(19)日本国特許庁(JP)

再公表特許(A1)

(11)国際公開番号
WO2018/025974

発行日　令和1年6月6日(2019.6.6)

(43)国際公開日　平成30年2月8日(2018.2.8)

(51)Int.Cl.		F I			テーマコード（参考）
G02F 1/1337	(2006.01)	G02F	1/1337	520	2H290
C09K 19/54	(2006.01)	C09K	19/54	Z	4H027
C09K 19/56	(2006.01)	C09K	19/56		
C09K 19/38	(2006.01)	C09K	19/38		

審査請求 未請求　予備審査請求 未請求　（全 388 頁）

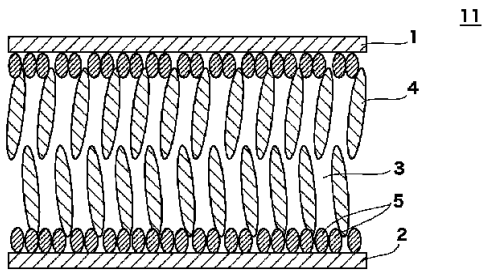
出願番号	特願2018-531990(P2018-531990)
(21)国際出願番号	PCT/JP2017/028326
(22)国際出願日	平成29年8月3日(2017.8.3)
(31)優先権主張番号	特願2016-153266(P2016-153266)
(32)優先日	平成28年8月3日(2016.8.3)
(33)優先権主張国	日本国(JP)

(71)出願人　311002067
ＪＮＣ株式会社
東京都千代田区大手町二丁目２番１号
(71)出願人　596032100
ＪＮＣ石油化学株式会社
東京都千代田区大手町二丁目２番１号
(74)代理人　100097320
弁理士　宮川　貞二
(74)代理人　100155192
弁理士　金子　美代子
(74)代理人　100131820
弁理士　金井　俊幸
(74)代理人　100215049
弁理士　石川　貴志

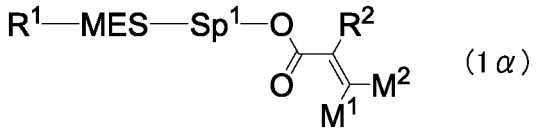
最終頁に続く

(54)【発明の名称】液晶表示素子、表示装置

(57)【要約】
本発明は、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命のような特性を有する液晶表示素子である。本発明の液晶表示素子は、第１の基板と；前記第１の基板に形成された複数の画素電極と；第２の基板と；前記第２の基板に形成された、前記画素電極に対向する対向電極と；前記画素電極と前記対向電極の間の、液晶組成物を含有する液晶層と；前記液晶組成物の一成分である配向性モノマーを含む重合体により形成された配向制御層であって、前記第１の基板側および前記第２の基板側にそれぞれ形成された配向制御層と；を備える。前記配向性モノマーは、少なくとも１つの環より構成されたメソゲン部位と極性基とを有する重合性極性化合物であるため、本発明の液晶表示素子は、配向膜を形成することなく配向制御層により液晶組成物中の液晶性化合物を垂直配向させることができる。

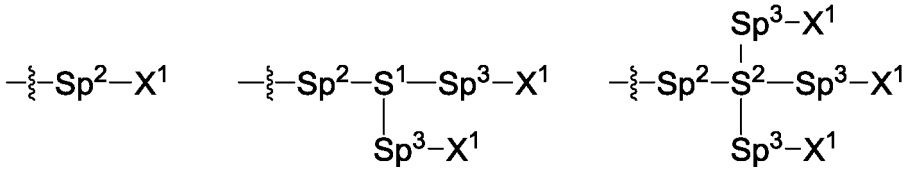


【特許請求の範囲】
【請求項１】
第１の基板と；
前記第１の基板に形成された複数の画素電極と；
第２の基板と；
前記第２の基板に形成された、前記画素電極に対向する対向電極と；
前記画素電極と前記対向電極の間の、液晶組成物を含有する液晶層と；
前記液晶組成物の一成分である配向性モノマーを含む重合体により形成された配向制御層であって、前記第１の基板側および前記第２の基板側にそれぞれ形成された配向制御層と；を備え、
前記配向性モノマーが、少なくとも１つの環より構成されたメソゲン部位と極性基とを有する重合性極性化合物である、
液晶表示素子。
【請求項２】
前記メソゲン部位が、シクロヘキサン環を含む、
請求項１に記載の液晶表示素子。
【請求項３】
前記配向性モノマーが、下記一般式（１α）で表される化合物である、
請求項１または請求項２に記載の液晶表示素子。



（1α）

式（１α）において、
R^1は、炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
ＭＥＳは、少なくとも１つの環を有するメソゲン基であり；
Sp^1は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
M^1およびM^2は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；
R^2は、式（１αａ）、式（１αｂ）、または式（１αｃ）で表される基であり：



（1αa） （1αb） （1αc）

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

S^2は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜であり；

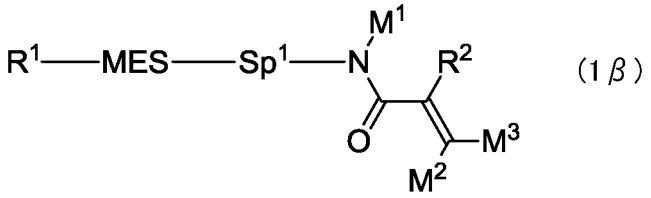
X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^3、－Ｎ（R^3）$_2$、式（ｘ１）、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（R^3）$_3$で表される基であり、ここで、R^3は、水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、式（ｘ１）におけるｗは１、２、３または４である。

(x1)

【請求項４】

前記配向性モノマーが、下記一般式（１β）で表される化合物である、

請求項１または請求項２に記載の液晶表示素子。



(1β)

式（１β）において、

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

ＭＥＳは、少なくとも１つの環を有するメソゲン基であり；

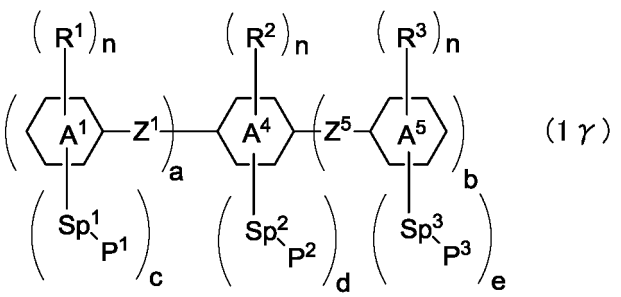
Sp^1は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

R^2、M^1、M^2、およびM^3は独立して、水素、ハロゲン、または炭素数１～１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【請求項５】

前記配向性モノマーが、下記一般式（１γ）で表される化合物である、

請求項１または請求項２に記載の液晶表示素子。



(1γ)

式（１γ）において、

R^1、R^2、R^3は独立して、水素または炭素数１～１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－Ｓ－、または－ＮＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

ｎは独立して０、１、または２であり；

環A^4は、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレン、ナフタレン、デカヒドロナフタレン、テトラヒドロナフタレン、テトラヒドロピラン、１，３－ジオキサン、ピリミジン、またはピリジンであり、環A^1および環A^5は独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、１－ナフチル、２－ナフチル、テトラヒドロピラン－２－イル、１，３－ジオキサン－２－イル、ピリミジン－２－イル、またはピリジン－２－イルであり、

これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z^1およびZ^5は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

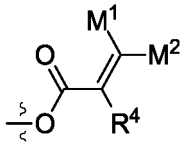
Sp^1、Sp^2、およびSp^3は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ａおよびｂは独立して、０、１、２、３、または４であり、そしてａおよびｂの和は、１、２、３、または４であり；

ｃ、ｄおよびｅは独立して、０、１、２、３、または４であり；

ｃ、ｄおよびｅの和は、２、３、または４であり；

P^1、P^2、およびP^3は独立して、式（Ｐ－１）で表される重合性基であり；

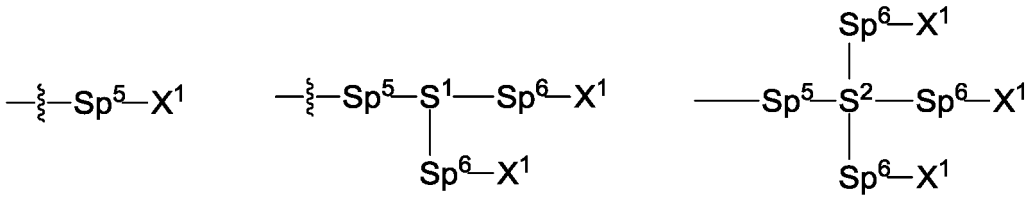


(P-1)

式（Ｐ－１）において、

M^1およびM^2は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

R^4は、式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）で表される基から選択された基である。



(1γa) (1γb) (1γc)

式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）において、

Sp^5およびSp^6は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、

このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｓ^{1}は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；

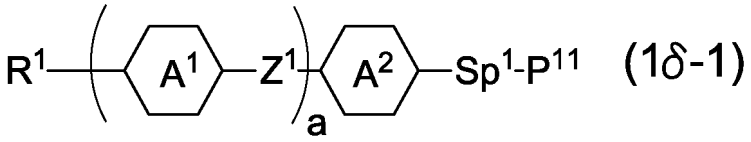
Ｓ^{2}は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜であり；

Ｘ^{1}は独立して、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－ＯＲ^5、－Ｎ（Ｒ^5）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（Ｒ^5）$_3$で表される基であり、ここで、Ｒ^{5}は、水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【請求項６】

前記配向性モノマーが、下記一般式（１δ－１）で表される化合物である、

請求項１または請求項２に記載の液晶表示素子。



式（１δ－１）において、

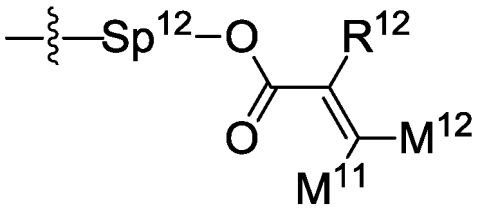
Ｒ^{1}は炭素数１から１５のアルキルであり、このＲ^{1}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

環Ａ^{1}および環Ａ^{2}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、アントラセン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ａは、０、１、２、３、または４であり；

Ｚ^{1}は単結合または炭素数１から６のアルキレンであり、このＺ^{1}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｓｐ^{1}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{1}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、式（１δａ）で表される基から選択された基で置き換えられていて；



(1δa)

式（１δａ）において、

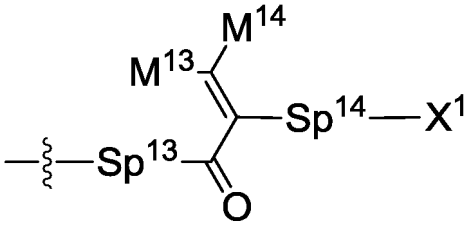
Ｓｐ^{12}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{12}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｍ^{11}およびＭ^{12}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

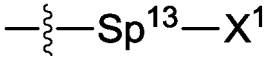
Ｒ^{12}は炭素数１から１５のアルキルであり、このＲ^{12}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく：

式（１δ－１）において、

Ｐ^{11}は、式（１δｅ）および式（１δｆ）で表される基から選択された基であり；



(1δe)



(1δf)

式（１δｅ）および（１δｆ）において、

Ｓｐ^{13}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{13}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｓｐ^{14}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{14}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｍ^{13}およびＭ^{14}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－ＯＲ^{15}、－Ｎ（Ｒ^{15}）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（Ｒ^{15}）$_3$であり；

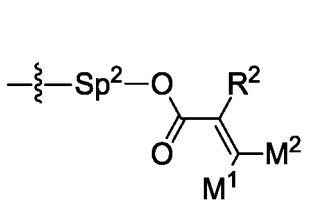
－ＯＲ^{15}、－Ｎ（Ｒ^{15}）$_2$、および－Ｓｉ（Ｒ^{15}）$_3$において、

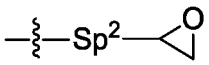
Ｒ^{15}は水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このＲ^{15}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

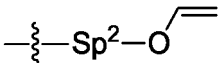
【請求項７】
前記配向性モノマーが、下記一般式（１ε）で表される化合物である、
請求項１または請求項２に記載の液晶表示素子。

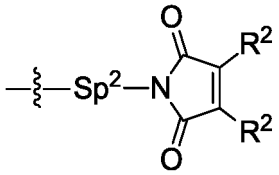
$$R^1\text{-}MES\text{-}Sp^1\text{-}P^1 \qquad (1\varepsilon)$$

式（１ε）において、
R^1は炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
ＭＥＳは少なくとも１つの環を有するメソゲン基であり；
Sp^1は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、式（１εａ）、式（１εｂ）、式（１εｃ）、および式（１εｄ）で表される基から選択された基で置き換えられていて；

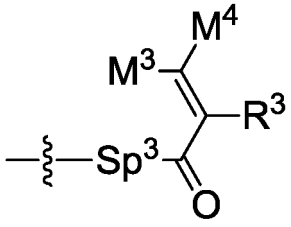

(1εa)

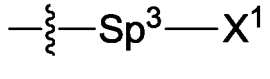

(1εb)


(1εc)


(1εd)

式（１εａ）、式（１εｂ）、式（１εｃ）、および式（１εｄ）において、
Sp^2は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
M^1およびM^2は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：
R^2は水素、または炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく：
式（１ε）において、
P^1は、式（１εｅ）および式（１εｆ）で表される基から選択された基であり；


(1εe)


(1εf)

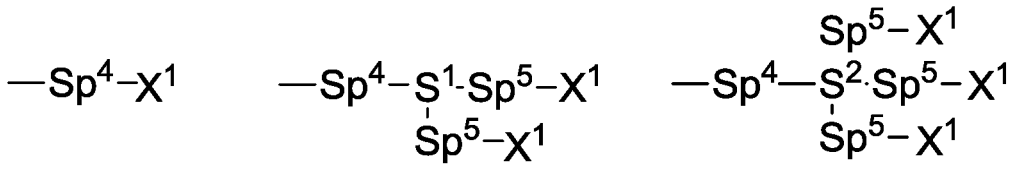
式（１εｅ）および（１εｆ）において、
Sp^3は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ

－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｍ^{3}およびＭ^{4}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－ＯＲ^5、－Ｎ（Ｒ^5）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（Ｒ^5）$_3$であり；

Ｒ^{3}は、式（１εｇ）、式（１εｈ）、および式（１εｉ）で表される基から選択された基であり；



(1εg)　(1εh)　(1εi)

式（１εｇ）、式（１εｈ）、および式（１εｉ）において、

Ｓｐ^{4}およびＳｐ^{5}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｓ^{1}は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；

Ｓ^{2}は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜であり；

Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－ＯＲ^5、－Ｎ（Ｒ^5）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（Ｒ^5）$_3$であり；

－ＯＲ^5、－Ｎ（Ｒ^5）$_2$、および－Ｎ（Ｒ^5）$_2$において、

Ｒ^{5}は水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【請求項８】

前記配向性モノマーを含む重合体が、反応性モノマーとの共重合体である、

請求項１～請求項７のいずれか１項に記載の液晶表示素子。

【請求項９】

前記配向制御層が、１０～１００ｎｍの厚みを有する、

請求項１～請求項８のいずれか１項に記載の液晶表示素子。

【請求項１０】

前記液晶組成物が含有する液晶性化合物の少なくとも１つが、負の誘電率異方性を有する、

請求項１～請求項９のいずれか１項に記載の液晶表示素子。

【請求項１１】

前記液晶組成物が含有する液晶性化合物の分子配向が、前記配向制御層により前記基板の面に対して垂直配向であり、

前記垂直配向の前記基板との角度が、９０°±１０°である、

請求項１～請求項１０のいずれか１項に記載の液晶表示素子。

【請求項１２】

前記液晶組成物が含有する液晶性化合物の分子配向が、画素毎に配向分割された、

請求項１～請求項１１のいずれか１項に記載の液晶表示素子。

【請求項１３】

配向膜を有しない、
請求項１～請求項１２のいずれか１項に記載の液晶表示素子。
【請求項１４】
請求項１～請求項１３のいずれか１項に記載の液晶表示素子と；
バックライトと；を備える、
表示装置。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本発明は、液晶表示素子に関する。さらに詳しくは、重合性の極性化合物含み誘電率異方性が正または負の液晶組成物を含有する液晶表示素子に関する。
【背景技術】
【０００２】
液晶表示素子において、液晶分子の動作モードに基づいた分類は、ＰＣ（phase change）、ＴＮ（twisted nematic）、ＳＴＮ（super twisted nematic）、ＥＣＢ（electrically controlled birefringence）、ＯＣＢ（optically compensated bend）、ＩＰＳ（in-plane switching）、ＶＡ（vertical alignment）、ＦＦＳ（fringe field switching）、ＦＰＡ（field-induced photo-reactive alignment）などのモードである。素子の駆動方式に基づいた分類は、ＰＭ（passive matrix）とＡＭ（active matrix）である。ＰＭは、スタティック（static）、マルチプレックス（multiplex）などに分類され、ＡＭは、ＴＦＴ（thin film transistor）、ＭＩＭ（metal insulator metal）などに分類される。ＴＦＴの分類は非晶質シリコン（amorphous silicon）および多結晶シリコン（polycrystal silicon）である。後者は製造工程によって高温型と低温型とに分類される。光源に基づいた分類は、自然光を利用する反射型、バックライトを利用する透過型、そして自然光とバックライトの両方を利用する半透過型である。
【０００３】
液晶表示素子はネマチック相を有する液晶組成物を含有する。この組成物は適切な特性を有する。この組成物の特性を向上させることによって、良好な特性を有するＡＭ素子を得ることができる。２つの特性における関連を下記の表１にまとめる。組成物の特性を市販されているＡＭ素子に基づいてさらに説明する。ネマチック相の温度範囲は、素子の使用できる温度範囲に関連する。ネマチック相の好ましい上限温度は約７０℃以上であり、そしてネマチック相の好ましい下限温度は約－１０℃以下である。組成物の粘度は素子の応答時間に関連する。素子で動画を表示するためには短い応答時間が好ましい。１ミリ秒でもより短い応答時間が望ましい。したがって、組成物における小さな粘度が好ましい。低い温度における小さな粘度はより好ましい。
【０００４】

【表１】

表１:組成物とAM素子における特性

番号	組成物の特性	AM素子の特性
1	ネマチック相の温度範囲が広い	使用できる温度範囲が広い
2	粘度が小さい[1)]	応答時間が短い
3	光学異方性が適切である	コントラスト比が大きい
4	正または負に誘電率異方性が大きい	しきい値電圧が低く、消費電力が小さい コントラスト比が大きい
5	比抵抗が大きい	電圧保持率が大きく、コントラスト比が大きい
6	紫外線および熱に安定である	寿命が長い
7	弾性定数が大きい	コントラスト比が大きい、応答時間が短い

1)液晶表示素子に組成物を注入する時間を短縮できる

【０００５】

組成物の光学異方性は、素子のコントラスト比に関連する。素子のモードに応じて、大きな光学異方性または小さな光学異方性、すなわち適切な光学異方性が必要である。組成物の光学異方性（Δｎ）と素子のセルギャップ（ｄ）との積（Δｎ×ｄ）は、コントラスト比を最大にするように設計される。適切な積の値は動作モードの種類に依存する。この値は、ＴＮのようなモードの素子では約０．４５μｍである。この値は、ＶＡモードの素子では約０．３０μｍから約０．４０μｍの範囲であり、ＩＰＳモードまたはＦＦＳモードの素子では約０．２０μｍから約０．３０μｍの範囲である。これらの場合、小さなセルギャップの素子には大きな光学異方性を有する組成物が好ましい。組成物における大きな誘電率異方性は、素子における低いしきい値電圧、小さな消費電力と大きなコントラスト比に寄与する。したがって、正または負に大きな誘電率異方性が好ましい。組成物における大きな比抵抗は、素子における大きな電圧保持率と大きなコントラスト比とに寄与する。したがって、初期段階において室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。長時間使用したあと、室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。紫外線および熱に対する組成物の安定性は、素子の寿命に関連する。この安定性が高いとき、素子の寿命は長い。このような特性は、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いるＡＭ素子に好ましい。

【０００６】

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

【０００７】

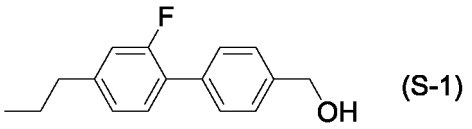
汎用の液晶表示素子において、液晶分子の垂直配向は、ポリイミド配向膜によって達成される。一方、配向膜を有しない液晶表示素子では、極性化合物および重合体を含有する液晶組成物が用いられる。まず、少量の極性化合物および少量の重合性化合物を添加した組成物を素子に注入する。ここで、極性化合物の作用によって液晶分子が配向される。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。ここで、重合性化合物が重合し、液晶分子の配向を安定化させる。この組成物では、極性化合物および重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間

が短縮され、画像の焼き付きが改善される。さらに、配向膜を有しない素子では、配向膜を形成する工程が不要である。配向膜がないので、配向膜と組成物との相互作用によって、素子の電気抵抗が低下することはない。極性化合物と重合体の組み合わせによるこのような効果は、ＴＮ、ＥＣＢ、ＯＣＢ、ＩＰＳ、ＶＡ、ＦＦＳ、ＦＰＡのようなモードを有する素子に期待できる。

【０００８】

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

【０００９】



(S-1)

【先行技術文献】

【特許文献】

【００１０】

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

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【００１１】

本発明の課題は、化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、液晶組成物への高い溶解度を有する、液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きい極性化合物を含み、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数などの特性の少なくとも１つを充足する液晶組成物を含有することにより、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命のような特性を有する液晶表示素子を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【００１２】

本発明者らは、上記課題を解決するため、種々の液晶組成物について検討した結果、液晶組成物中に少なくとも１つの環より構成されたメソゲン部位と極性基とを有する重合性極性化合物を含有させると、液晶組成物を素子に導入後、電極間に電圧を印加しながら活性エネルギー線の照射により液晶組成物中の前記重合性化合物を重合させる方式において、基板上に汎用の液晶表示素子で用いるポリイミド配向膜のような従来の配向膜を設けずに、前記課題を解決できることを見出し、本願発明を完成するに至った。

【００１３】

本発明の第１の態様に係る液晶表示素子は、第１の基板と；前記第１の基板に形成された複数の画素電極と；第２の基板と；前記第２の基板に形成された、前記画素電極に対向する対向電極と；前記画素電極と前記対向電極の間の、液晶組成物を含有する液晶層と；前記液晶組成物の一成分である配向性モノマーを含む重合体により形成された配向制御層であって、前記第１の基板側および前記第２の基板側にそれぞれ形成された配向制御層と

；を備え、前記配向性モノマーが、少なくとも１つの環より構成されたメソゲン部位と極性基とを有する重合性極性化合物である。

このように構成すると、配向膜を形成することなく、配向制御層により液晶組成物中の液晶性化合物を垂直配向させることができる。

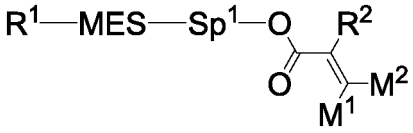
【００１４】

本発明の第２の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様に係る液晶表示素子において、前記メソゲン部位が、シクロヘキサン環を含む。

