性(Δn)が大きく、絶対値が大きな負の誘電率異方性($\Delta \varepsilon$)を有するため、これを用いたVA型やPSA型、PSVA型等の液晶表示素子は狭ギャップLCDに十分対応可能な、低電圧駆動に優れたものであることが確認された。

請求の範囲

[請求項1] 一般式 (i) で表される化合物。

[化1]



(式中、 R^{i1} は炭素原子数3から15のアルケニル基を表すが、アルケニル基中に存在する1個の $-CH_2-$ 又は隣接していない2個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 又は環構造により置き換えられても良く、

R^{i2} は炭素原子数1から15のアルキル基を表すが、アルキル基中に存在する1個の $-CH_2-$ 又は隣接していない2個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 又は環構造により置き換えられても良く、

n^{i1} は、1、2又は3を表し、

X^{i1} 及び X^{i2} は各々独立して、水素原子、フッ素原子、塩素原子、トリフルオロメチル基又はトリフルオロメトキシ基を表す。)

[請求項2] 一般式 (i) において、 n^{i1} が1であり、 X^{i1} 及び X^{i2} が各々独立して、フッ素原子、塩素原子、トリフルオロメチル基又はトリフルオロメトキシ基である請求項1に記載の化合物。

[請求項3] 一般式 (i) において、 n^{i1} が2であり、 X^{i1} 及び X^{i2} が各々独立して、フッ素原子、塩素原子、トリフルオロメチル基又はトリフルオロメトキシ基である請求項1に記載の化合物。

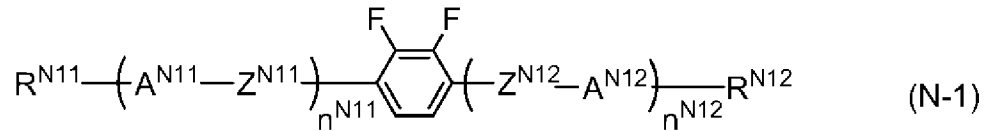
[請求項4] 一般式 (i) において、 R^{i2} がメチル基である請求項1に記載の化合物。

[請求項5] 請求項1から3のいずれか一項に記載の化合物を一種又は二種以上

含有する組成物。

[請求項6] 更に一般式 (N-1) で表される化合物を含有する請求項5記載の組成物。

[化2]



(式中、 R^{N11} 及び R^{N12} はそれぞれ独立して炭素原子数1~8のアルキル基を表し、該アルキル基中の1個又は非隣接の2個以上の $-CH_2-$ はそれぞれ独立して $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 又は $-OCO-$ によって置換されていてもよく、

A^{N11} 及び A^{N12} はそれぞれ独立して

(a) 1, 4-シクロヘキシレン基 (この基中に存在する1個の $-CH_2-$ 又は隣接していない2個以上の $-CH_2-$ は $-O-$ に置き換えられてもよい。) 及び

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

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

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

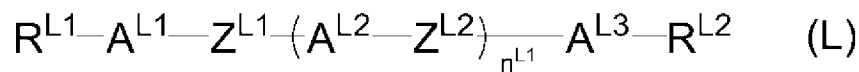
Z^{N11} 及び Z^{N12} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-$

(CH₂)₄−、−OCH₂−、−CH₂O−、−COO−、−OCO−、−OCF₂−、−CF₂O−、−CH=N−N=CH−、−CH=CH−、−CF=CF−又は−C≡C−を表し、

n^{N11}及びn^{N12}はそれぞれ独立して0〜3の整数を表すが、n^{N11}+n^{N12}は1、2又は3であり、A^{N11}〜A^{N12}、Z^{N11}〜Z^{N12}が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良い。

[請求項7] 更に一般式(L)で表される化合物を含有する請求項5又は6記載の組成物。

[化3]



(式中、R^{L1}及びR^{L2}はそれぞれ独立して炭素原子数1〜8のアルキル基を表し、該アルキル基中の1個又は非隣接の2個以上の−CH₂−はそれぞれ独立して−CH=CH−、−C≡C−、−O−、−CO−、−COO−又は−OCO−によって置換されていてもよく、

n^{L1}は0、1、2又は3を表し、

A^{L1}、A^{L2}及びA^{L3}はそれぞれ独立して

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

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

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

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

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

Z^{L1} 及び Z^{L2} はそれぞれ独立して単結合、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-CH=N-N=CH-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 又は $-C\equiv C-$ を表し、

n^{L1} が2又は3であって A^{L2} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良く、 n^{L1} が2又は3であって Z^{L3} が複数存在する場合は、それらは同一であっても異なっても良いが、一般式(i)及び一般式(N-1)で表される化合物を除く。)

[請求項8] 室温において液晶相を有する請求項5～7のいずれか1項に記載の組成物。

[請求項9] 請求項5～8のいずれか1項に記載の組成物を使用した表示素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2016/082404

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07C43/225(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07C43/225, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/30, G02F1/13, G02F1/1337

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

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2016
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2016	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2016

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2015/174175 A1 (DIC Corp.), 19 November 2015 (19.11.2015), claims; paragraphs [0063] to [0073]; examples; tables 1 to 2; particularly, 1V-Cy-10-Ph5-O1, 1V-Cy-Cy-10-Ph5-O1 & JP 2016-194083 A & KR 10-2016-0114096 A & TW 201542778 A	1-9
X	WO 2015/052948 A1 (DIC Corp.), 16 April 2015 (16.04.2015), claims; examples; tables 1, 2, 5, 6, 9; particularly, table 9, 1V-Cy-Cy-10-Ph5-O1 & JP 2015-180728 A & US 2016/0237349 A1 claims; examples; tables 1, 2, 5, 6, 9 & EP 3040398 A1 & CN 105637065 A & KR 10-2016-0058112 A	1-9

Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

* Special categories of cited documents:	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date	"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	"&" document member of the same patent family
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search 16 December 2016 (16.12.16)	Date of mailing of the international search report 27 December 2016 (27.12.16)
--	---

Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan	Authorized officer Telephone No.
--	---

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/082404

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2006/064853 A1 (Dainippon Ink and Chemicals, Inc.), 22 June 2006 (22.06.2006), claims; paragraphs [0028] to [0029], [0166] to [0175] & JP 2006-233182 A & US 2008/0111107 A1 claims; paragraphs [0024], [0159] to [0165] & EP 1835009 A1 & CN 101072847 A & KR 10-2007-0087601 A1	1-9
X	WO 2006/098366 A1 (Dainippon Ink and Chemicals, Inc.), 21 September 2006 (21.09.2006), claims; paragraph [0016]; examples & JP 2007-39642 A & US 2009/0200514 A1 claims; paragraph [0035]; examples & EP 1860089 A1 & CN 101142160 A & KR 10-2007-0118093 A	1-3,5-9
X	JP 2008-273957 A (Chisso Corp.), 13 November 2008 (13.11.2008), claims; examples (Family: none)	1-9
X	JP 2014-114276 A (JNC Corp.), 26 June 2014 (26.06.2014), claims; examples & US 2014/0138582 A1 claims; examples	1-3,5-9
P,X	WO 2016/017519 A1 (DIC Corp.), 04 February 2016 (04.02.2016), claims; paragraphs [0416] to [0438] (Family: none)	1-9
P,X	WO 2016/136344 A1 (JNC Corp.), 01 September 2016 (01.09.2016), claims; paragraph [0119] (Family: none)	1-9

<p>A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））</p> <p>Int.Cl. C07C43/225(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i</p>											
<p>B. 調査を行った分野</p> <p>調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））</p> <p>Int.Cl. C07C43/225, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/30, G02F1/13, G02F1/1337</p>											
<p>最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの</p> <table style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width:30%;">日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2016年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2016年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2016年</td> </tr> </table>				日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2016年	日本国実用新案登録公報	1996-2016年	日本国登録実用新案公報	1994-2016年
日本国実用新案公報	1922-1996年										
日本国公開実用新案公報	1971-2016年										
日本国実用新案登録公報	1996-2016年										
日本国登録実用新案公報	1994-2016年										
<p>国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）</p> <p>CAplus/REGISTRY (STN)</p>											
<p>C. 関連すると認められる文献</p>											
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号									
X	<p>WO 2015/174175 A1 (D I C株式会社)</p> <p>2015.11.19, 請求の範囲, [0063]-[0073]、実施例、表1-表2、特に1V-Cy-10-Ph5-01 及び 1V-Cy-Cy-10-Ph5-01</p> <p>& JP 2016-194083 A & KR 10-2016-0114096 A & TW 201542778 A</p>	1-9									
<p><input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。</p>											
<p>* 引用文献のカテゴリー</p> <p>「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの</p> <p>「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの</p> <p>「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）</p> <p>「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</p> <p>「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願</p>		<p>の日の後に公表された文献</p> <p>「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの</p> <p>「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの</p> <p>「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの</p> <p>「&」同一パテントファミリー文献</p>									
<p>国際調査を完了した日</p> <p style="text-align: center;">16.12.2016</p>		<p>国際調査報告の発送日</p> <p style="text-align: center;">27.12.2016</p>									
<p>国際調査機関の名称及びあて先</p> <p style="text-align: center;">日本国特許庁 (ISA/J P)</p> <p style="text-align: center;">郵便番号100-8915</p> <p style="text-align: center;">東京都千代田区霞が関三丁目4番3号</p>		<p>特許庁審査官（権限のある職員）</p> <p style="text-align: center;">土橋 敬介</p> <p>電話番号 03-3581-1101 内線 3443</p>									
		4H	3839								

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2015/052948 A1 (D I C株式会社) 2015.04.16, 請求の範囲、実施例、表 1, 2, 5, 6, 9、特に表 9 の 1V-Cy-Cy-10-Ph5-01 & JP 2015-180728 A & US 2016/0237349 A1 Claims, Examples, Tables 1, 2, 5, 6, 9 & EP 3040398 A1 & CN 105637065 A & KR 10-2016-0058112 A	1-9
X	WO 2006/064853 A1 (大日本インキ化学工業株式会社) 2006.06.22, 請求の範囲、[0028]-[0029]、[0166]-[0175] & JP 2006-233182 A & US 2008/0111107 A1 Claims, [0024], [0159]-[0165] & EP 1835009 A1 & CN 101072847 A & KR 10-2007-0087601 A1	1-9
X	WO 2006/098366 A1 (大日本インキ化学工業株式会社) 2006.09.21, 請求の範囲、[0016]、実施例 & JP 2007-39642 A & US 2009/0200514 A1 Claims, [0035], Examples & EP 1860089 A1 & CN 101142160 A & KR 10-2007-0118093 A	1-3, 5-9
X	JP 2008-273957 A (チッソ株式会社) 2008.11.13, 特許請求の範囲、実施例 (ファミリーなし)	1-9
X	JP 2014-114276 A (J N C株式会社) 2014.06.26, 特許請求の範囲、実施例 & US 2014/0138582 A1 Claims, Examples	1-3, 5-9
P, X	WO 2016/017519 A1 (D I C株式会社) 2016.02.04, 請求の範囲、[0416]-[0438] (ファミリーなし)	1-9
P, X	WO 2016/136344 A1 (J N C株式会社) 2016.09.01, 請求の範囲、[0119] (ファミリーなし)	1-9