このように構成すると、電気的特性である電圧保持率（ＶＨＲ）をより高くすることができる。

【００１５】

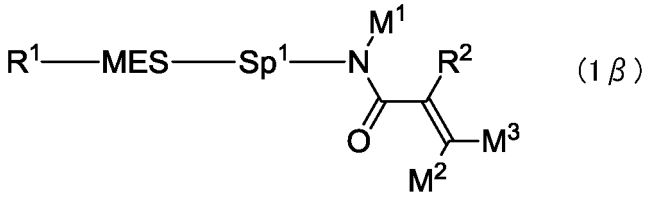
本発明の第３の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様または第２の態様に係る液晶表示素子において、前記配向性モノマーが、下記一般式（１α）で表される化合物である。



（1α）

【００１６】

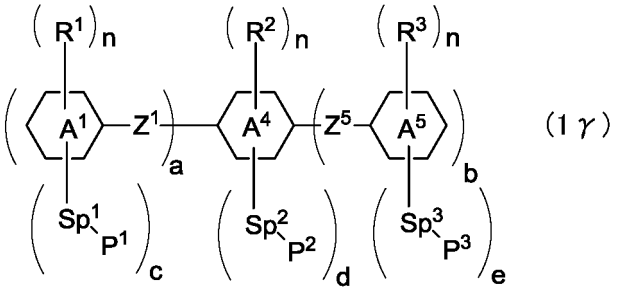
本発明の第４の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様または第２の態様に係る液晶表示素子において、前記配向性モノマーが、下記一般式（１β）で表される化合物である。



（1β）

【００１７】

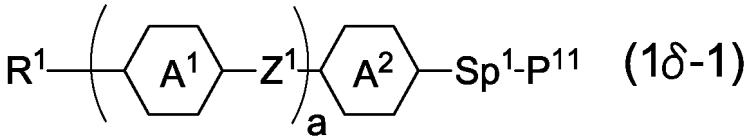
本発明の第５の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様または第２の態様に係る液晶表示素子において、前記配向性モノマーが、下記一般式（１γ）で表される化合物である。



（1γ）

【００１８】

本発明の第６の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様または第２の態様に係る液晶表示素子において、前記配向性モノマーが、下記一般式（１δ－１）で表される化合物である。



(1δ-1)

【００１９】

本発明の第７の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様または第２の態様に係る液晶表示素子において、前記配向性モノマーが、下記一般式（１ε）で表される化

合物である。

$$R^1\text{-}MES\text{-}Sp^1\text{-}P^1 \qquad (1\varepsilon)$$

【００２０】

本発明の第８の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様～第７の態様のいずれか１の態様に係る液晶表示素子において、前記配向性モノマーを含む重合体が、反応性モノマーとの共重合体である。

このように構成すると、反応性モノマーを使用することで、反応性（重合性）を上げることができる。

【００２１】

本発明の第９の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様～第８の態様のいずれか１の態様に係る液晶表示素子において、前記配向制御層が、１０～１００ｎｍの厚みを有する。

【００２２】

本発明の第１０の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様～第９の態様のいずれか１の態様に係る液晶表示素子において、前記液晶組成物が含有する液晶性化合物の少なくとも１つが、負の誘電率異方性を有する。

【００２３】

本発明の第１１の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様～第１０の態様のいずれか１の態様に係る液晶表示素子において、前記液晶組成物が含有する液晶性化合物の分子配向が、前記配向制御層により前記基板の面に対して垂直配向であり、前記垂直配向の前記基板との角度が、９０°±１０°である。

【００２４】

本発明の第１２の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様～第１１態様のいずれか１の態様に係る液晶表示素子において、前記液晶組成物が含有する液晶性化合物の分子配向が、画素毎に配向分割されている。

【００２５】

本発明の第１３の態様に係る液晶表示素子は、上記本発明の第１の態様～第１２の態様のいずれか１の態様に係る液晶表示素子において、配向膜を有しない。「配向膜」とは、液晶性化合物を素子に注入する前に基板に形成される、ポリイミド配向膜などの、配向制御機能を有する膜をいう。

このように構成すると、素子の製造工程において配向膜を形成する工程が不要となる。

【００２６】

本発明の第１４の態様に係る表示装置は、上記本発明の第１の態様～第１３の態様のいずれか１の態様に係る液晶表示素子と；バックライトと；を備える。

このように構成すると、液晶テレビ等の表示装置に適した表示装置となる。

【発明の効果】

【００２７】

本発明の長所は、化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、液晶組成物への高い溶解度を有する、液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きい重合性の極性化合物を含み、そしてネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数などの特性の少なくとも１つを充足する液晶組成物を含有することにより、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、高い電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命のような特性を有する液晶表示素子を提供することである。

【図面の簡単な説明】

【００２８】

【図１】極性基と基板表面との相互作用により、配向性モノマーとしての重合性極性化合物５が、カラーフィルタ基板１とアレイ基板２上に配列した状態の素子１１を示す概略図

であり（電極層は不図示）、重合反応により配向制御層を形成する。
【図２】極性基と基板表面との相互作用により、配向性モノマーとしての重合性極性化合物５が、カラーフィルタ基板１とアレイ基板２上に配列した状態の素子１２を示す概略図であり（電極層は不図示）、重合反応により反応性モノマーとしての重合性化合物６を取り込んで配向制御層を形成する。
【図３】従来の配向膜を有し重合性化合物を含む素子２１の概略図である（電極層は不図示）。
【発明を実施するための形態】
【００２９】
この出願は、日本国で２０１６年８月３日に出願された特願２０１６－１５３２６６号に基づいており、その内容は本出願の内容として、その一部を形成する。本発明は以下の詳細な説明によりさらに完全に理解できるであろう。本発明のさらなる応用範囲は、以下の詳細な説明により明らかとなろう。しかしながら、詳細な説明および特定の実例は、本発明の望ましい実施の形態であり、説明の目的のためにのみ記載されているものである。この詳細な説明から、種々の変更、改変が、本発明の精神と範囲内で、当業者にとって明らかであるからである。出願人は、記載された実施の形態のいずれをも公衆に献上する意図はなく、改変、代替案のうち、特許請求の範囲内に文言上含まれないかもしれないものも、均等論下での発明の一部とする。
【００３０】
この明細書における用語の使い方は次のとおりである。「液晶組成物」および「液晶表示素子」の用語をそれぞれ「組成物」および「素子」と略すことがある。「液晶表示素子」は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。「液晶性化合物」は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物および液晶相を有しないが、ネマチック相の温度範囲、粘度、誘電率異方性のような特性を調節する目的で組成物に混合される化合物の総称である。この化合物は、例えば１，４－シクロヘキシレンや１，４－フェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状（rod like）である。「重合性化合物」は、組成物中に重合体を生成させる目的で添加する化合物である。「極性化合物」は、極性基が基板表面と相互作用することによって液晶分子が配列するのを援助する。
【００３１】
液晶組成物は、複数の液晶性化合物を混合することによって調製される。液晶性化合物の割合（含有量）は、この液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。この液晶組成物に、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、極性化合物のような添加物が必要に応じて添加される。添加物の割合（添加量）は、液晶性化合物の割合と同様に、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）で表される。重量百万分率（ｐｐｍ）が用いられることもある。重合開始剤および重合禁止剤の割合は、例外的に重合性化合物の重量に基づいて表される。
【００３２】
式（１）で表される化合物を「化合物（１）」と略すことがある。化合物（１）は、式（１）で表される１つの化合物、２つの化合物の混合物、または３つ以上の化合物の混合物を意味する。このルールは、式（２）で表される化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物などにも適用される。六角形で囲んだB^1、C^1、Ｆなどの記号はそれぞれ環B^1、環C^1、環Ｆなどに対応する。六角形は、シクロヘキサン環やベンゼン環のような六員環またはナフタレン環のような縮合環を表す。この六角形を横切る斜線は、環上の任意の水素が－Sp^1－P^1などの基で置き換えられてもよいことを表す。ｅなどの添え字は、置き換えられた基の数を示す。添え字が０のとき、そのような置き換えはない。
【００３３】
末端基R^{11}の記号を複数の成分化合物に用いた。これらの化合物において、任意の２つのR^{11}が表す２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。例えば、化合物（２）のR^{11}がエチルであり、化合物（３）のR^{11}がエチルであるケースがあ

る。化合物（２）のR^{11}がエチルであり、化合物（３）のR^{11}がプロピルであるケースもある。このルールは、他の末端基、環、結合基などの記号にも適用される。式（８）において、ｉが２のとき、２つの環D^1が存在する。この化合物において、２つの環D^1が表す２つの基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。このルールは、ｉが２より大きいときの任意の２つの環D^1にも適用される。このルールは、他の環、結合基などの記号にも適用される。

【００３４】

「少なくとも１つの‘Ａ’」の表現は、‘Ａ’の数は任意であることを意味する。「少なくとも１つの‘Ａ’は、‘Ｂ’で置き換えられてもよい」の表現は、‘Ａ’の数が１つのとき、‘Ａ’の位置は任意であり、‘Ａ’の数が２つ以上のときも、それらの位置は制限なく選択できる。このルールは、「少なくとも１つの‘Ａ’が、‘Ｂ’で置き換えられた」の表現にも適用される。「少なくとも１つのＡが、Ｂ、Ｃ、またはＤで置き換えられてもよい」という表現は、少なくとも１つのＡがＢで置き換えられた場合、少なくとも１つのＡがＣで置き換えられた場合、および少なくとも１つのＡがＤで置き換えられた場合、さらに複数のＡがＢ、Ｃ、Ｄの少なくとも２つで置き換えられた場合を含むことを意味する。例えば、少なくとも１つの$-CH_2-$（または、$-(CH_2)_2-$）が$-O-$（または、$-CH=CH-$）で置き換えられてもよいアルキルには、アルキル、アルケニル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシアルケニル、アルケニルオキシアルキルが含まれる。なお、連続する２つの$-CH_2-$が$-O-$で置き換えられて、$-O-O-$のようになることは好ましくない。アルキルなどにおいて、メチル部分（$-CH_2-H$）の$-CH_2-$が$-O-$で置き換えられて$-O-H$になることも好ましくない。

【００３５】

ハロゲンはフッ素、塩素、臭素、またはヨウ素を意味する。好ましいハロゲンは、フッ素または塩素である。さらに好ましいハロゲンはフッ素である。アルキルは、直鎖状または分岐状であり、環状アルキルを含まない。直鎖状アルキルは、一般的に分岐状アルキルよりも好ましい。これらのことは、アルコキシ、アルケニルなどの末端基についても同様である。１，４－シクロヘキシレンに関する立体配置は、ネマチック相の上限温度を上げるためにシスよりもトランスが好ましい。２－フルオロ－１，４－フェニレンは、下記の２つの二価基を意味する。化学式において、フッ素は左向き（Ｌ）であってもよいし、右向き（Ｒ）であってもよい。このルールは、テトラヒドロピラン－２，５－ジイルのような、環から水素を２つ除くことによって生成した非対称な二価基にも適用される。

(L) (R)

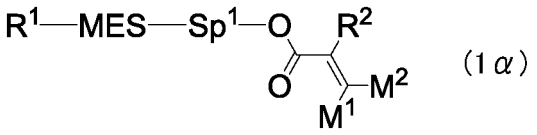
【００３６】

本発明の液晶表示素子は、液晶組成物中に、配向性モノマーとして機能する、少なくとも１つの環より構成されたメソゲン部位と極性基とを有する重合性極性化合物を含む。少なくとも１つの環はシクロヘキサン環であることが好ましい。この重合性極性化合物は、本明細書においては化合物（１）と称される。さらに、構造の詳細に言及する場合など必要に応じて、化合物（１α）、化合物（１β）、化合物（１γ）、化合物（１δ）、化合物（１ε）と分けて称される。

以下に、

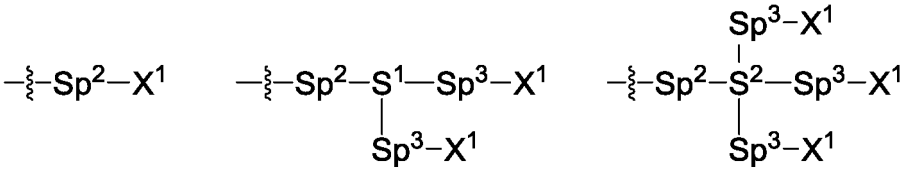
化合物（１）については、≪１．化合物（１α）の例示≫、≪２．化合物（１α）の態様≫、≪３．化合物（１α）の合成≫、≪４．化合物（１β）の例示≫、≪５．化合物（１β）の態様≫、≪６．化合物（１β）の合成≫、≪７．化合物（１γ）の例示≫、≪８．化合物（１γ）の態様≫、≪９．化合物（１γ）の合成≫、≪１０．化合物（１δ）の例示≫、≪１１．化合物（１δ）の態様≫、≪１２．化合物（１δ）の合成≫、≪１３．化

合物（１ε）の例示≫、≪１４．化合物（１ε）の態様≫、≪１５．化合物（１ε）の合成≫、
化合物（１）を含む組成物については、≪１６．液晶組成物≫、
当該組成物を含有する素子については、≪１７．液晶表示素子≫で順に説明する。
【００３７】
≪１．化合物（１α）の例示≫
下記項に、化合物（１α）を例示する。
【００３８】
項１．　式（１α）で表される化合物。



(1α)

式（１α）において、
R^1は、炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
ＭＥＳは、少なくとも１つの環を有するメソゲン基であり；
Sp^1は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
M^1およびM^2は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；
R^2は、式（１αａ）、式（１αｂ）、または式（１αｃ）で表される基である。



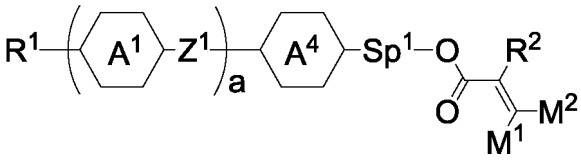
(1αa)　(1αb)　(1αc)

式（１αａ）、式（１αｂ）、および式（１αｃ）において、
Sp^2およびSp^3は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
S^1は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；
S^2は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜であり；
X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^3、－Ｎ（R^3）$_2$、式（ｘ１）、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（R^3）$_3$で表される基であり、ここで、R^3は、水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、式（ｘ１）におけるｗは１、２、３または４である。

(x1)

【００３９】

項２．　式（１α－１）で表される、項１に記載の化合物。



(1α-1)

式（１α－１）において、

Ｒ^{1}は、炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

環Ａ^{1}および環Ａ^{4}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、アントラセン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

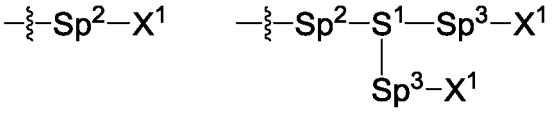
Ｚ^{1}は、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

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

Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

ａは０、１、２、３、または４であり；

Ｒ^{2}は、式（１αａ）または式（１αｂ）で表される基である。



(1αa)　　(1αb)

式（１αａ）および式（１αｂ）において、

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

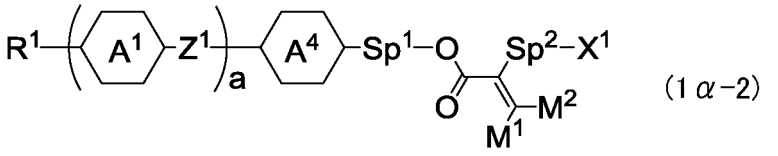
S^1は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；

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

(x1)

【００４０】

項３．　式（１α－２）で表される、項１または２に記載の化合物。



(1α-2)

式（１α－２）において、

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

環A^1および環A^4は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

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

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

M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

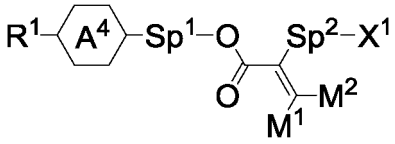
X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^3、－$N(R^3)_2$、式（ｘ１）、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－$B(OH)_2$、または－$Si(R^3)_3$で表される基であり、ここで、R^3は、水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、式（ｘ１）におけるｗは１、２、３または４であり；

(x1)

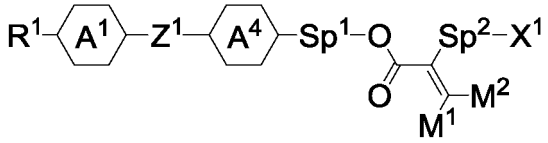
ａは０、１、２、３、または４である。

【００４１】

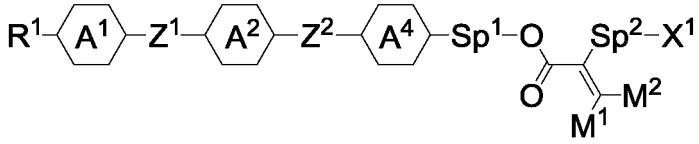
項４．　式（１α－３）から式（１α－６）のいずれか１つで表される、項１から３のいずれか１項に記載の化合物。



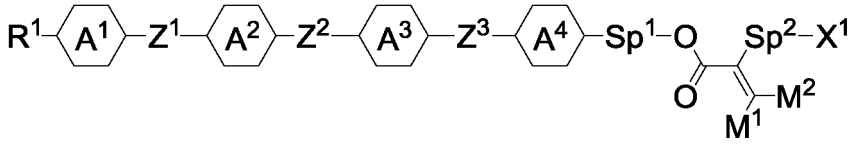
(1α-3)



(1α-4)



(1α-5)



(1α-6)

式（１α－３）から式（１α－６）において、

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

環A^1、環A^2、環A^3、および環A^4は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、塩素、炭素数１から７のアルキル、炭素数２から７のアルケニル、または炭素数１から６のアルコキシで置き換えられてもよく

；

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

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

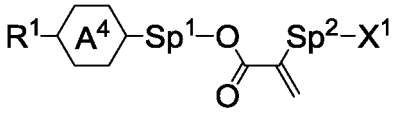
M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルであり；

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

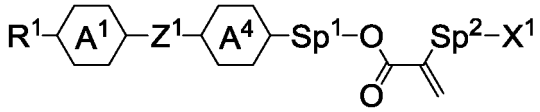
(x1)

【００４２】

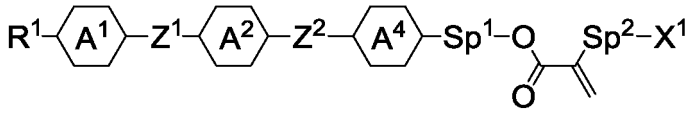
項５．　式（１α－７）から式（１α－１０）のいずれか１つで表される、項１から４のいずれか１項に記載の化合物。



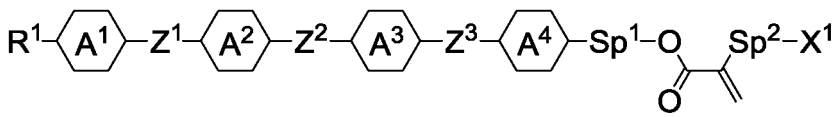
(1α-7)



(1α-8)



(1α-9)



(1α-10)

式（１α－７）から式（１α－１０）において、

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

環Ａ^{1}、環Ａ^{2}、環Ａ^{3}、および環Ａ^{4}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシで置き換えられてもよく；

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

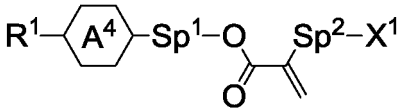
Ｓｐ^{1}は、単結合または炭素数１から７のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく；

Ｓｐ^{2}は、炭素数１から７のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

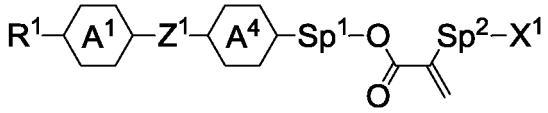
Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、または－Ｎ（Ｒ^{3}）$_{2}$であり、ここで、Ｒ^{3}は、水素または炭素数１から５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

【００４３】

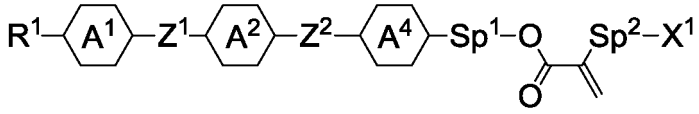
項６．　式（１α－１１）から式（１α－１４）のいずれか１つで表される、項１から５のいずれか１項に記載の化合物。



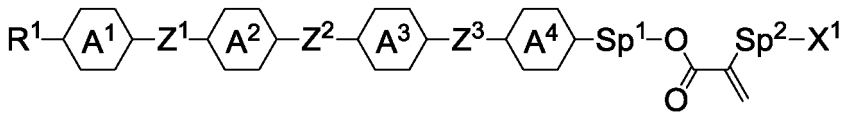
(1α-11)



(1α-12)



(1α-13)



(1α-14)

式（１α－１１）から式（１α－１４）において、

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

環Ａ^{1}、環Ａ^{2}、環Ａ^{3}および環Ａ^{4}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、また

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

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

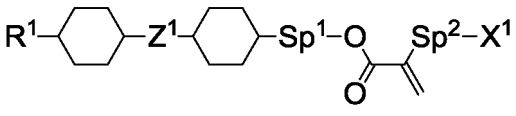
Sp^1は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Sp^2は、炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

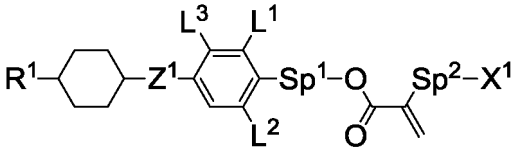
X^1は、－ＯＨ、－NH_2、または－Ｎ（R^3）$_2$であり、ここで、R^3は、水素または炭素数１から５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

【００４４】

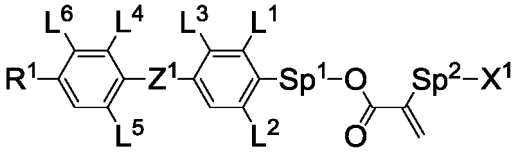
項７．　式（１α－１５）から式（１α－３１）のいずれか１つで表される、項１から６のいずれか１項に記載の化合物。



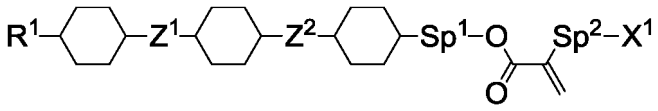
(1α-15)



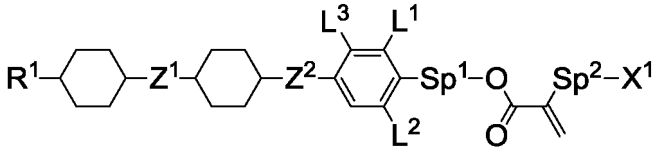
(1α-16)



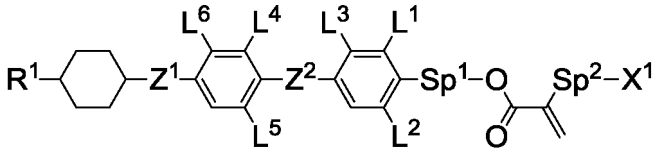
(1α-17)



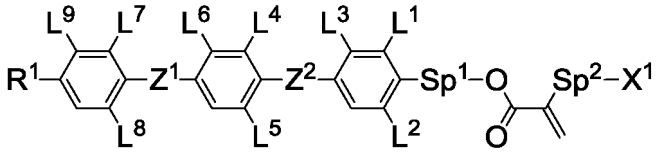
(1α-18)



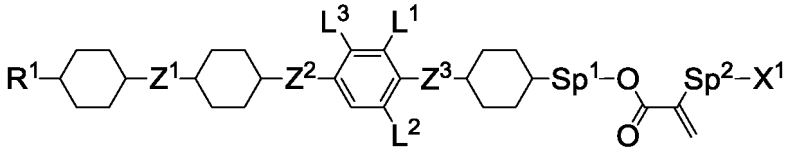
(1α-19)



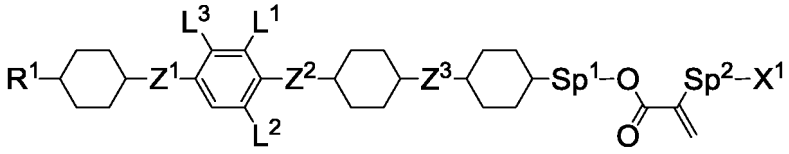
(1α-20)



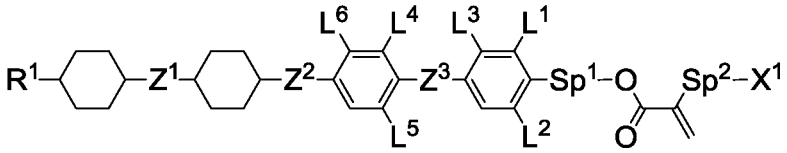
(1α-21)



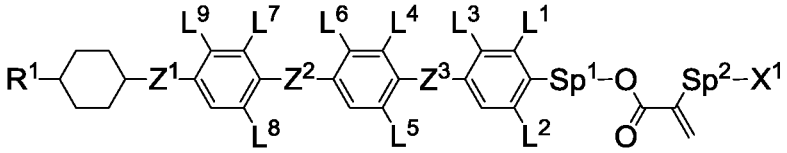
(1α-22)



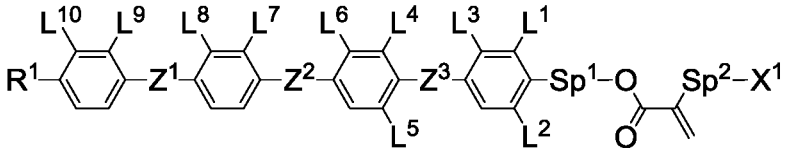
(1α-23)



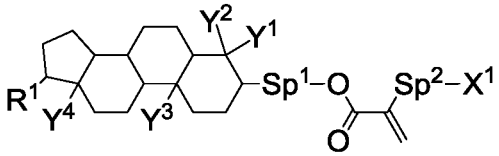
(1α-24)



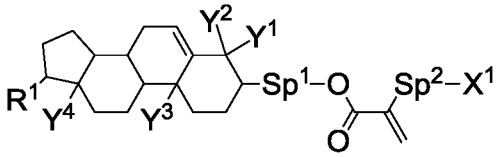
(1α-25)



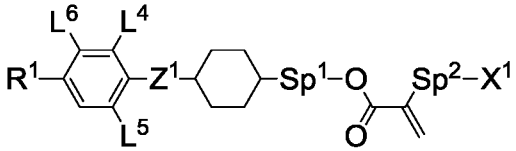
(1α-26)



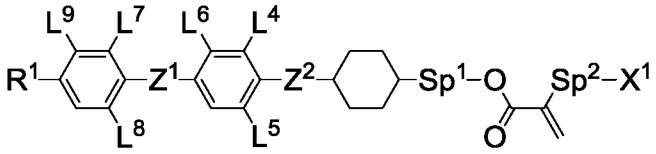
(1α-27)



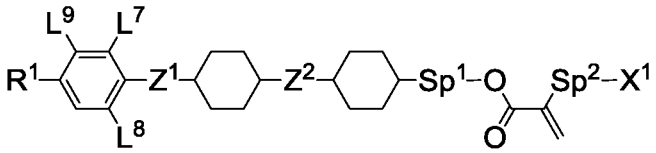
(1α-28)



(1α-29)



(1α-30)



(1α-31)

式（１α－１５）から式（１α－３１）において、

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

Ｚ[1]、Ｚ[2]、およびＺ[3]は独立して、単結合または－（ＣＨ[2]）[2]－であり；

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

Sp^2は、炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

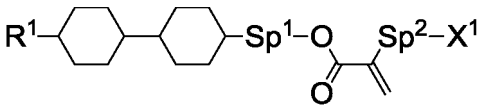
L^1、L^2、L^3、L^4、L^5、L^6、L^7、L^8、L^9、およびL^{10}は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Y^1、Y^2、Y^3、およびY^4は独立して、水素またはメチルであり；

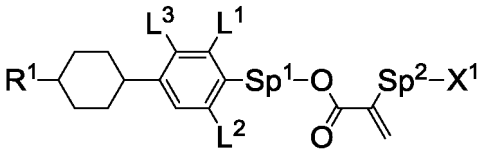
X^1は、－ＯＨ、－NH_2、または－$N(R^3)_2$であり、ここで、R^3は、水素または炭素数１から４のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。

【００４５】

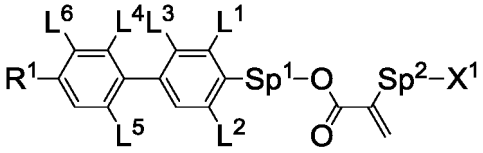
項８．　式（１α－３２）から式（１α－４３）のいずれか１つで表される、項１から７のいずれか１項に記載の化合物。



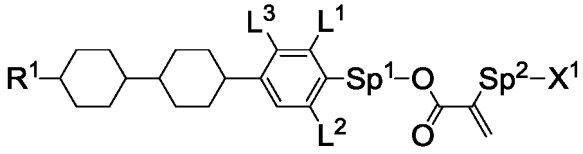
(1α-32)



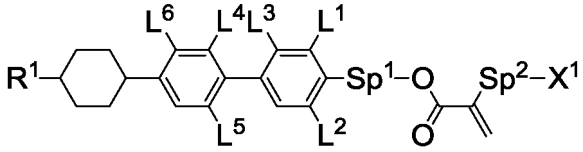
(1α-33)



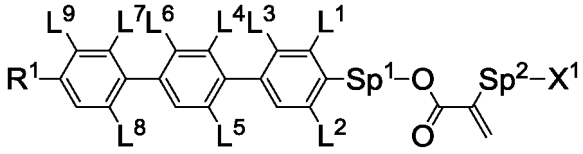
(1α-34)



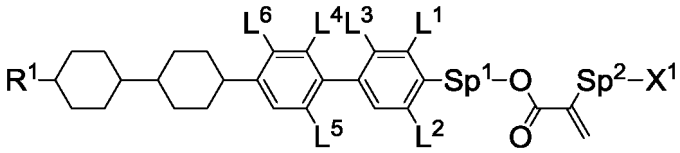
(1α-35)



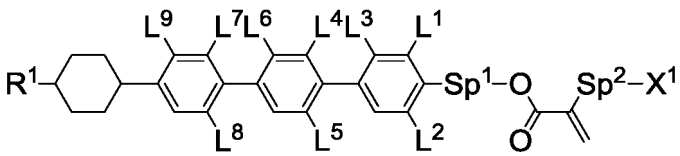
(1α-36)



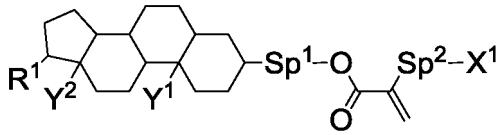
(1α-37)



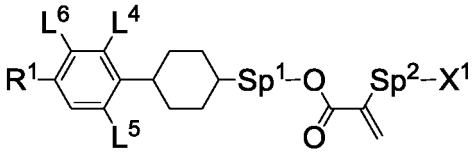
(1α-38)



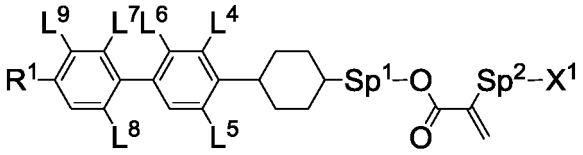
(1α-39)



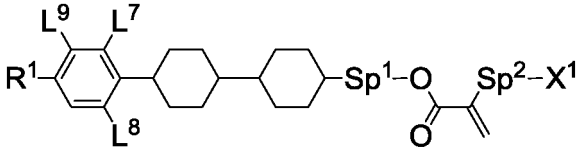
(1α-40)



(1α-41)



(1α-42)



(1α-43)

式（１α－３２）から式（１α－４３）において、

Ｒ^{1}は、炭素数１から１０のアルキルであり；

Ｓｐ^{1}は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

Ｓｐ^{2}は、炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

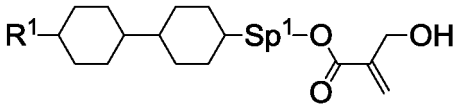
Ｌ^{1}、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、Ｌ^{4}、Ｌ^{5}、Ｌ^{6}、Ｌ^{7}、Ｌ^{8}、およびＬ^{9}は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Ｙ^{1}およびＹ^{2}は独立して、水素またはメチルであり；

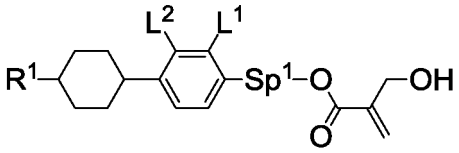
Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、または－Ｎ（Ｒ^{3}）$_{2}$であり、ここで、Ｒ^{3}は、水素または炭素数１から４のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよい。

【００４６】

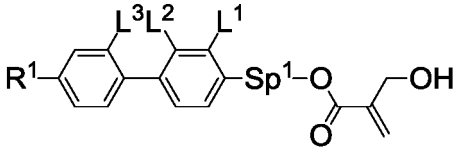
項９．　式（１α－４４）から式（１α－６３）のいずれか１つで表される、項１から８のいずれか１項に記載の化合物。



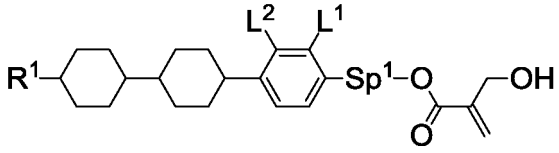
(1α-44)



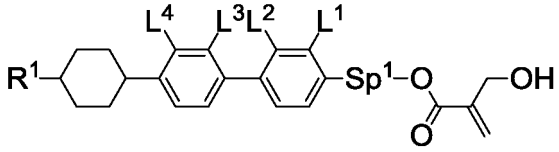
(1α-45)



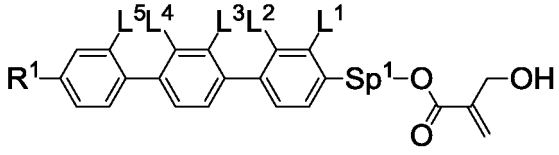
(1α-46)



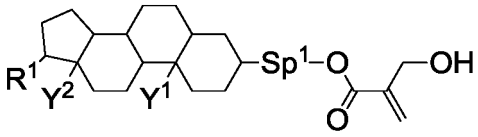
(1α-47)



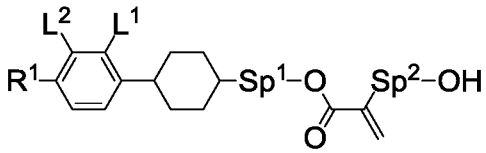
(1α-48)



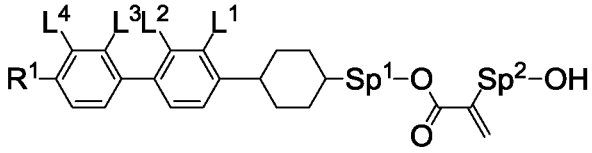
(1α-49)



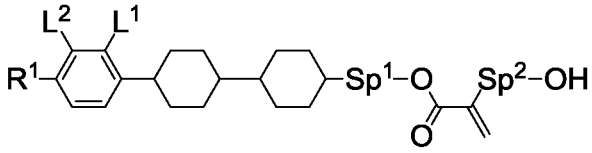
(1α-50)



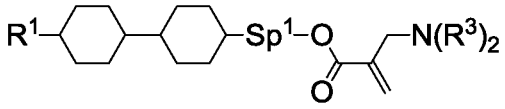
(1α-51)



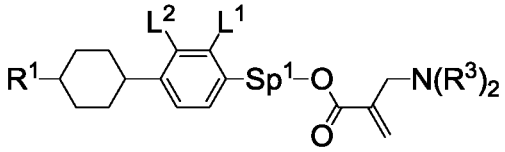
(1α-52)



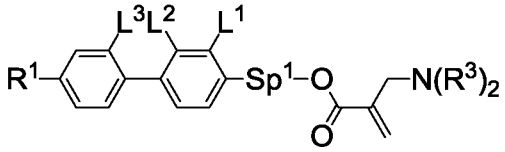
(1α-53)



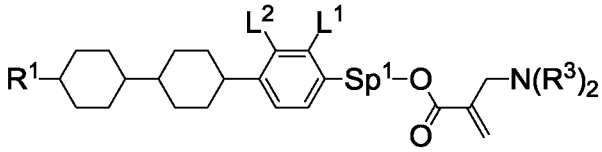
(1α-54)



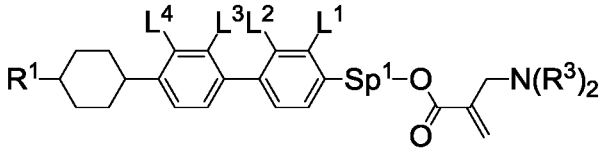
(1α-55)



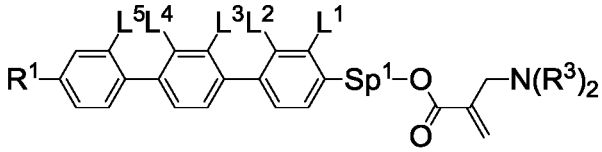
(1α-56)



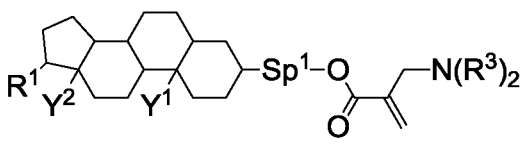
(1α-57)



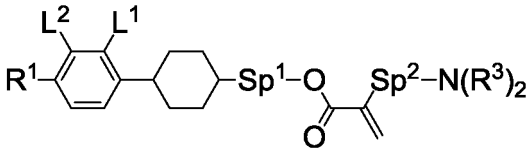
(1α-58)



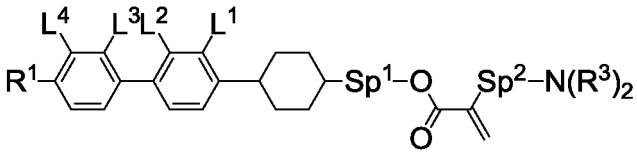
(1α-59)



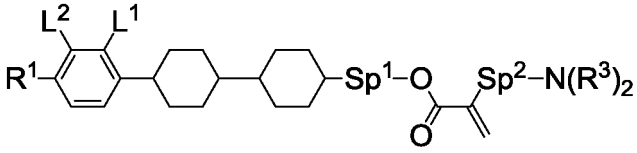
(1α－60)



(1α-61)



(1α-62)



(1α-63)

式（１α－４４）から式（１α－６３）において、

Ｒ[1]は、炭素数１から１０のアルキルであり；

Ｓｐ[1]は、単結合または炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

Ｓｐ[2]は、炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

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

Ｙ[1]およびＹ[2]は独立して、水素またはメチルであり；

Ｒ[3]は、水素、メチルまたはエチルである。

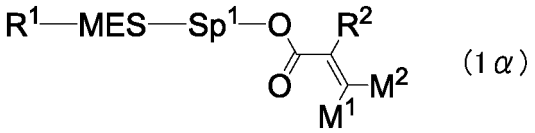
【００４７】

≪２．化合物（１α）の態様≫

化合物（１α）は、少なくとも１つの環より構成されるメソゲン部位と、ヒドロキシアルキル基などの極性基により置換されたアクリロイルオキシ基とを有することを特徴とする。化合物（１α）は、極性基が基板表面と非共有結合的に相互作用するので有用である。用途の一つは、液晶表示素子に使われる液晶組成物用の添加物である。化合物（１α）は液晶分子の配向を制御する目的で添加される。このような添加物は、素子に密閉された条件下では化学的に安定であり、液晶組成物への高い溶解度を有し、そして液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きいことが好ましい。化合物（１α）は、このような特性をかなりの程度で充足する。

【００４８】

化合物（１α）の好ましい例について説明をする。化合物（１α）におけるＲ[1]、ＭＥＳ、Ｓｐ[1]、Ｒ[2]、Ｍ[1]、またはＭ[2]の好ましい例は、化合物（１α）の下位式にも適用される。化合物（１α）において、これらの基の種類を適切に組み合わせることによって、特性を任意に調整することが可能である。化合物の特性に大きな差異がないので、化合物（１α）は、[2]Ｈ（重水素）、[13]Ｃなどの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。



(1α)

【００４９】

式（１α）において、Ｒ[1]は、炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにお

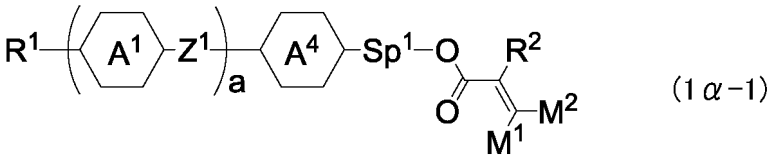
いて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【００５０】

式（１α）において、好ましいＲ^{1}は、炭素数１から１５のアルキル、炭素数２から１５のアルケニル、炭素数１から１４のアルコキシ、または炭素数２から１４のアルケニルオキシである。さらに好ましいＲ^{1}は、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、または炭素数１から９のアルコキシである。特に好ましいＲ^{1}は、炭素数１から１０のアルキルである。

【００５１】

式（１α）において、ＭＥＳは少なくとも１つの環を有するメソゲン基である。メソゲン基は、当業者に周知である。メソゲン基は、化合物が液晶相（中間相）を有するとき、液晶相の形成に寄与する部分を意味する。化合物（１α）の好ましい例は、化合物（１α－１）である。



(1α-1)

【００５２】

式（１α－１）において、好ましい環Ａ^{1}または環Ａ^{4}は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。さらに好ましい環Ａ^{1}または環Ａ^{4}は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、または炭素数１から５のアルキルで置き換えられてもよい。特に好ましい環Ａ^{1}または環Ａ^{4}は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、例えば、１－メチル－１，４－シクロヘキシレン、２－エチル－１，４－シクロヘキシレン、２－フルオロ－１，４－フェニレンのように、少なくとも１つの水素はフッ素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。

【００５３】

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

【００５４】

式（１α－１）において、好ましいＺ^{1}は、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ

－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ$_2$Ｏ－、－ＯＣＦ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－、または－ＣＦ＝ＣＦ－である。さらに好ましいＺ^{1}は、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、または－ＣＨ＝ＣＨ－である。特に好ましいＺ^{1}は、単結合である。

【００５５】

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

【００５６】

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

【００５７】

式（１α）において、好ましいＳｐ^{1}は、単結合、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^{1}は、単結合、炭素数１から３のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から３のアルキレンである。

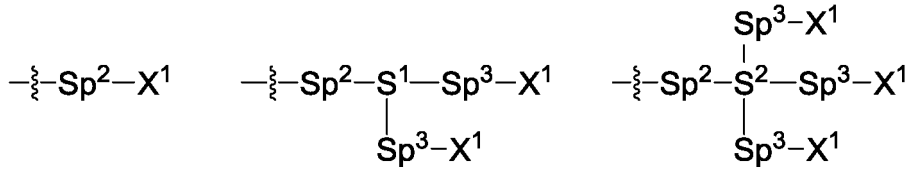
【００５８】

式（１α）において、Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。好ましいＭ^{1}またはＭ^{2}は、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルである。さらに好ましいＭ^{1}またはＭ^{2}は、水素である。

【００５９】

式（１α）において、Ｒ^{2}は、式（１αａ）、式（１αｂ）、または式（１αｃ）で表される基である。好ましいＲ^{2}は、式（１αａ）または式（１αｂ）で表される基である。さらに好ましいＲ^{2}は、式（１αａ）で表される基である。

【００６０】



(1αa) (1αb) (1αc)

【００６１】

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

【００６２】

式（１αａ）、式（１αｂ）、および式（１αｃ）において、好ましいＳｐ^{2}またはＳｐ^{3}は、炭素数１から７のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^{2}またはＳｐ^{3}は、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。特に好ましいＳｐ^{2}またはＳｐ^{3}は、－ＣＨ$_2$－である。

【００６３】

式（１αａ）、式（１αｂ）、および式（１αｃ）において、Ｓ^{1}は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；Ｓ^{2}は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜である。好ましいＳ^{1}は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり、好ましいＳ^{2}は、＞Ｃ＜である。式（１ｃ）よりも式（１ｂ）の方が好ま

しい。

【００６４】

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

(x1)

【００６５】

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

(x1)

【００６６】

≪３．化合物（１α）の合成≫

化合物（１α）の合成法について説明する。化合物（１α）は、公知の有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成できる。「オーガニック・シンセシス」（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc）、「オーガニック・リアクションズ」（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc）、「コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス」（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、「新実験化学講座」（丸善）などの成書を参照してもよい。

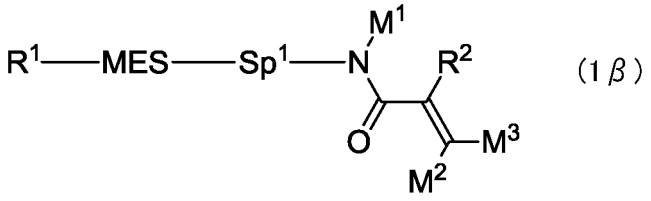
【００６７】

≪４．化合物（１β）の例示≫

下記項に、化合物（１β）を例示する。

【００６８】

項２１．　式（１β）で表される化合物。



(1β)

式（１β）において、

R^1は、炭素数１～１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ

$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

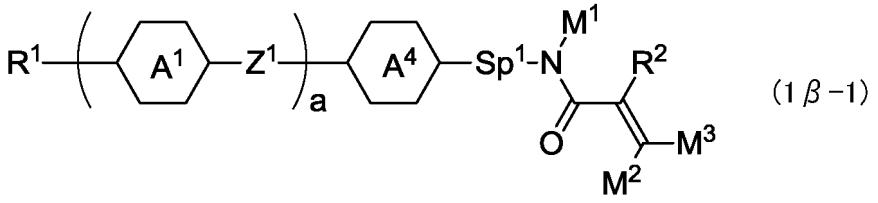
ＭＥＳは、少なくとも１つの環を有するメソゲン基であり；

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

Ｒ^2、Ｍ^1、Ｍ^2、およびＭ^{3}は独立して、水素、ハロゲン、または炭素数１～１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【００６９】

項２２．　式（１β－１）で表される、項２１に記載の化合物。



（１β－１）

式（１β－１）において、

Ｒ^{1}は、炭素数１～１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

環Ａ^{1}および環Ａ^{4}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、アントラセン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｚ^{1}は、単結合または炭素数１から４のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

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

Ｒ^2、Ｍ^1、Ｍ^{2}およびＭ^{3}は独立して、水素、ハロゲン、または炭素数１～８のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ

－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

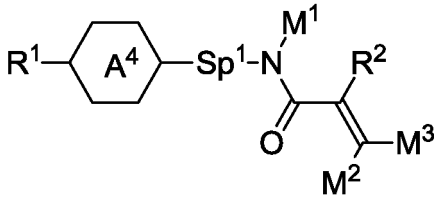
ａは０、１、２、３、または４であり；

ａが０であり、環Ａ^{4}が１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであるときは、Ｒ^{1}は炭素数５～１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１の－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

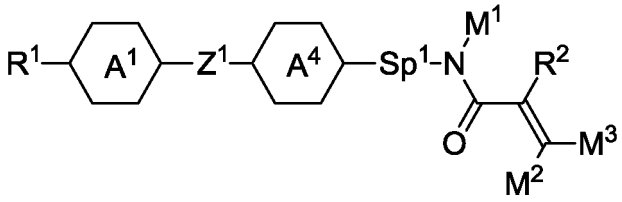
ａが０であり、環Ａ^{4}がペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルまたは２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであるときは、Ｍ^{1}はハロゲンまたは炭素数１～８のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【００７０】

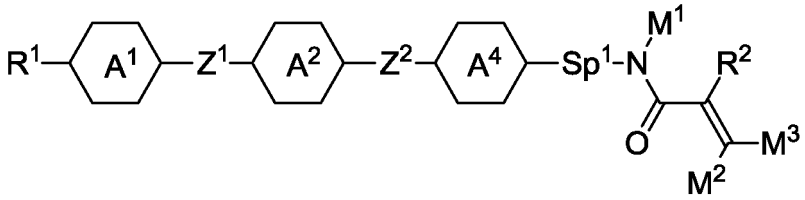
項２３．　式（１β－３）から式（１β－６）のいずれか１つで表される、項２１または２２に記載の化合物。



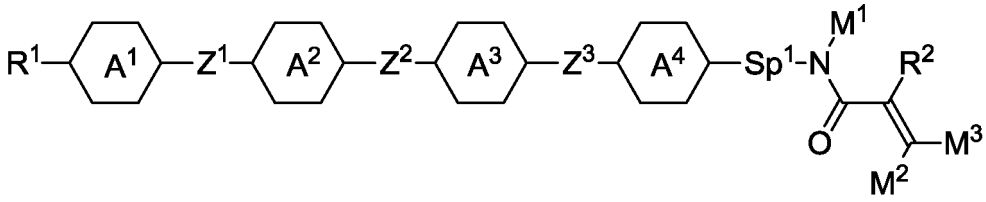
(1β-3)



(1β-4)



(1β-5)



(1β-6)

式（１β－３）から式（１β－６）において、

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

環Ａ^1、環Ａ^2、環Ａ^3、および環Ａ^{4}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，

４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、塩素、炭素数１から７のアルキル、炭素数２から７のアルケニル、または炭素数１から６のアルコキシで置き換えられてもよく；

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

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

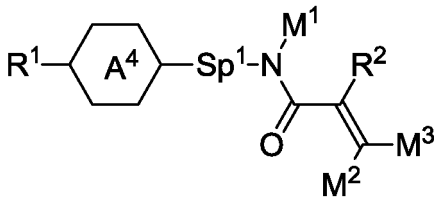
R^2、M^1、M^2、およびM^3は独立して、水素または炭素数１～８のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素、または塩素で置き換えられてもよく；

式（１β－３）において、環A^4が１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであるときは、R^1は炭素数５～１５のアルキル、炭素数５～１５のアルケニル、炭素数４～１４のアルコキシ、または炭素数４から１４のアルケニルオキシであり、これらの基において少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられても良く；

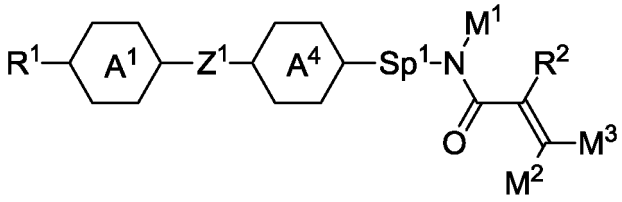
式（１β－３）において、環A^4がペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルまたは２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであるときは、M^1は炭素数１～８のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【００７１】

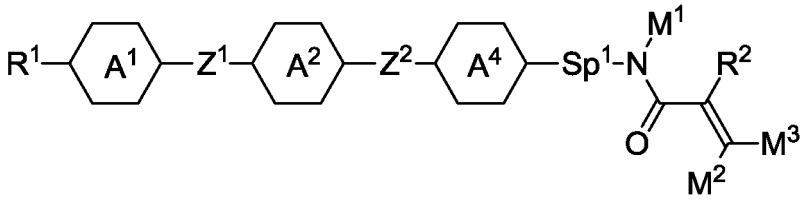
項２４．　式（１β－３）から式（１β－６）のいずれか１つで表される、項２１から２３のいずれか１項に記載の化合物。



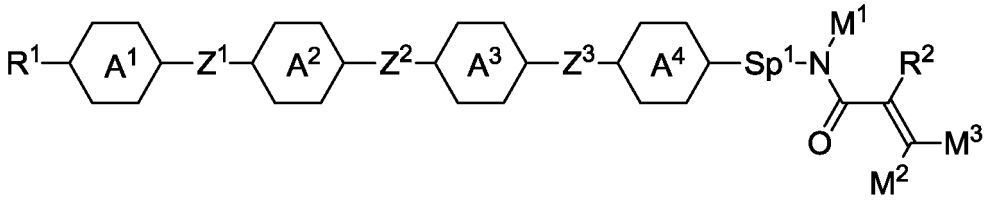
(1β-3)



(1β-4)



(1β-5)



(1β-6)

式（１β－３）から式（１β－６）において、

Ｍ^{2}、およびＭ^{3}は水素であり；

Ｒ^{1}は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

環Ａ^{1}、環Ａ^{2}、環Ａ^{3}、および環Ａ^{4}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素または炭素数１から５のアルキルで置き換えられてもよく；

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

Ｓｐ^{1}は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

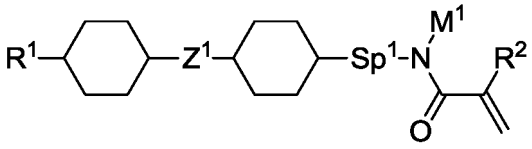
Ｍ^{1}およびＲ^{2}は独立して、水素または炭素数１～５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

式（１β－３）において、環Ａ^{4}が１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであるときは、Ｒ^{1}は炭素数５～１０のアルキル、炭素数５～１０のアルケニル、または炭素数４～９のアルコキシであり；

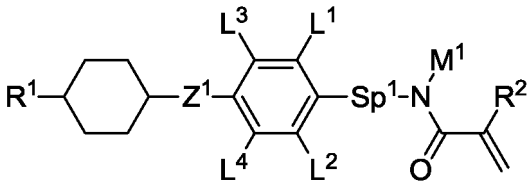
式（１β－３）において、環Ａ^{4}がペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルまたは２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであるときは、Ｍ^{1}は炭素数１～５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよい。

【００７２】

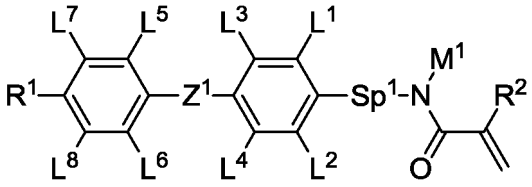
項２５．　式（１β－７）から式（１β－２０）のいずれか１つで表される、項２１から２４のいずれか１項に記載の化合物。



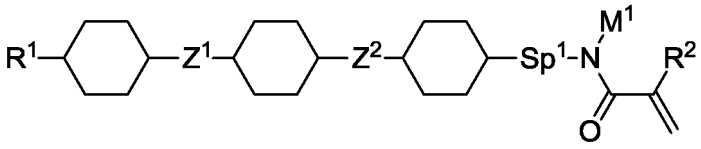
(1β-7)



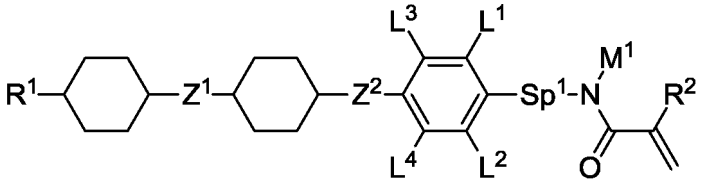
(1β-8)



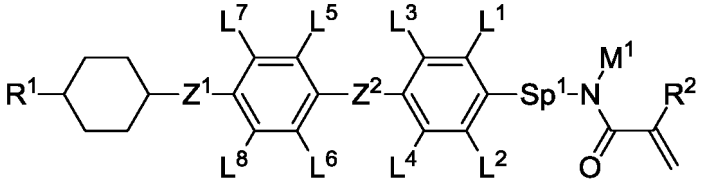
(1β-9)



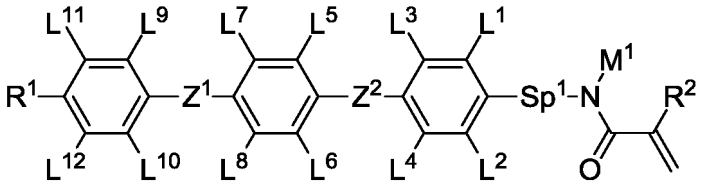
(1β-10)



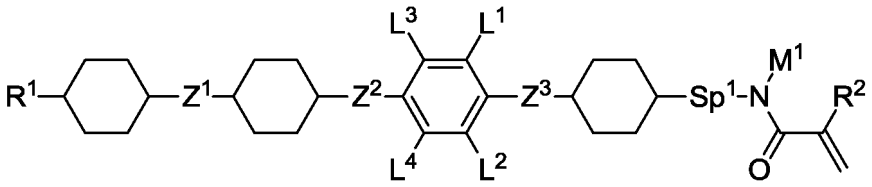
(1β-11)



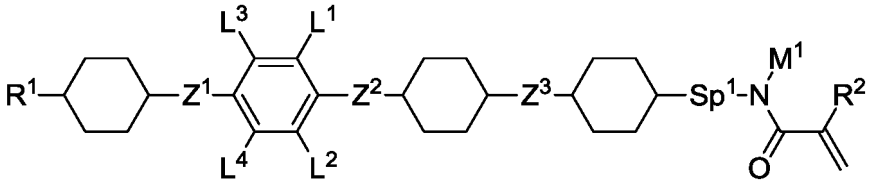
(1β-12)



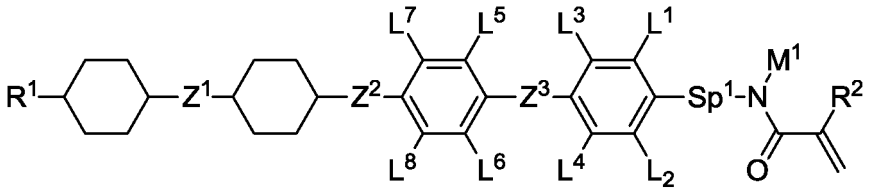
(1β-13)



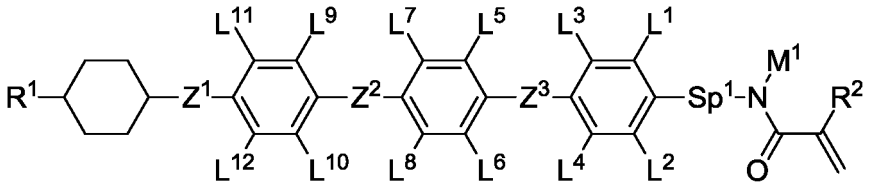
(1β-14)



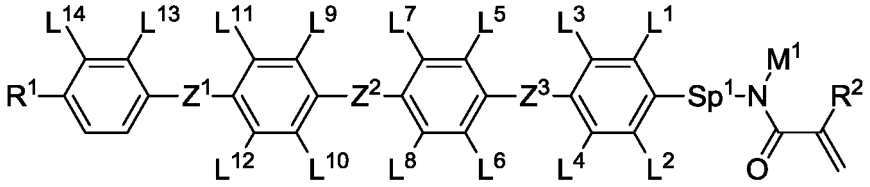
(1β-15)



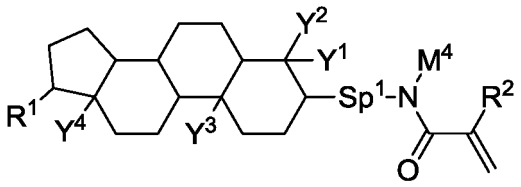
(1β-16)



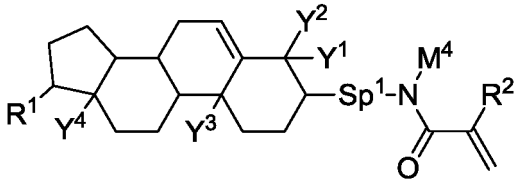
(1β-17)



(1β-18)



(1β-19)



(1β-20)

式（１β－７）から式（１β－２０）において、

Ｒ[1]は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシであり；

Ｚ[1]、Ｚ[2]、およびＺ[3]は独立して、単結合または－（ＣＨ[2]）[2]－であり；

Ｓｐ[1]は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、Ｌ[8]、Ｌ[9]、Ｌ[10]、Ｌ[11]、Ｌ[12]、Ｌ[13]およびＬ[14]は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

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

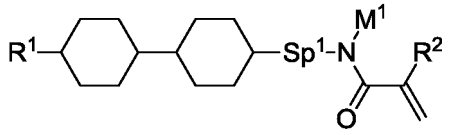
Ｍ[1]は、水素または炭素数１～５のアルキルであり；

Ｍ[4]は、炭素数１～５のアルキルであり；

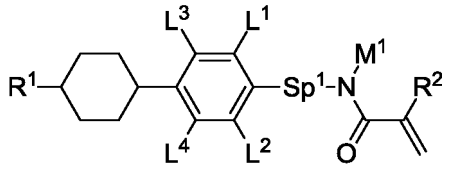
Ｒ[2]は、水素、メチル、またはエチルである。

【００７３】

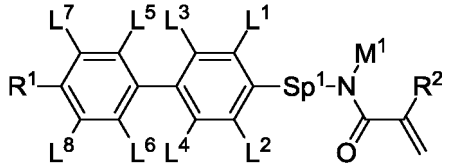
項２６．　式（１β－２１）から式（１β－２９）のいずれか１つで表される、項２１から２４のいずれか１項に記載の化合物。



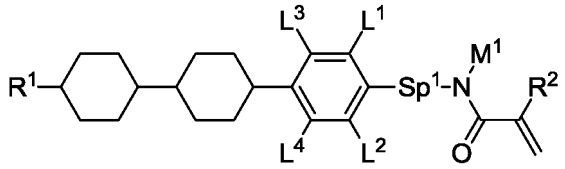
(1β-21)



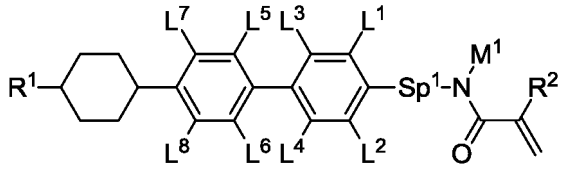
(1β-22)



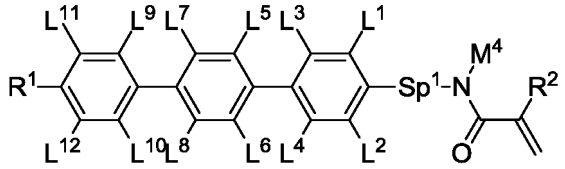
(1β-23)



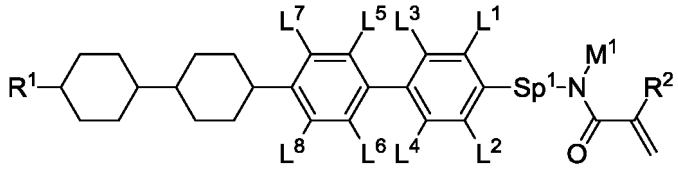
(1β-24)



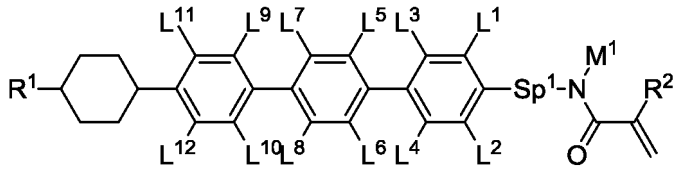
(1β-25)



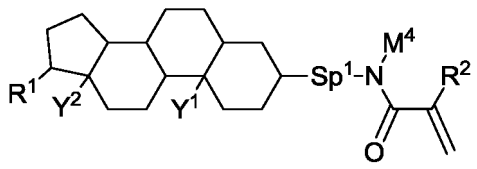
(1β-26)



(1β-27)



(1β-28)



(1β-29)

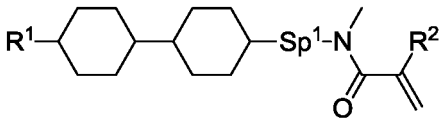
式（１β－２１）から式（１β－２９）において、

Ｒ^{1}は、炭素数１～１０のアルキルであり；

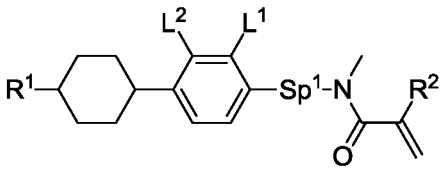
Ｓｐ^{1}は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；
Ｌ^{1}、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、Ｌ^{4}、Ｌ^{5}、Ｌ^{6}、Ｌ^{7}、Ｌ^{8}、Ｌ^{9}、Ｌ^{10}、Ｌ^{11}、およびＬ^{12}は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；
Ｙ^{1}およびＹ^{2}は独立して、水素またはメチルであり、
Ｍ^{1}は、水素、メチル、またはエチルであり；
Ｍ^{4}は、メチルまたはエチルであり；
Ｒ^{2}は、水素またはメチルである。

【００７４】

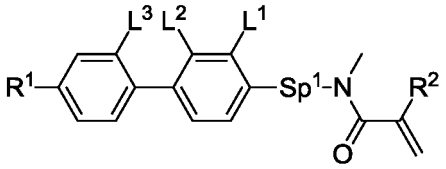
項２７．　式（１β－３０）から式（１β－３６）のいずれか１つで表される、項２１から２４のいずれか１項に記載の化合物。



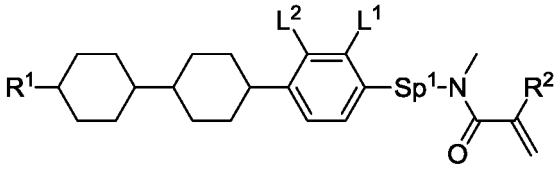
(1β-30)



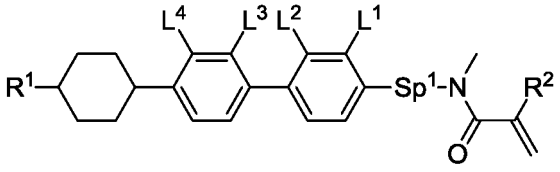
(1β-31)



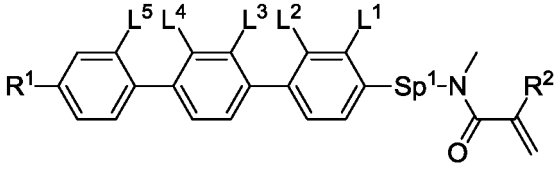
(1β-32)



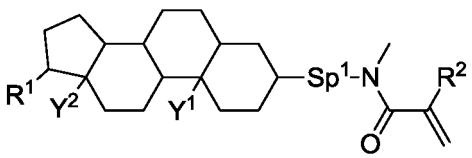
(1β-33)



(1β-34)



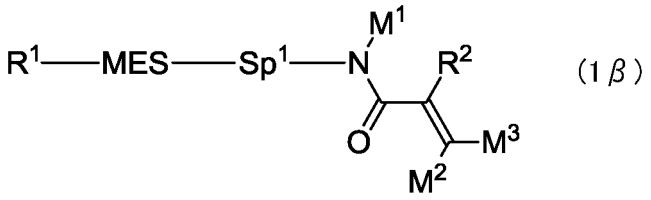
(1β-35)



(1β-36)

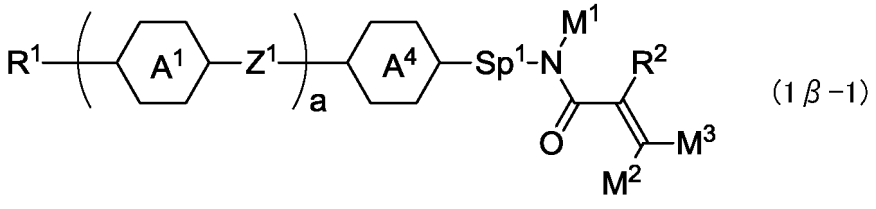
式（１β－３０）から式（１β－３６）において、
Ｒ^{1}は、炭素数１～１０のアルキルであり；
Ｓｐ^{1}は、単結合または炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；
Ｌ^{1}、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、Ｌ^{4}、およびＬ^{5}は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチ

ルであり；
Y^1およびY^2は独立して、水素またはメチルであり；
R^2は、水素またはメチルである。
【００７５】
≪５．化合物（１β）の態様≫
化合物（１β）は、少なくとも１つの環より構成されるメソゲン部位と、アクリルアミド基を有することを特徴とする。化合物（１β）は、極性基が基板表面と非共有結合的に相互作用するので有用である。用途の一つは、液晶表示素子に使われる液晶組成物用の添加物である。化合物（１β）は液晶分子の配向を制御する目的で添加される。このような添加物は、素子に密閉された条件下では化学的に安定であり、液晶組成物への高い溶解度を有し、そして液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きいことが好ましい。化合物（１β）は、このような特性をかなりの程度で充足する。
【００７６】
化合物（１β）の好ましい例について説明をする。化合物（１β）におけるR^1、ＭＥＳ、Sp^1、M^1、R^2、M^2、またはM^3の好ましい例は、化合物（１β）の下位式にも適用される。化合物（１β）において、これらの基の種類を適切に組み合わせることによって、特性を任意に調整することが可能である。化合物の特性に大きな差異がないので、化合物（１β）は、^{2}Ｈ（重水素）、^{13}Ｃなどの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。



(1β)

【００７７】
式（１β）において、R^1は、炭素数１～１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。
【００７８】
式（１β）において、好ましいR^1は、炭素数１～１５のアルキル、炭素数２～１５のアルケニル、炭素数１～１４のアルコキシ、または炭素数２～１４のアルケニルオキシである。さらに好ましいR^1は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシである。特に好ましいR^1は、炭素数１～１０のアルキルである。
【００７９】
式（１β）において、ＭＥＳは少なくとも１つの環を有するメソゲン基である。メソゲン基は、当業者に周知である。メソゲン基は、化合物が液晶相（中間相）を有するとき、液晶相の形成に寄与する部分を意味する。化合物（１β）の好ましい例は、化合物（１β－１）である。



(1β-1)

【００８０】
式（１β－１）において、好ましい環A^1または環A^4は、１，４－シクロヘキシレン

、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。さらに好ましい環Ａ^{1}または環Ａ^{4}は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、または炭素数１から５のアルキルで置き換えられてもよい。特に好ましい環Ａ^{1}または環Ａ^{4}は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。

【００８１】

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

【００８２】

式（１β－１）において、好ましいＺ^{1}は、単結合、－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＦ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＨ$_{2}$－、または－ＣＦ＝ＣＦ－である。さらに好ましいＺ^{1}は、単結合、－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－、または－ＣＨ＝ＣＨ－である。特に好ましいＺ^{1}は、単結合である。

【００８３】

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

【００８４】

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

【００８５】

式（１β）において、好ましいＳｐ^{1}は、単結合、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_{2}$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^{1}は、単結合、炭素数１から３のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_{2}$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から３のアルキレンである。

【００８６】

式（１β）において、Ｍ^{2}およびＭ^{3}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。好ましいＭ^{2}またはＭ^{3}は、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルである。さらに好ましいＭ^{2}またはＭ^{3}は、水素である。

【００８７】

式（１β）において、R^2は水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。好ましいR^2は水素、メチル、エチルである。さらに好ましいR^2は水素である。

【００８８】

式（１β）において、M^1は水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。好ましいM^1は水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルである。さらに好ましいM^1はメチルである。

【００８９】

≪６．化合物（１β）の合成≫

化合物（１β）の合成法について説明する。化合物（１β）は、公知の有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成できる。「オーガニック・シンセシス」（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc）、「オーガニック・リアクションズ」（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc）、「コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス」（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、「新実験化学講座」（丸善）などの成書を参照してもよい。

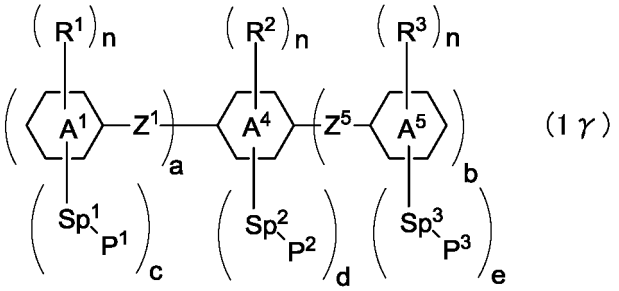
【００９０】

≪７．化合物（１γ）の例示≫

下記項に、化合物（１γ）を例示する。

【００９１】

項４１．　式（１γ）で表される化合物。



（１γ）

式（１γ）において、

R^1、R^2、R^3は独立して、水素または炭素数１～１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－Ｓ－、または－ＮＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

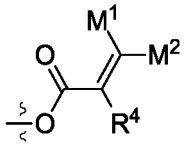
ｎは独立して０、１、または２であり；

環A^4は、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレン、ナフタレン、デカヒドロナフタレン、テトラヒドロナフタレン、テトラヒドロピラン、１，３－ジオキサン、ピリミジン、またはピリジンであり、環A^1および環A^5は独立して、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、フェニル、１－ナフチル、２－ナフチル、テトラヒドロピラン－２－イル、１，３－ジオキサン－２－イル、ピリミジン－２－イル、またはピリジン－２－イルであり、

これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

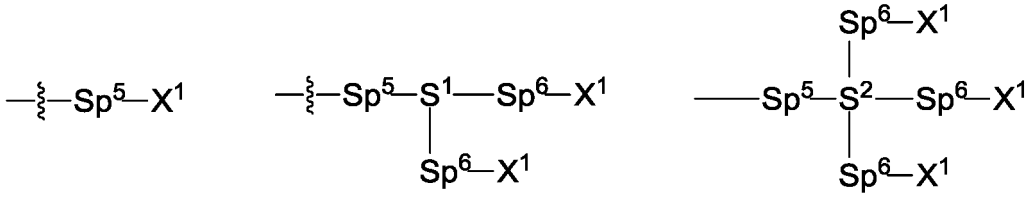
Z^1およびZ^5は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なく

とも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；
Ｓｐ^{1}、Ｓｐ^{2}、およびＳｐ^{3}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；
ａおよびｂは独立して、０、１、２、３、または４であり、そしてａおよびｂの和は、１、２、３、または４であり；
ｃ、ｄおよびｅは独立して、０、１、２、３、または４であり；
ｃ、ｄおよびｅの和は、２、３、または４であり；
Ｐ^{1}、Ｐ^{2}、およびＰ^{3}は独立して、式（Ｐ－１）で表される重合性基である。



(P-1)

式（Ｐ－１）において、
Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；
Ｒ^{4}は、式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）で表される基から選択された基である。



(1γa) (1γb) (1γc)

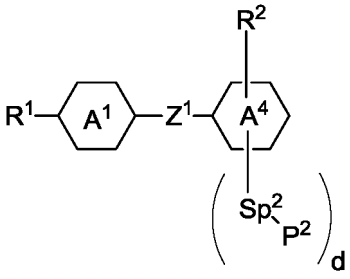
式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）において、
Ｓｐ^{5}およびＳｐ^{6}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
Ｓ^{1}は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；
Ｓ^{2}は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜であり；
Ｘ^{1}は独立して、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、－ＯＲ^{5}、－Ｎ（Ｒ^{5}）$_{2}$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_{2}$、または－Ｓｉ（Ｒ^{5}）$_{3}$で表される基であり、ここで、Ｒ^{5}は、水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【００９２】
項４２．　式（Ｐ－１）において、Ｒ^{4}が、式（１γａ）または式（１γｂ）で表される基である、項４１に記載の化合物。

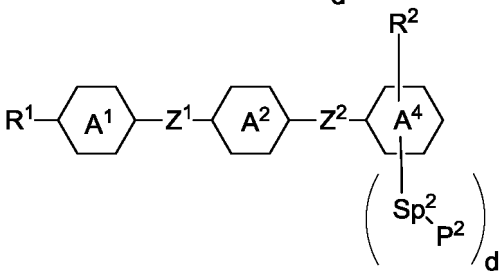
【００９３】
項４３．　式（１γ）において、Ｒ^{4}が、式（１γａ）で表され、ｃ、ｄおよびｅが、０、１、２または３であり、ｃ、ｄおよびｅの和は、２、３、または４である項４１または４２に記載の化合物。

【００９４】

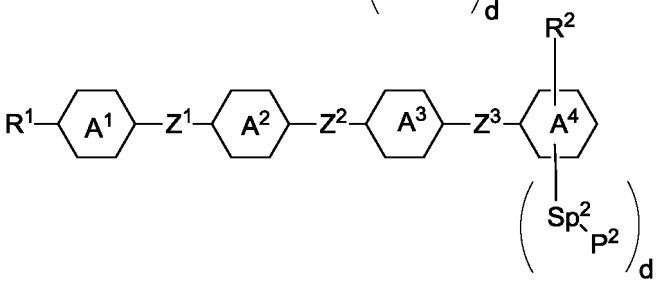
項４４．式（１γ－１）から式（１γ－６）のいずれか１つで表される、項４１から４３のいずれか１項に記載の化合物。



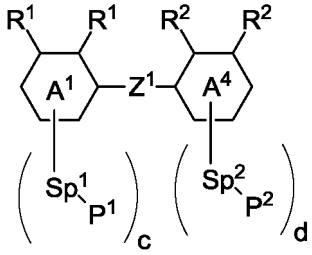
(1γ-1)



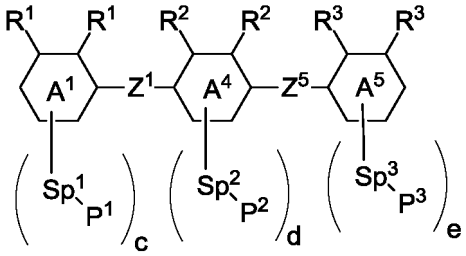
(1γ-2)



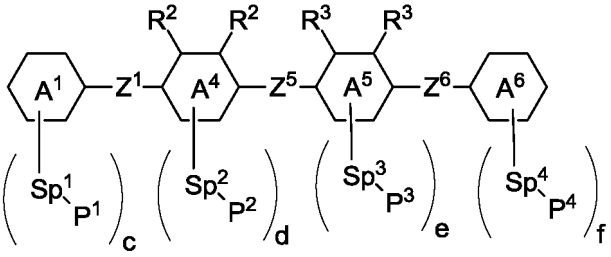
(1γ-3)



(1γ-4)



(1γ-5)



(1γ-6)

式（１γ－１）から式（１γ－６）において、

Ｒ[1]、Ｒ[2]、およびＲ[3]は独立して、水素、炭素数１～１２のアルキル、炭素数２～１２のアルケニル、炭素数１～１１のアルコキシ、または炭素数２～１１のアルケニルオキ

シであり、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

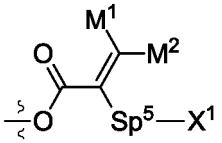
環Ａ^{1}、環Ａ^{2}、環Ａ^{3}、環Ａ^{4}、環Ａ^{5}、および環Ａ^{6}は独立して、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレン、ナフタレン、テトラヒドロピラン、または１，３－ジオキサンであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０アルケニル、炭素数１から９アルコキシ、または炭素数２から９アルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｚ^{1}、Ｚ^{2}、Ｚ^{3}、Ｚ^{5}およびＺ^{6}は独立して、単結合または炭素数１から８のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－または、－ＯＣＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｓｐ^{1}、Ｓｐ^{2}、Ｓｐ^{3}およびＳｐ^{4}は独立して、単結合または炭素数１から８のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－または、－ＯＣＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ｃ、ｄ、ｅおよびｆは独立して０、１、２、３であり、ｃ、ｄ、ｅおよびｆの和は、２、３、または４である。ただし、式（１γ－１）から式（１γ－３）において、ｄは２または３であり；

Ｐ^{1}、Ｐ^{2}、Ｐ^{3}およびＰ^{4}は独立して、式（Ｐ－１）で表される重合性基である。



(P-1)

式（Ｐ－１）において、

Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から４のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から４のアルキルであり；

Ｓｐ^{5}は、単結合または炭素数１から８のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－または、－ＯＣＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、－ＯＲ^{5}、－Ｎ（Ｒ^{5}）$_{2}$、または－Ｓｉ（Ｒ^{5}）$_{3}$で表される基であり、ここで、Ｒ^{5}は、水素または炭素数１から８のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【００９５】

項４５．　項４４に記載の化合物であって、式（１γ－１）から式（１γ－６）において

Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、およびＲ^{3}は独立して、水素、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、炭素数１～９のアルコキシ、または炭素数２～９のアルケニルオキシであり、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

環Ａ^{1}、環Ａ^{2}、環Ａ^{3}、環Ａ^{4}、環Ａ^{5}、および環Ａ^{6}は独立して、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレン、ナフタレン、または、テトラヒドロピランであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、塩素、炭素数１から６のアルキル、炭素数２から６のアルケニル、または炭素数２から５のアルコキシで置き換えられて

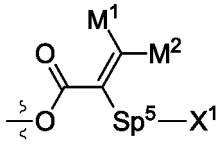
もよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Z^1、Z^2、Z^3、Z^5およびZ^6は独立して、単結合または炭素数１から６のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－または、－ＯＣＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、または、フッ素で置き換えられてもよく；

Sp^1、Sp^2、Sp^3およびSp^4は独立して、単結合または炭素数１から６のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

ｃ、ｄ、ｅおよびｆは独立して０、１、２、３であり、ｃ、ｄ、ｅおよびｆの和は、２、３、または４である。ただし、式（１γ－１）～式（１γ－３）において、ｄは２、３であり；

P^1、P^2、P^3およびP^4は独立して、式（Ｐ－１）で表される重合性基である。



(P-1)

式（Ｐ－１）において、

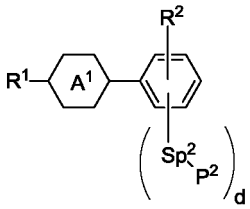
M^1およびM^2は独立して、水素、炭素数１または３のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１または３のアルキルであり；

Sp^5は、単結合または炭素数１から６のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく、

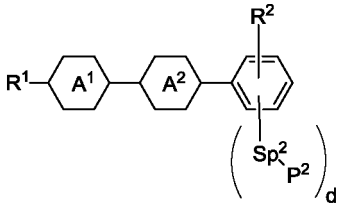
X^1は、－ＯＨ、－NH_2で表される基である。

【００９６】

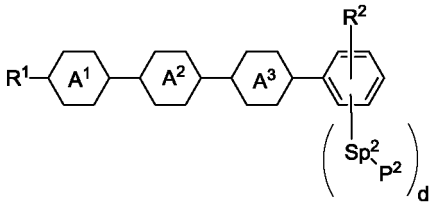
項４６．　式（１γ－７）から式（１γ－２１）のいずれか１つで表される、項４１から４５のいずれか１項に記載の化合物。



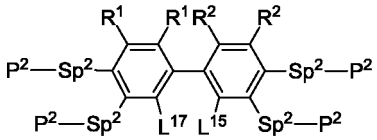
(1γ-7)



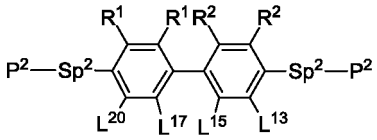
(1γ-8)



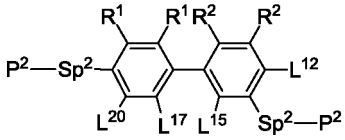
(1γ-9)



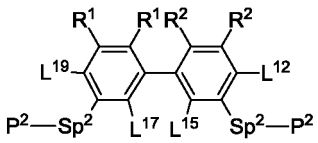
(1γ-10)



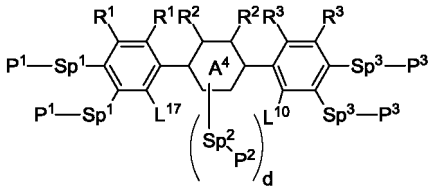
(1γ-11)



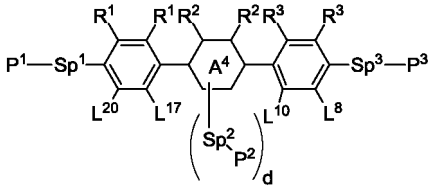
(1γ-12)



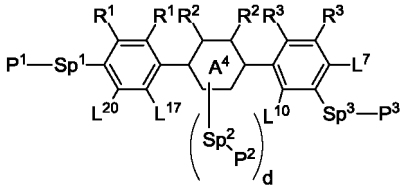
(1γ-13)



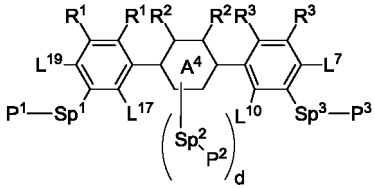
(1γ-14)



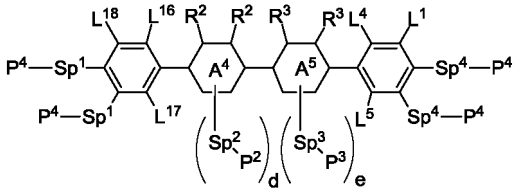
(1γ-15)



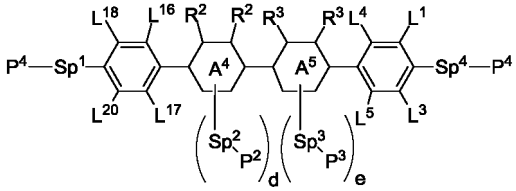
(1γ-16)



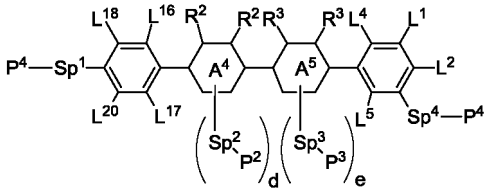
(1γ-17)



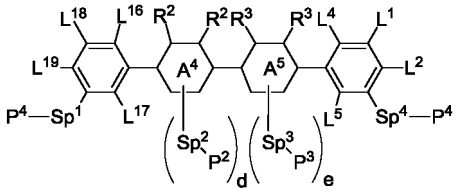
(1γ-18)



(1γ-19)



(1γ-20)



(1γ-21)

式（１γ－７）から式（１γ－２１）において、

Ｒ[1]、Ｒ[2]、およびＲ[3]は独立して、水素、炭素数１～８のアルキル、炭素数２～８のアルケニル、炭素数１～７のアルコキシ、または炭素数２～７のアルケニルオキシであり；

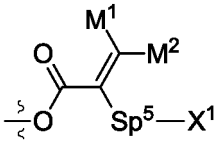
環Ａ^{1}、環Ａ^{2}、環Ａ^{3}、環Ａ^{4}、環Ａ^{5}は独立して、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレンであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、炭素数２から５のアルケニル、または炭素数１から４のアルコキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

Ｌ^{1}、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、Ｌ^{4}、Ｌ^{5}、Ｌ^{7}、Ｌ^{8}、Ｌ^{10}、Ｌ^{12}、Ｌ^{13}、Ｌ^{15}、Ｌ^{16}、Ｌ^{17}、Ｌ^{18}、Ｌ^{19}、Ｌ^{20}は独立して、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Ｓｐ^{1}、Ｓｐ^{2}、Ｓｐ^{3}およびＳｐ^{4}は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

ｃ、ｄ、ｅおよびｆは独立して０、１、または、２であり、ｃ、ｄ、ｅおよびｆの和は、２、３、または４である。ただし、式（１γ－７）から式（１γ－９）においては、ｄは２であり；

Ｐ^{1}、Ｐ^{2}、Ｐ^{3}およびＰ^{4}は独立して式（Ｐ－１）で表される重合性基である。



(P-1)

式（Ｐ－１）において、

Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルであり；

Ｓｐ^{5}は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$で表される基である。

【００９７】

項４７．　式（１γ－７）から式（１γ－２１）において、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、およびＲ^{3}は独立して、水素、炭素数１～８のアルキル、炭素数２～８のアルケニル、炭素数１～７のアルコキシ、または炭素数２～７のアルケニルオキシであり；

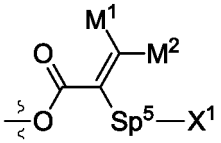
環Ａ^{1}、環Ａ^{2}、環Ａ^{3}、環Ａ^{4}、環Ａ^{5}は独立して、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレンであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、炭素数１から３のアルキル、炭素数２から３のアルケニル、または炭素数１から２のアルコキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

Ｌ^{1}、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、Ｌ^{4}、Ｌ^{5}、Ｌ^{7}、Ｌ^{8}、Ｌ^{10}、Ｌ^{12}、Ｌ^{13}、Ｌ^{15}、Ｌ^{16}、Ｌ^{17}、Ｌ^{18}、Ｌ^{19}、Ｌ^{20}は独立して、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Ｓｐ^{1}、Ｓｐ^{2}、Ｓｐ^{3}およびＳｐ^{4}は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

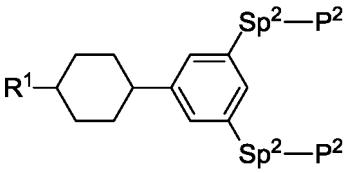
ｃ、ｄ、ｅおよびｆは独立して０、１、または、２であり、ｃ、ｄ、ｅおよびｆの和は、２、３、または４である。ただし、式（１γ－７）から式（１γ－９）においては、ｄは２であり；

Ｐ^{1}、Ｐ^{2}、Ｐ^{3}およびＰ^{4}は独立して、式（Ｐ－１）で表される重合性基である。

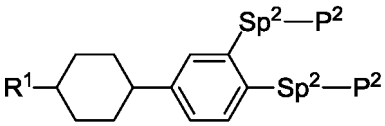


(P-1)

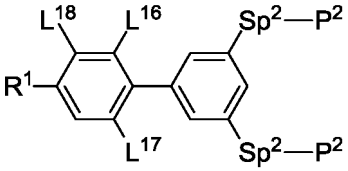
式（Ｐ－１）において、
　M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、メチル、または、エチルであり；
　Sp^5は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；
　X^1は、－ＯＨ、－NH_2で表される基である。
【００９８】
　項４８．式（１γ－２２）～式（１γ－３４）のいずれか１つで表される、項４１から４７のいずれか１項に記載の化合物。



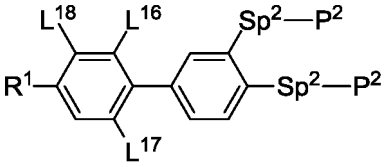
(1γ-22)



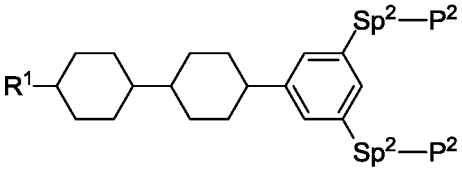
(1γ-23)



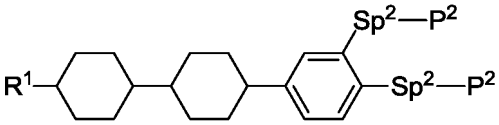
(1γ-24)



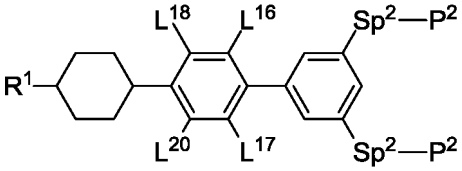
(1γ-25)



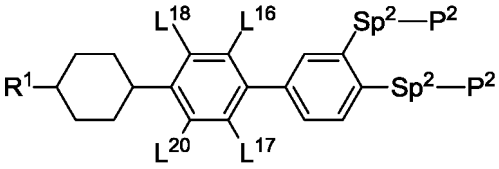
(1γ-26)



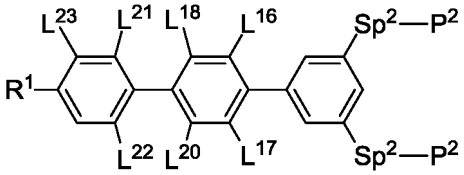
(1γ-27)



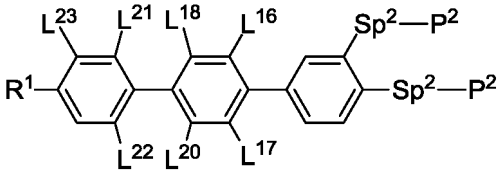
(1γ-28)



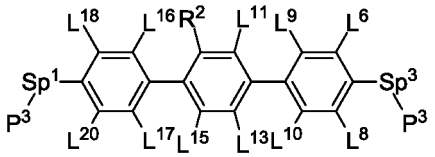
(1γ-29)



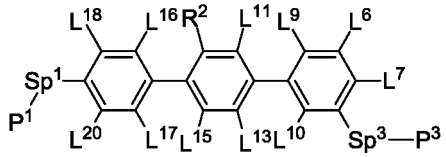
(1γ-30)



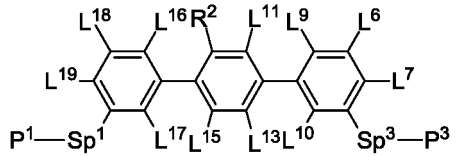
(1γ-31)



(1γ-32)



(1γ-33)



(1γ-34)

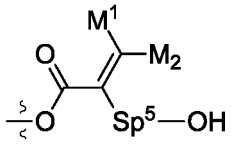
式（１γ－２２）～式（１γ－３４）において、

Ｒ[1]、Ｒ[2]、は、炭素数１～７のアルキル、炭素数２～７のアルケニル、炭素数１～６のアルコキシ、または炭素数２～６のアルケニルオキシであり；

Ｌ[6]、Ｌ[7]、Ｌ[8]、Ｌ[9]、Ｌ[10]、Ｌ[11]、Ｌ[13]、Ｌ[15]、Ｌ[16]、Ｌ[17]、Ｌ[18]、Ｌ[19]、Ｌ[20]、Ｌ[21]、Ｌ[22]、Ｌ[23]は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Ｓｐ[1]、Ｓｐ[2]、およびＳｐ[3]は独立して、単結合または炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｐ[1]、Ｐ[2]、およびＰ[3]は独立して、式（Ｐ－１）で表される重合性基である。



(P-1)

式（Ｐ－１）において、

Ｍ[1]およびＭ[2]は独立して、水素、フッ素、または、メチルであり；

Ｓｐ[5]は、単結合または炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよい。

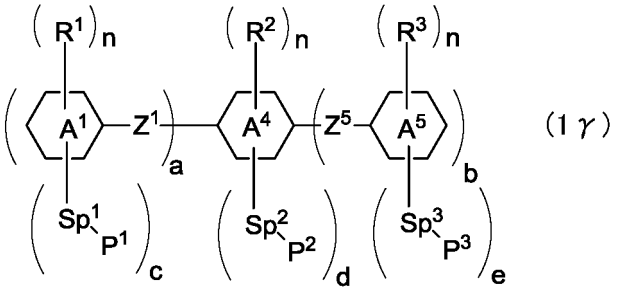
【００９９】

≪８．化合物（１γ）の態様≫

化合物（１γ）は、少なくとも１つの環より構成されるメソゲン部位と、複数の極性基を有することを特徴とする。化合物（１γ）は、極性基が基板表面と非共有結合的に相互作用するので有用である。用途の一つは、液晶表示素子に使われる液晶組成物用の添加物である。化合物（１γ）は液晶分子の配向を制御する目的で添加される。このような添加物は、素子に密閉された条件下では化学的に安定であり、液晶組成物への高い溶解度を有し、そして液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きいことが好ましい。化合物（１γ）は、このような特性をかなりの程度で充足する。

【０１００】

化合物（１γ）の好ましい例について説明をする。化合物（１γ）におけるＲ[1]、Ｒ[2]、Ｒ[2]、Ｒ[3]、Ｚ[1]、Ｚ[2]、Ｚ[3]、Ａ[1]、Ａ[4]、Ａ[5]、Ｓｐ[1]、Ｓｐ[2]、Ｓｐ[3]、Ｐ[1]、Ｐ[2]、Ｐ[3]、の好ましい例は、化合物（１γ）の下位式にも適用される。化合物（１γ）において、これらの基の種類を適切に組み合わせることによって、特性を任意に調整することが可能である。化合物の特性に大きな差異がないので、化合物（１γ）は、^{2}Ｈ（重水素）、^{13}Ｃなどの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。



（１γ）

【０１０１】

式（１γ）において、Ｒ[1]は、炭素数１～１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ[2]）[2]－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【０１０２】

式（１γ）において、好ましいＲ[1]は、炭素数１～１５のアルキル、炭素数２～１５のアルケニル、炭素数１～１４のアルコキシ、または炭素数２～１４のアルケニルオキシである。さらに好ましいＲ[1]は、炭素数１～１０のアルキル、炭素数２～１０のアルケニル、または炭素数１～９のアルコキシである。特に好ましいＲ[1]は、炭素数１～１０のアルキルである。

【０１０３】

式（１γ）において、環Ａ[1]、環Ａ[4]、および環Ａ[5]は独立して、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレン、ナフタレン、デカヒドロナフタレン、テトラヒドロナフタレン、テトラヒドロピラン、１，３－ジオキサン、ピリミジン、またはピリジンであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、ハロゲン、炭素数１から１２のアルキル、炭素数１から１２のアルコキシ、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から１２のアルキルで置き換えられてもよい。

【０１０４】

式（１γ）において、好ましい環Ａ[1]、環Ａ[4]、または環Ａ[5]は、シクロヘキシレン、シクロヘキセニレン、フェニレン、ナフタレン、テトラヒドロピラン、または１，３－ジオキサンであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、塩素、炭素数１から５のアルキル、または炭素数１から４のアルコキシで置き換えられてもよい。さらに好ましい環Ａ[1]、環Ａ[4]、または環Ａ[5]は、シクロヘキシレン、フェニレン、少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられたフェニレン、または少なくとも１つの水素が炭素数１から３のアルキルで置き換えられたフェニレンである。特に好ましい環Ａ[1]、環Ａ[4]、または環Ａ[5]は、シクロヘキシレン、フェニレン、少なくとも１つの水素がメチル基で置換されたフェニレン、少なくとも１つの水素がエチル基で置換されたフェニレンである。

【０１０５】

式（１γ）において、Ｚ[1]およびＺ[5]は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ[2]）[2]－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【０１０６】

式（１γ）において、好ましいＺ[1]またはＺ[5]は、単結合、－（ＣＨ[2]）[2]－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ[2]Ｏ－、－ＯＣＦ[2]－、－ＣＨ[2]Ｏ－、－ＯＣＨ[2]－、または－ＣＦ＝ＣＦ－である。さらに好ましいＺ[1]またはＺ[5]は、単結合である。

【０１０７】

式（１γ）において、Ｓｐ[1]、Ｓｐ[2]、またはＳｐ[3]は独立して、単結合または炭素数

１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

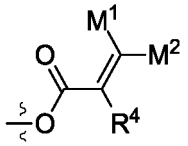
【０１０８】

式（１γ）において、好ましいＳｐ^1、Ｓｐ^2、またはＳｐ^{3}は、単結合、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^1、Ｓｐ^2、またはＳｐ^{3}は、単結合、炭素数１から３のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から３のアルキレンである。特に好ましいＳｐ^1、Ｓｐ^2、またはＳｐ^{3}は、－ＣＨ$_2$－、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－（ＣＨ$_2$）$_3$－、または－Ｏ（ＣＨ$_2$）$_2$－である。

【０１０９】

式（１γ）において、Ｐ^1、Ｐ^2、およびＰ^{3}は独立して、式（Ｐ－１）で表される重合性基である。

【０１１０】



(P-1)

【０１１１】

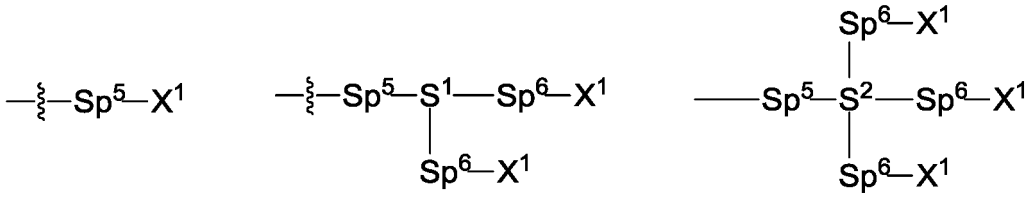
式（Ｐ－１）において、Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。好ましいＭ^1、Ｍ^{2}は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましいＭ^1、Ｍ^{2}は水素である。

【０１１２】

式（Ｐ－１）において、Ｒ^{4}は、式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）で表される基で表される基である。

好ましいＲ^{4}は、式（１γａ）または式（１γｂ）で表される基である。さらに好ましいＲ^{4}は、式（１γａ）で表される基である。

【０１１３】



(1γa)　　(1γb)　　(1γc)

【０１１４】

式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）において、Ｓｐ^{5}およびＳｐ^{6}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【０１１５】

式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）において、好ましいＳｐ^{5}およびＳｐ^{6}は、単結合、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^{4}またはＳｐ^{5}は、

単結合、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。特に好ましいＳｐ^{5}およびＳｐ^{6}は、単結合、－ＣＨ$_2$－、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、－（ＣＨ$_2$）$_3$－、または－Ｏ（ＣＨ$_2$）$_2$－である。

【０１１６】

式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）において、Ｓ^{1}は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；Ｓ^{2}は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜である。好ましいＳ^{1}は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり、好ましいＳ^{2}は、＞Ｃ＜である。Ｓ^{2}よりもＳ^{1}の方が好ましい。

【０１１７】

式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）において、Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－ＯＲ^3、－Ｎ（Ｒ^3）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（Ｒ^3）$_3$で表される基であり、ここで、Ｒ^{3}は、水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_2$）$_2$－は－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【０１１８】

式（１γａ）、式（１γｂ）、および式（１γｃ）において、好ましいＸ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、または－Ｓｉ（Ｒ^3）$_3$で表される基であり、ここで、Ｒ^{3}は、炭素数１から５のアルキルまたは炭素数１から４のアルコキシである。さらに好ましいＸ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－Ｓｉ（ＯＣＨ$_3$）$_3$、または－Ｓｉ（ＯＣ$_2$Ｈ$_5$）$_3$である。特に好ましいＸ^{1}は、－ＯＨである。

【０１１９】

式（１γ）において、ａおよびｂは独立して、０、１、２、３、または４であり、そしてａおよびｂの和は、１、２、３、または４である。好ましいａおよびｂの組み合わせは、（ａ＝１、ｂ＝０）、（ａ＝０、ｂ＝１）、（ａ＝２、ｂ＝０）、（ａ＝１、ｂ＝１）、（ａ＝０、ｂ＝２）、（ａ＝３、ｂ＝０）、（ａ＝２、ｂ＝１）、（ａ＝１、ｂ＝２）、または（ａ＝０、ｂ＝３）である。さらに好ましい、ａおよびｂの組み合わせは、（ａ＝１、ｂ＝０）、（ａ＝２、ｂ＝０）、（ａ＝１、ｂ＝１）、（ａ＝３、ｂ＝０）、（ａ＝２、ｂ＝１）、または（ａ＝１、ｂ＝２）である。特に好ましいａおよびｂの組み合わせは、（ａ＝１、ｂ＝０）または（ａ＝２、ｂ＝０）である。

【０１２０】

式（１γ）において、ｄは、０、１、２、３、または４である。好ましいｄは、２または３であり、さらに好ましいｄは２である。

【０１２１】

式（１γ）において、ｃおよびｅは独立して、０、１、２、３、または４である。好ましいｃまたはｅは、０である。

【０１２２】

≪９．化合物（１γ）の合成≫

化合物（１γ）の合成法について説明する。化合物（１γ）は、公知の有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成できる。「オーガニック・シンセシス」（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc）、「オーガニック・リアクションズ」（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc）、「コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス」（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、「新実験化学講座」（丸善）などの成書を参照してもよい。

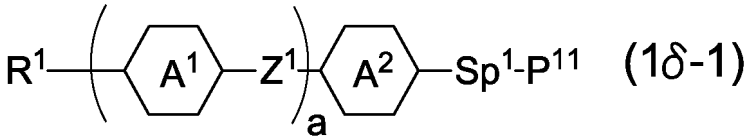
【０１２３】

≪１０．化合物（１δ）の例示≫

下記項に、化合物（１δ）を例示する。

【０１２４】

項６１．　式（１δ－１）で表される化合物。



(1δ-1)

式（１δ－１）において、

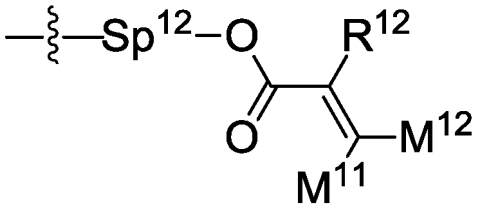
Ｒ[1]は炭素数１から１５のアルキルであり、このＲ[1]において、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ[2]ＣＨ[2]－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

環Ａ[1]および環Ａ[2]は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、アントラセン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

ａは、０、１、２、３、または４であり；

Ｚ[1]は単結合または炭素数１から６のアルキレンであり、このＺ[1]において、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ[2]ＣＨ[2]－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｓｐ[1]は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ[1]において、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ[2]ＣＨ[2]－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、式（１δａ）で表される基から選択された基で置き換えられていて；



(1δa)

式（１δａ）において、

Ｓｐ[12]は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ[12]において、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ[2]ＣＨ[2]－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

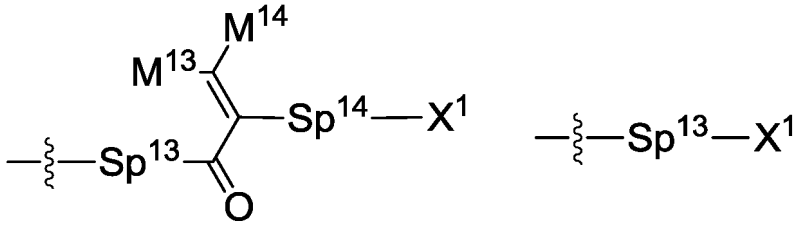
Ｍ[11]およびＭ[12]は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

Ｒ[12]は炭素数１から１５のアルキルであり、このＲ[12]において、少なくとも１つの

－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく：

式（１δ－１）において、

Ｐ^{11}は、式（１δｅ）および式（１δｆ）で表される基から選択された基であり；



(1δe) (1δf)

式（１δｅ）および（１δｆ）において、

Ｓｐ^{13}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{13}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｓｐ^{14}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このＳｐ^{14}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｍ^{13}およびＭ^{14}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

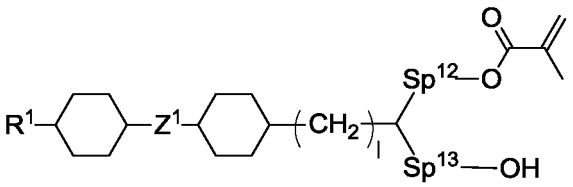
Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_2$、－ＯＲ^{15}、－Ｎ（Ｒ^{15}）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（Ｒ^{15}）$_3$であり；

－ＯＲ^{15}、－Ｎ（Ｒ^{15}）$_2$、および－Ｓｉ（Ｒ^{15}）$_3$において、

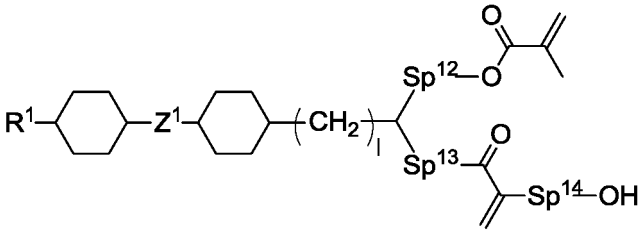
Ｒ^{15}は水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このＲ^{15}において、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【０１２５】

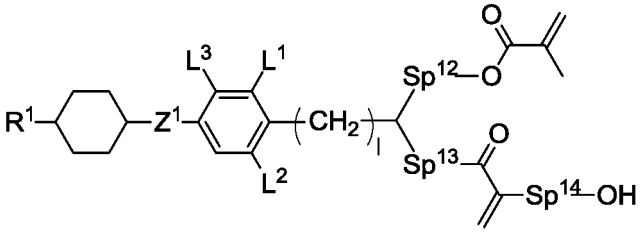
項６２．　式（１δ－２）から式（１δ－２１）で表される、項６１に記載の化合物。



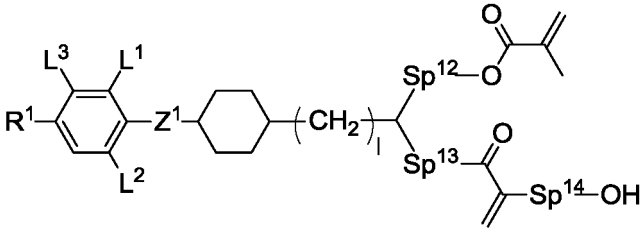
(1δ-2)



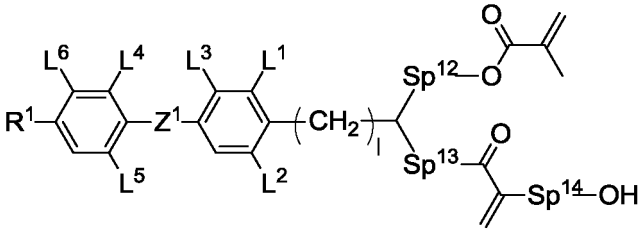
(1δ-3)



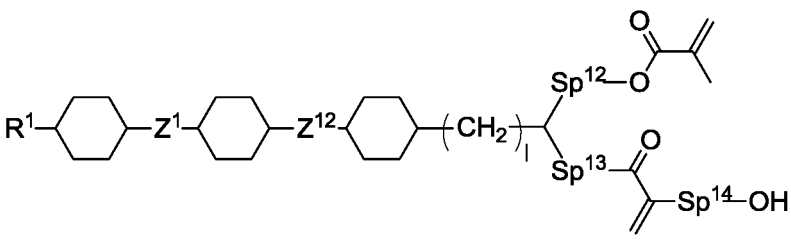
(1δ-4)



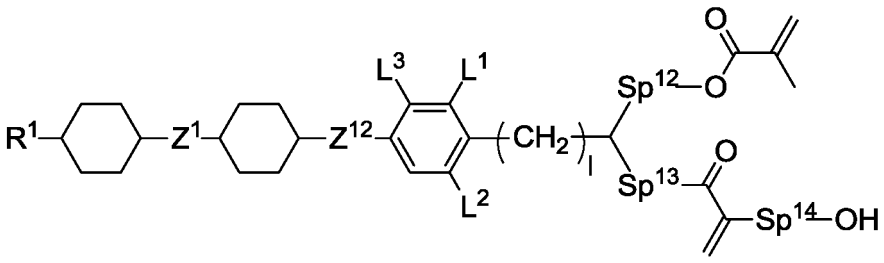
(1δ-5)



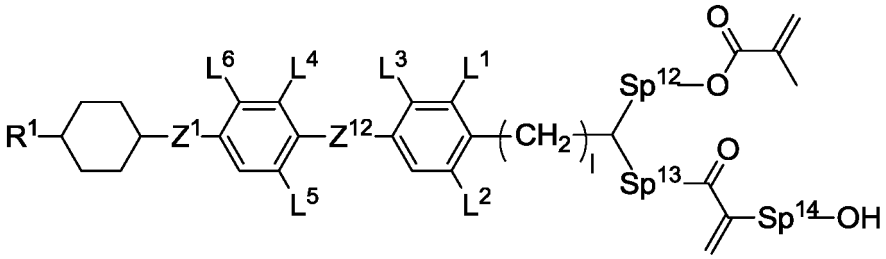
(1δ-6)



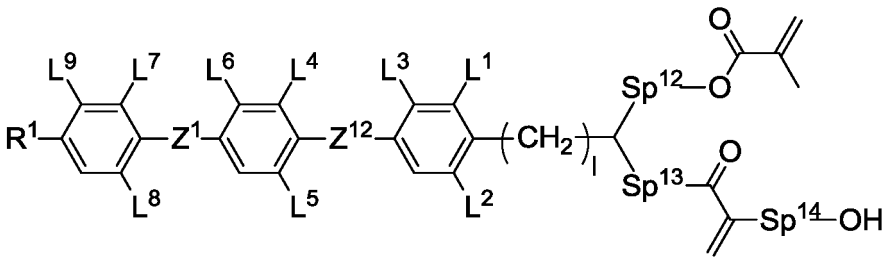
(1δ-7)



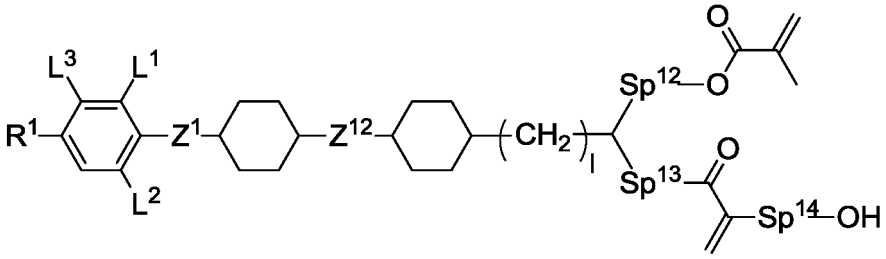
(1δ-8)



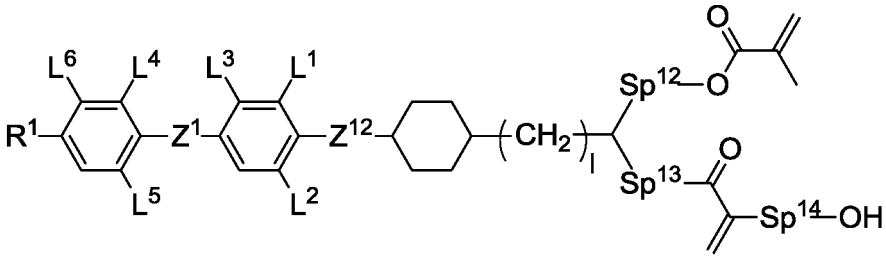
(1δ-9)



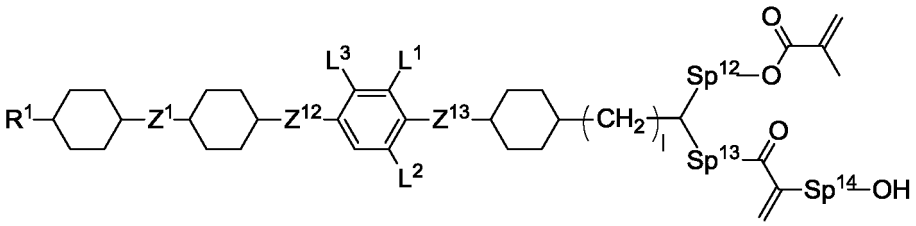
(1δ-10)



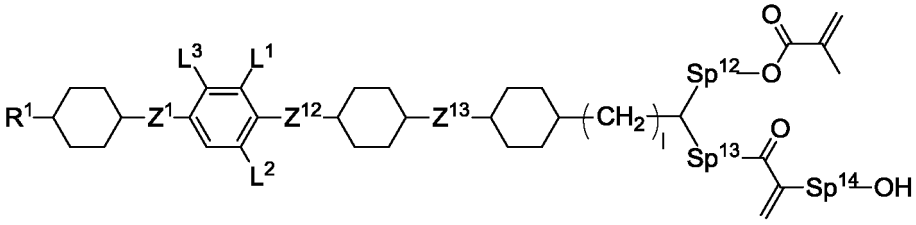
(1δ-11)



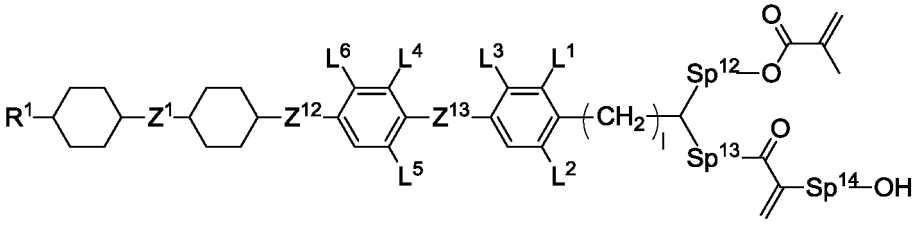
(1δ-12)



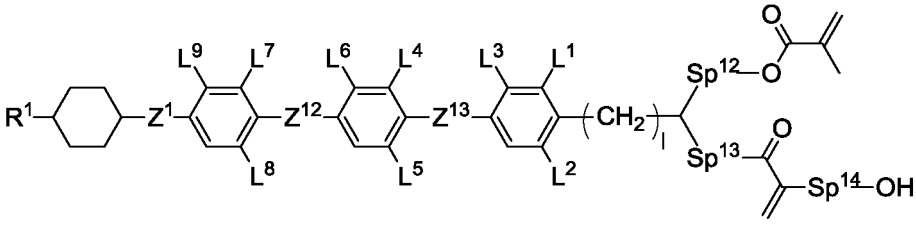
(1δ-13)



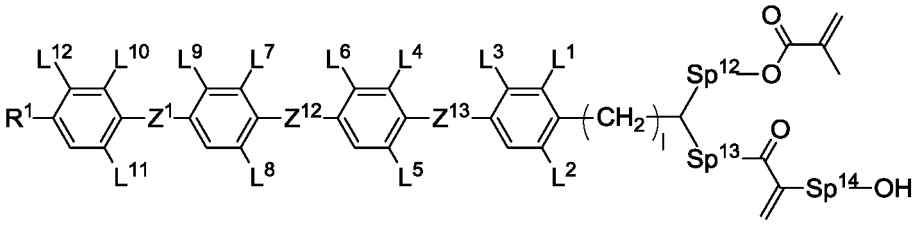
(1δ-14)



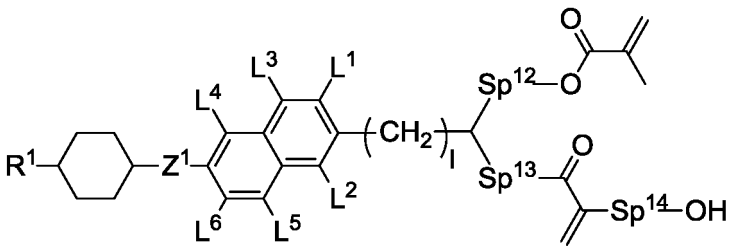
(1δ-15)



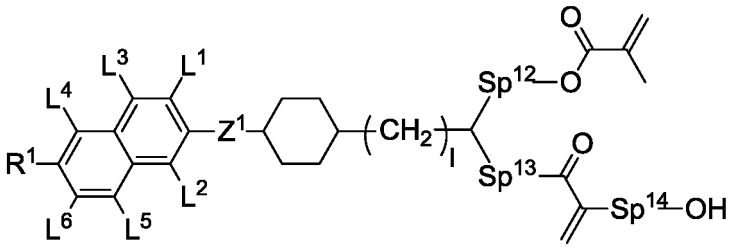
(1δ-16)



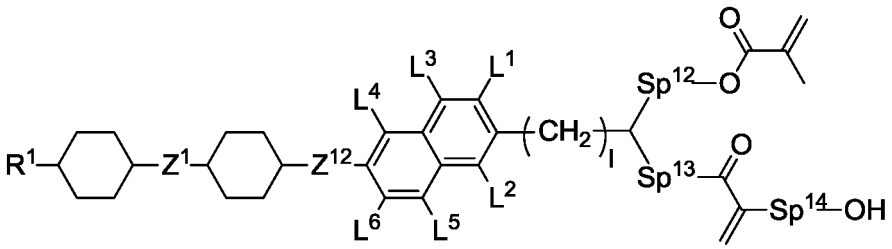
(1δ-17)



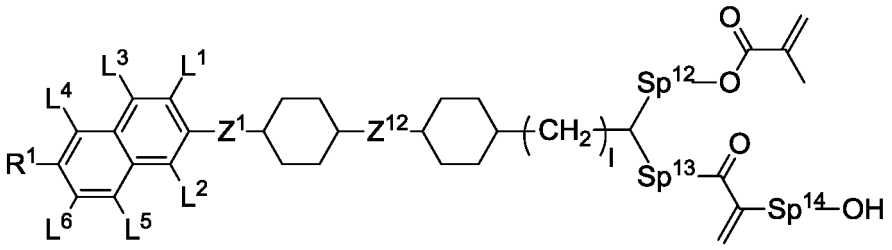
(1δ-18)



(1δ-19)



(1δ-20)



(1δ-21)

式（１δ－２）から式（１δ－２１）において、

Ｒ[1]は炭素数１から１０のアルキルあり；

Ｚ[1]、Ｚ[12]、およびＺ[13]は独立して、単結合、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、または－（ＣＨ$_2$）$_4$－であり；

Ｓｐ[12]、Ｓｐ[13]、およびＳｐ[14]は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、Ｌ[8]、Ｌ[9]、Ｌ[10]、Ｌ[11]、およびＬ[12]は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

ｌは、１、２、３、４、５、または６である。

【０１２６】

≪１１．化合物（１δ）の態様≫

化合物（１δ）は、極性基の作用で基板表面に吸着し、液晶分子の配向を制御する。所期の効果を得るには、化合物（１δ）は、液晶性化合物との高い相溶性を有することが必

須である。化合物（１δ）は、１，４－シクロヘキシレンや１，４－フェニレンのような六員環を有して棒状の分子構造を、また分子構造の片末端には分岐状の構造を有しており相溶性を向上できると考えられることから、この目的に最適である。化合物（１δ）は、重合によって重合体を与える。この重合体は液晶分子の配向を安定化するので、素子の応答時間を短縮し、そして画像の焼き付きを改善する。

【０１２７】

化合物（１δ）の好ましい形態を説明する。式（１δ－１）において、X^1は、極性基である。化合物（１δ－１）は、組成物に添加するので安定であることが好ましい。化合物（１δ）を組成物に添加したとき、この化合物が素子の電圧保持率を下げないことが好ましい。化合物（１δ－１）は、低い揮発性を有することが好ましい。好ましいモル質量は１３０ｇ／ｍｏｌ以上である。さらに好ましいモル質量は１５０ｇ／ｍｏｌから７００ｇ／ｍｏｌの範囲である。好ましい化合物（１δ）は、アクリロイルオキシ（－ＯＣＯ－ＣＨ＝CH_2）、メタクリロイルオキシ（－ＯＣＯ－（CH_3）Ｃ＝CH_2）のような重合性基を有する。

【０１２８】

式（１δ－１）において、X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^{15}、－$N(R^{15})_2$、または－Ｓｉ（R^{15}）$_3$で表される基であり、ここで、R^{15}は、水素または炭素数１から５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよい。液晶組成物への高い溶解度の観点から、X^1は－ＯＨまたは－NH_2であることが特に好ましい。－ＯＨは、高いアンカー力を有するので－Ｏ－、－ＣＯ－、または－ＣＯＯ－よりも好ましい。複数のヘテロ原子（窒素、酸素）を有する基は、特に好ましい。そのような極性基を有する化合物は、低い濃度であっても有効である。

【０１２９】

式（１δ－１）において、R^1は、炭素数１から１５のアルキルであり、このR^1において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

式（１δ－１）において、環A^1および環A^2は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、アントラセン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましい環A^1または環A^2は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、または３－エチル－１，４－フェニレンである。

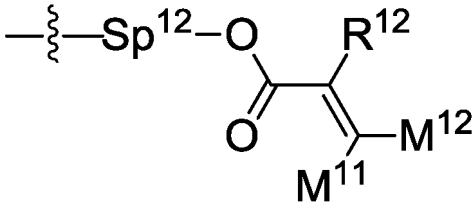
【０１３０】

式（１δ－１）において、Z^1は、単結合または炭素数１から６のアルキレンであり、このZ^1において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。好ましいZ^1は、単結合、－CH_2Ｃ

H_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、－ＣＯＯ－、または－ＯＣＯ－である。さらに好ましいZ^1は、単結合である。

【０１３１】

式（１δ－１）において、Sp^1は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このSp^1において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、式（１δａ）で表される基から選択された基で置き換えられていて；



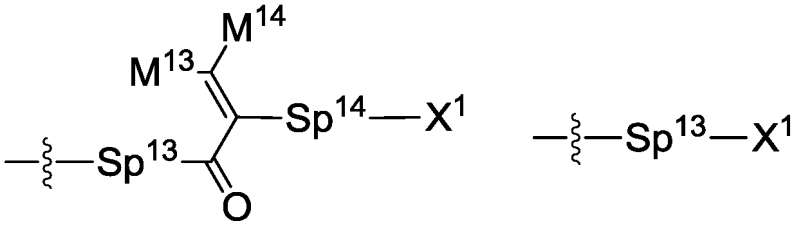
(1δa)

式（１δａ）において、Sp^{12}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このSp^{12}において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

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

式（１δａ）において、R^{12}は炭素数１から１５のアルキルであり、このR^{12}において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。好ましいSp^1は、単結合である。

式（１δ－１）において、P^{11}は、式（１δｅ）および式（１δｆ）で表される基から選択された基であり；



(1δe)

(1δf)

式（１δｅ）および（１δｆ）において、

Sp^{13}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このSp^{13}において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Sp^{14}は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このSp^{14}において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つ

の水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
M^{13}およびM^{14}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：
X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^{15}、－$N(R^{15})_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－$B(OH)_2$、または－$Si(R^{15})_3$であり；
－OR^{15}、－$N(R^{15})_2$、および－$Si(R^{15})_3$において、
R^{15}は水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このR^{15}において、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－CH_2CH_2－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【０１３２】
式（１δ－１）において、ａは、０、１、２、３、または４である。好ましいａは、０、１、または２である。

【０１３３】
式（１δ－２）から式（１δ－２１）において、
R^1は炭素数１から１０のアルキルであり；
Z^1、Z^{12}、およびZ^{13}は独立して、単結合、－CH_2CH_2－、または－$(CH_2)_4$－であり；　Sp^{12}、Sp^{13}、およびSp^{14}は独立して、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；
L^1、L^2、L^3、L^4、L^5、L^6、L^7、L^8、L^9、L^{10}、L^{11}、およびL^{12}は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルである。

【０１３４】
好ましい化合物（１δ）は、項６２に記載の化合物（１δ－２）から化合物（１δ－２１）である。これらの化合物において、配向性モノマーの少なくとも１つが、化合物（１δ－２）、化合物（１δ－３）、化合物（１δ－４）、化合物（１δ－１１）、化合物（１δ－１９）または化合物（１δ－２１）であることが好ましい。配向性モノマーの少なくとも２つが、化合物（１δ－２）および化合物（１δ－３）、または化合物（１δ－３）および化合物（１δ－４）の組み合わせであることが好ましい。

【０１３５】
≪１２．化合物（１δ）の合成≫
化合物（１δ）の合成法は、実施例の項に記載する。

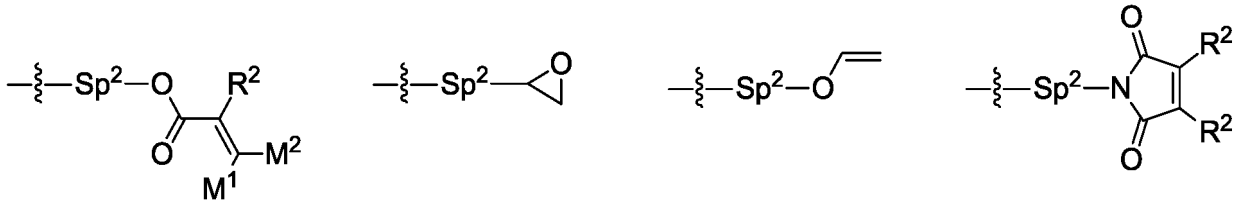
【０１３６】
≪１３．化合物（１ε）の例示≫
下記項に、化合物（１ε）を例示する。

【０１３７】
項８１．式（１ε）で表される化合物。

$$R^1\text{-}MES\text{-}Sp^1\text{-}P^1 \qquad (1\varepsilon)$$

式（１ε）において、
R^1は炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
ＭＥＳは少なくとも１つの環を有するメソゲン基であり；
Sp^1は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水

素は、式（１εａ）、式（１εｂ）、式（１εｃ）、および式（１εｄ）で表される基から選択された基で置き換えられていて；



(1εa) (1εb) (1εc) (1εd)

式（１εａ）、式（１εｂ）、式（１εｃ）、および式（１εｄ）において、

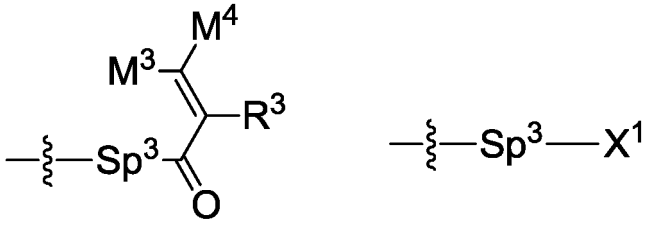
Ｓｐ^{2}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

Ｒ^{2}は水素、または炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく：

式（１ε）において、

Ｐ^{1}は、式（１εｅ）および式（１εｆ）で表される基から選択された基であり；



(1εe) (1εf)

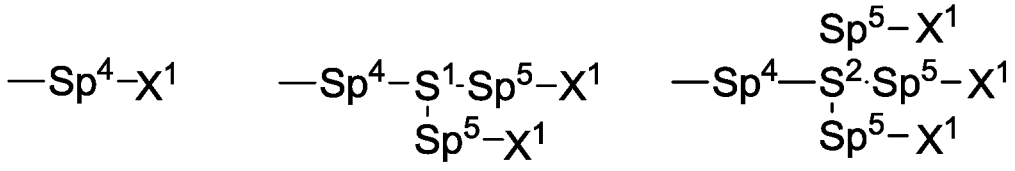
式（１εｅ）および（１εｆ）において、

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

Ｍ^{3}およびＭ^{4}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、－ＯＲ^{5}、－Ｎ（Ｒ^{5}）$_{2}$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_{2}$、または－Ｓｉ（Ｒ^{5}）$_{3}$であり；

Ｒ^{3}は、式（１εｇ）、式（１εｈ）、および式（１εｉ）で表される基から選択された基であり；

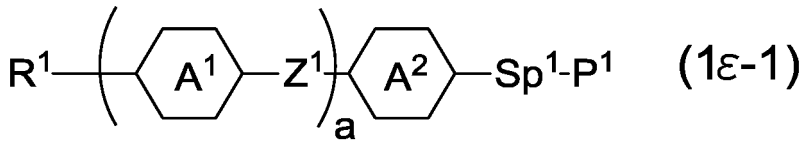


(1εg) (1εh) (1εi)

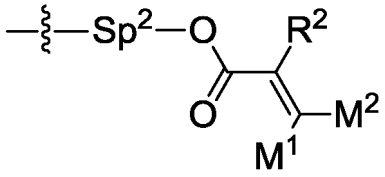
式（１εｇ）、式（１εｈ）、および式（１εｉ）において、
Sp^4およびSp^5は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；
S^1は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；
S^2は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜であり；
X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^5、－N（R^5）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－Ｂ（ＯＨ）$_2$、または－Ｓｉ（R^5）$_3$であり；
－OR^5、－N（R^5）$_2$、および－N（R^5）$_2$において、
R^5は水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【０１３８】

項８２．　式（１ε－１）で表される、項８１に記載の化合物。



式（１ε－１）において、
R^1は炭素数１から１２のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；
環A^1および環A^2は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、アントラセン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；
ａは、０、１、２、３、または４であり；
Z^1は単結合または炭素数１から６のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；
Sp^1は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、式（１εａ）で表される重合性基で置き換えられていて；



(1εa)

式（１εａ）において、

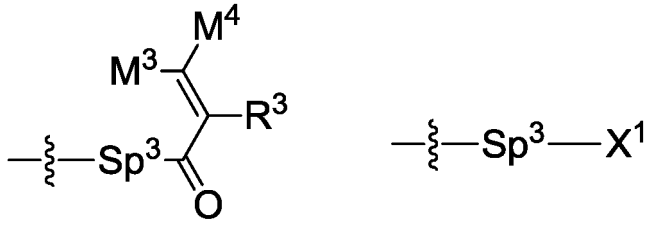
Ｓｐ^{2}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、フッ素、塩素、または炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり；

Ｒ^{2}は水素または炭素数１から１５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

式（１ε－１）において、

Ｐ^{1}は、式（１εｅ）および（１εｆ）で表される基から選択された基であり；



(1εe)

(1εf)

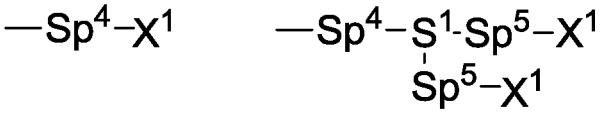
式（１εｅ）および（１εｆ）において、

Ｓｐ^{3}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；

Ｍ^{3}およびＭ^{4}は独立して、水素、フッ素、塩素、または炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素または塩素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

Ｘ^{1}は、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、－ＯＲ^{5}、－Ｎ（Ｒ^{5}）$_{2}$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、または－Ｓｉ（Ｒ^{5}）$_{3}$であり；

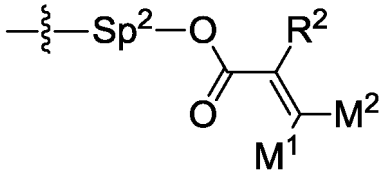
Ｒ^{3}は、式（１εｇ）および式（１εｈ）で表される基から選択された基であり；



(1εg)

(1εh)

式（１εｇ）および式（１εｈ）において、
　Sp^4およびSp^5は独立して、単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよく；
　S^1は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり；
　X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^5、－N（R^5）$_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、または－Ｓｉ（R^5）$_3$であり；
－OR^5、－N（R^5）$_2$、および－Ｓｉ（R^5）$_3$において、
　R^5は水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。
【０１３９】
項８３．式（１ε－１）において、
　Z^1が、単結合、－（CH_2）$_2$－、－（CH_2）$_4$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、または－ＣＦ＝ＣＦ－であり；
式（１εａ）において、
　M^1およびM^2が独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：
式（１εｅ）において、
　M^3およびM^4が独立して、水素、フッ素、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がフッ素で置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：
　R^3が式（１εｇ）で表される基である、項８２に記載の化合物。
【０１４０】
項８４．式（１ε－１）において、
　環A^1および環A^2が独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、炭素数１から９のアルコキシ、または炭素数２から９のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；
　Sp^1が単結合または炭素数１から８のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、式（１εａ）で表される基で置き換えられ；



(1εa)

式（１εａ）において、

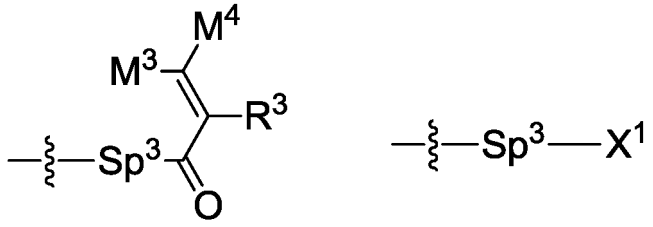
Ｓｐ^{2}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＮＨ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Ｍ^{1}およびＭ^{2}が独立して、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルであり；

Ｒ^{2}が水素または炭素数１から８のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく：

式（１ε－１）において、

Ｐ^{1}が、式（１εｅ）および（１εｆ）で表される基から選択された基であり；



(1εe)

(1εf)

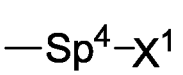
式（１εｅ）および（１εｆ）において、

Ｓｐ^{3}が、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

Ｍ^{3}およびＭ^{4}が独立して、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルであり；

Ｘ^{1}が、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、または－Ｎ（Ｒ^{5}）$_{2}$であり；

Ｒ^{3}が式（１εｇ）で表される基であり；



(1εg)

式（１εｇ）において、

Ｓｐ^{4}が単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝Ｃ

Ｈ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

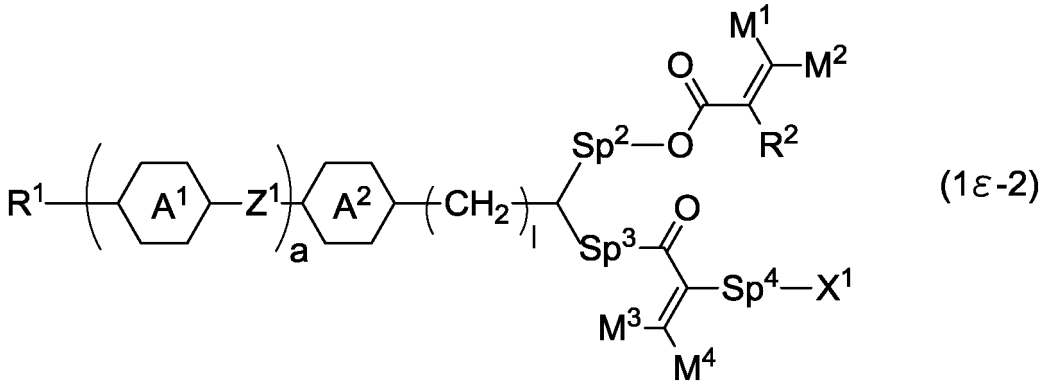
Ｘ^{1}が、－ＯＨ、－ＮＨ$_{2}$、または－Ｎ（Ｒ^{5}）$_{2}$であり；

－Ｎ（Ｒ^{5}）$_{2}$において、

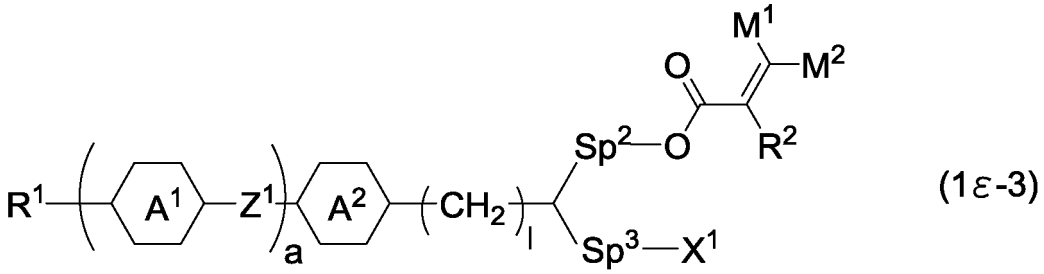
Ｒ^{5}は水素または炭素数１から５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよい、項８２または８３に記載の化合物。

【０１４１】

項８５．　式（１ε－２）または式（１ε－３）で表される、項８１に記載の化合物。



(1ε-2)



(1ε-3)

式（１ε－２）および式（１ε－３）において、

Ｒ^{1}は炭素数１から１２のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

環Ａ^{1}および環Ａ^{2}は独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、フルオレン－２，７－ジイル、フェナントレン－２，７－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、炭素数１から８のアルキル、炭素数２から８のアルケニル、炭素数１から７のアルコキシ、または炭素数２から７のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

ａは、０、１、２、３、または４であり；

ｌは、１、２、３、４、５、または６であり、このアルキレンの少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

Sp^2は単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

M^1およびM^2は独立して、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルであり；

R^2は水素または炭素数１から５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく：

Sp^3は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、または－ＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

M^3およびM^4は独立して、水素、フッ素、メチル、エチル、またはトリフルオロメチルであり；

Sp^4は、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、または－ＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素で置き換えられてもよく；

X^1は、－ＯＨまたは－Ｎ（R^5）$_2$であり；

－Ｎ（R^5）$_2$において、

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

【０１４２】

項８６．　式（１ε－２）および式（１ε－３）において、

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

環A^1および環A^2が独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、または炭素数１から５のアルキルで置き換えられてもよく；

ａが、０、１、２、３、または４であり；

Z^1が、単結合、－（CH_2）$_2$－、－（CH_2）$_4$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－CF_2O－、－OCF_2－、－CH_2O－、または－OCH_2－であり；

Sp^2が単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく；

M^1およびM^2が独立して、水素、メチル、またはエチルであり；

R^2が水素または炭素数１から５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、または－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、または－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく：

Sp^3が単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく；

M^3およびM^4が独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

Sp^4が、単結合または炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく；

X^1は、－ＯＨまたは－Ｎ（R^5）$_2$であり；

－Ｎ（R^5）$_2$において、

R^5が水素または炭素数１から３のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよい、項８５に記載の化合物。

【０１４３】

項８７．　式（１ε－２）および式（１ε－３）において、

R^1が、炭素数１から１０のアルキル、炭素数２から１０のアルケニル、または炭素数１から９のアルコキシであり；

環A^1および環A^2が独立して、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、またはナフタレン－２，６－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素はフッ素、または炭素数１から５のアルキルで置き換えられてもよく；

ａが、０、１、２、または３であり；

Z^1が、単結合、－（CH_2）$_2$－、または－（CH_2）$_4$－であり；

Sp^2が単結合または炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

M^1およびM^2が独立して、水素、またはメチルであり；

R^2が水素または炭素数１から５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、または－Ｏ－で置き換えられてもよく：

Sp^3が単結合または炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

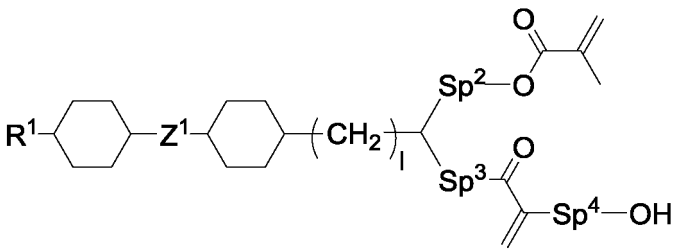
M^3およびM^4が独立して、水素、またはメチルであり；

Sp^4が単結合または炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

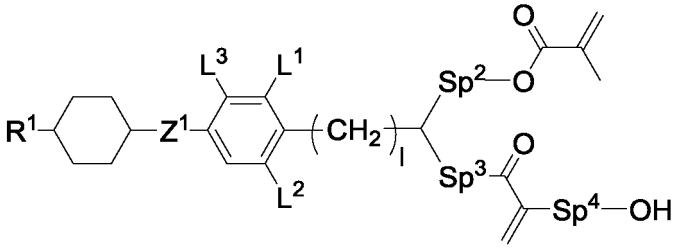
X^1が－ＯＨである、項８５に記載の化合物。

【０１４４】

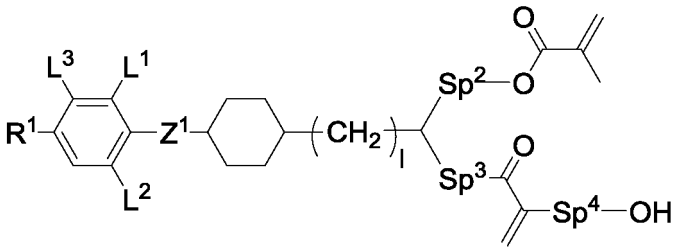
項８８．　式（１ε－４）から式（１ε－４１）のいずれか１つで表される、項８１に記載の化合物。



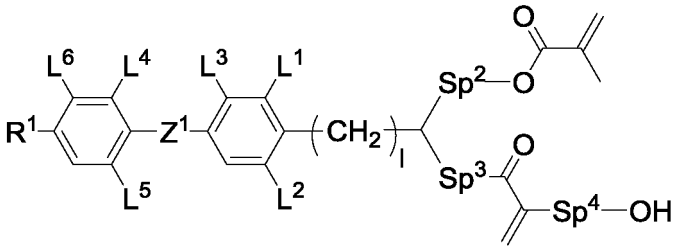
(1ε-4)



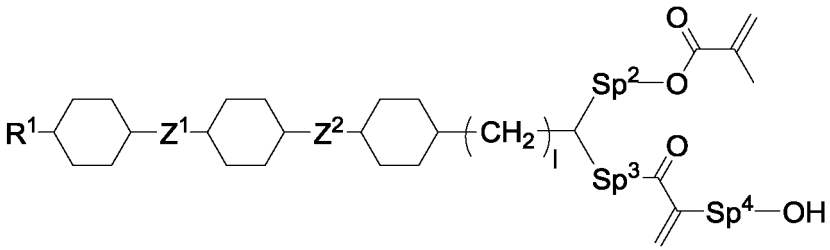
(1ε-5)



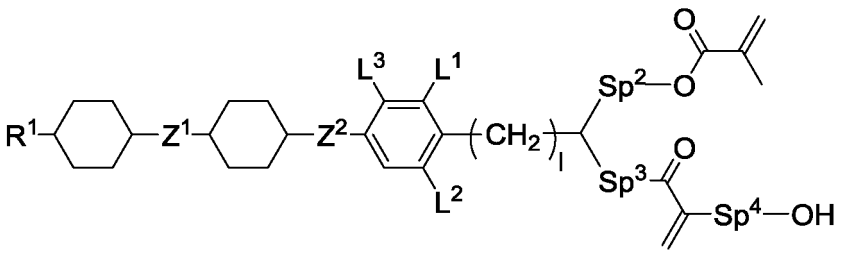
(1ε-6)



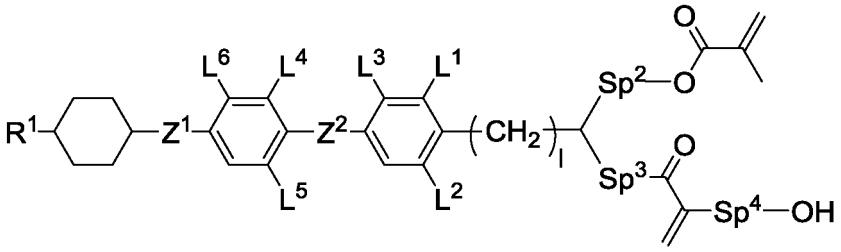
(1ε-7)



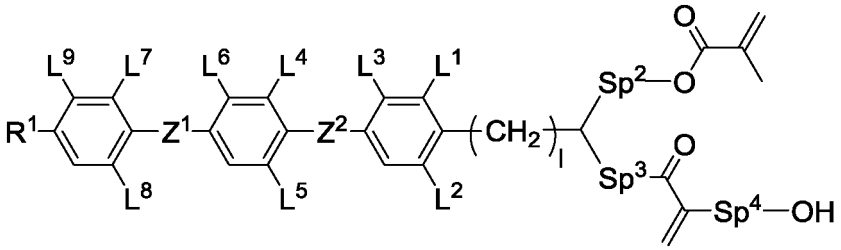
(1ε-8)



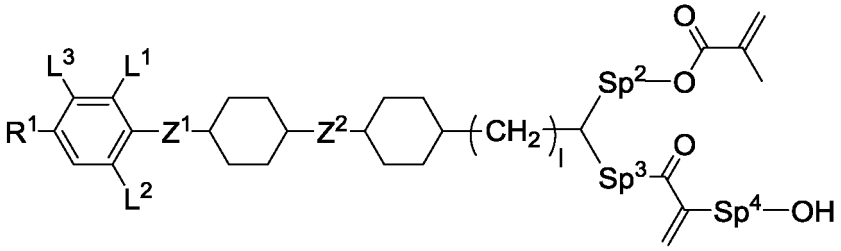
(1ε-9)



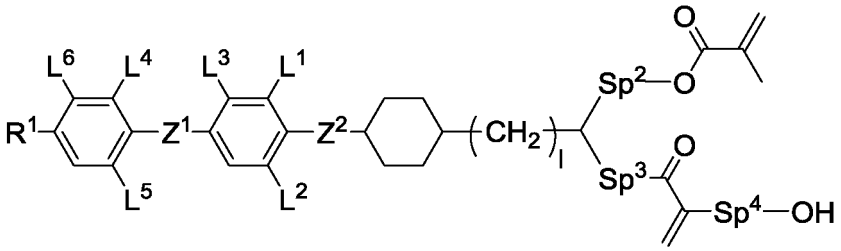
(1ε-10)



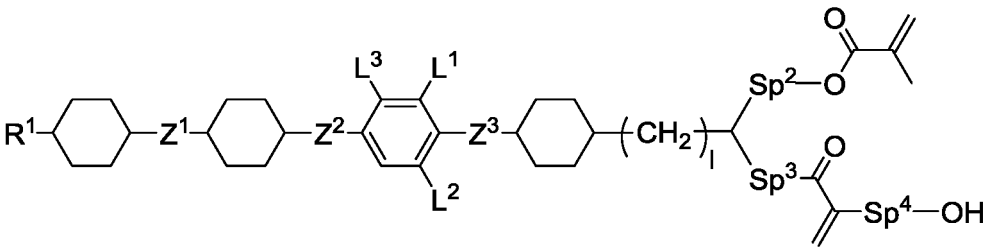
(1ε-11)



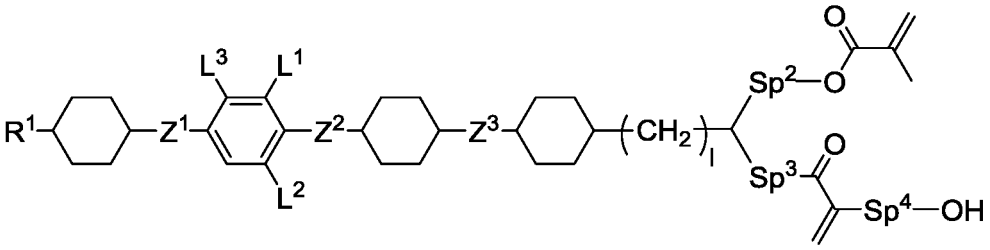
(1ε-12)



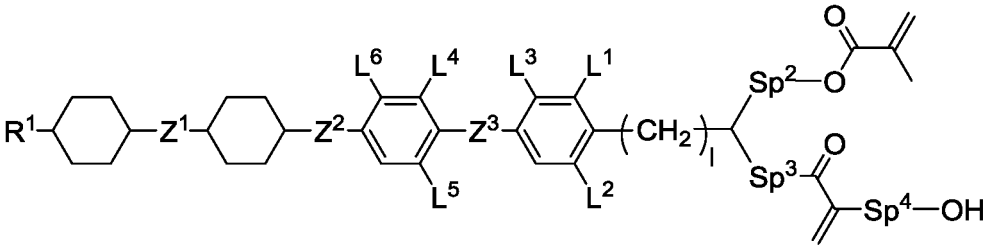
(1ε-13)



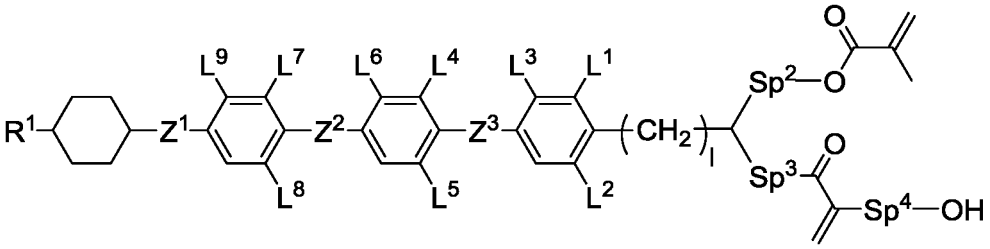
(1ε-14)



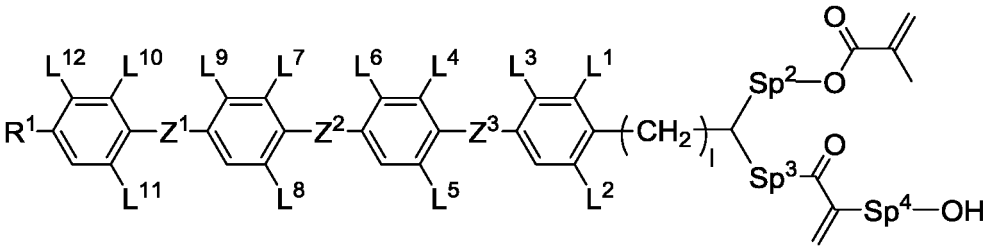
(1ε-15)



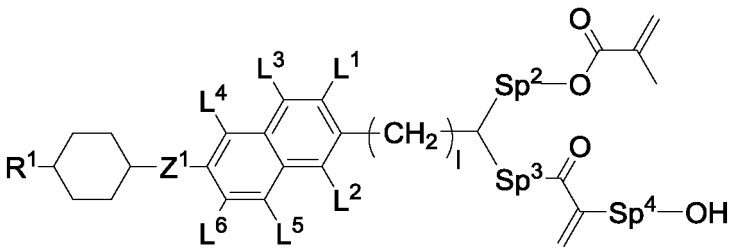
(1ε-16)



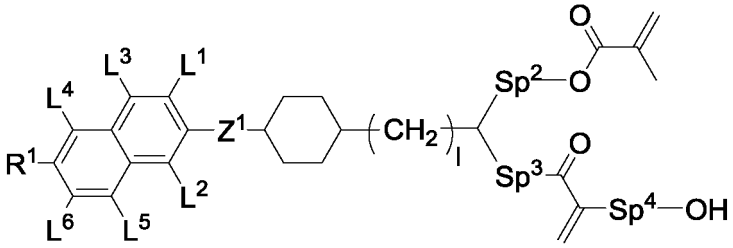
(1ε-17)



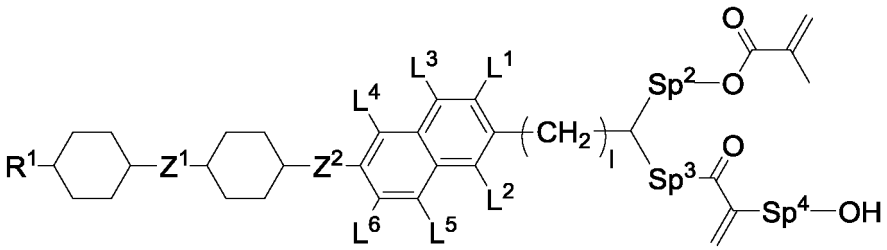
(1ε-18)



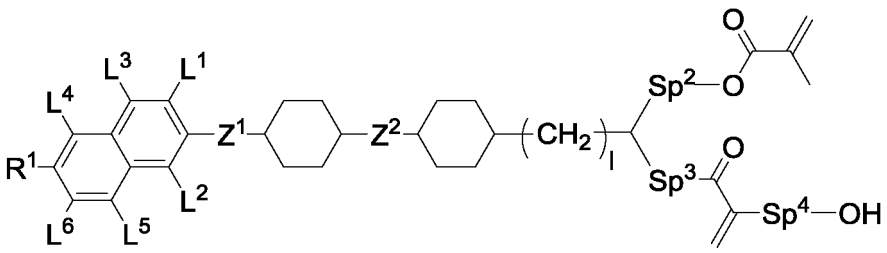
(1ε-19)



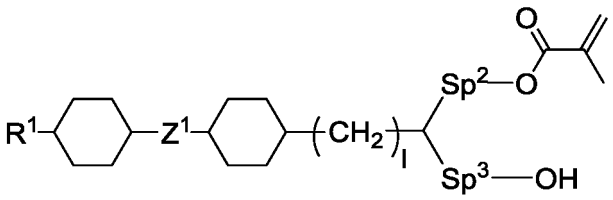
(1ε-20)



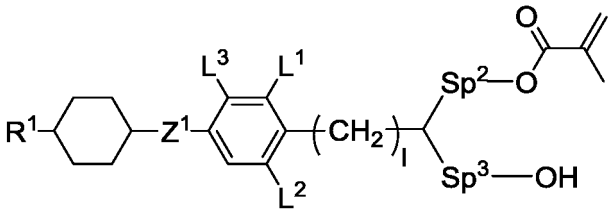
(1ε-21)



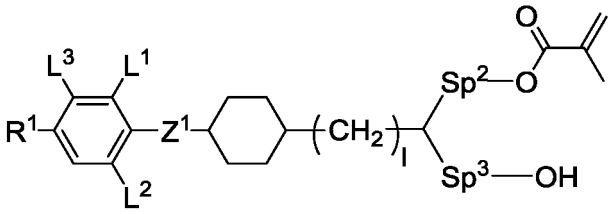
(1ε-22)



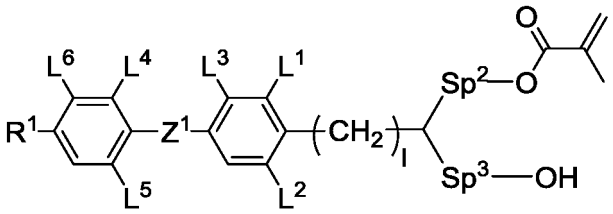
(1ε-23)



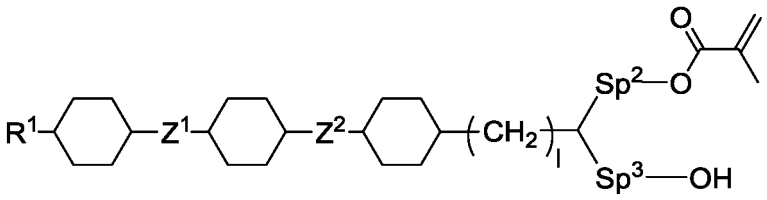
(1ε-24)



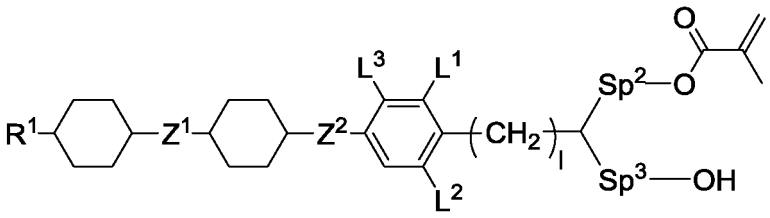
(1ε-25)



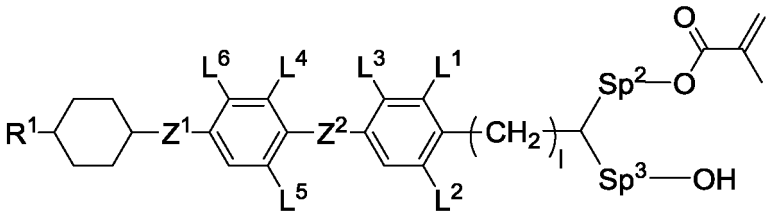
(1ε-26)



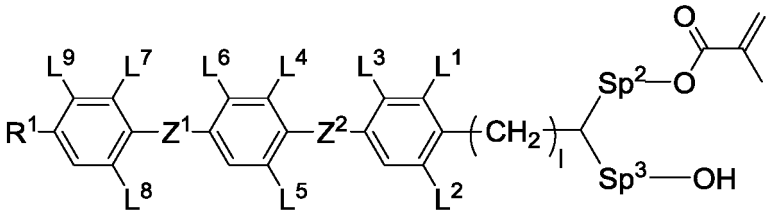
(1ε-27)



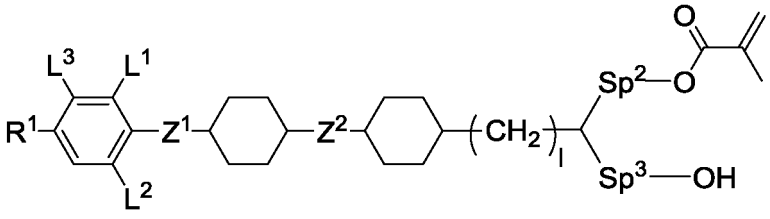
(1ε-28)



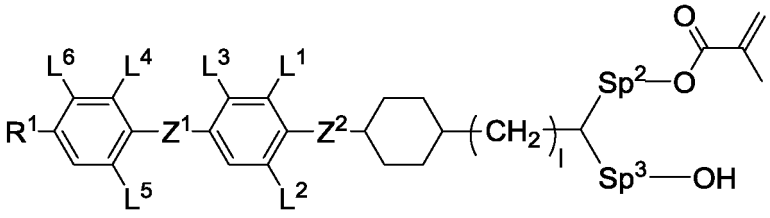
(1ε-29)



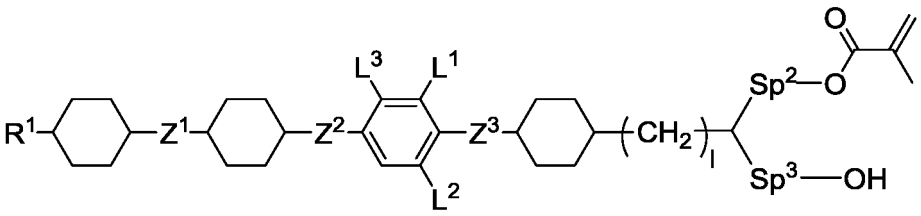
(1ε-30)



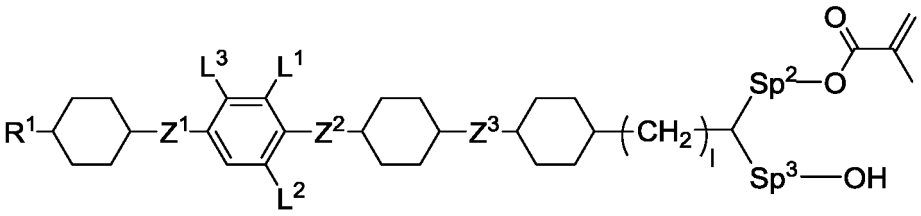
(1ε-31)



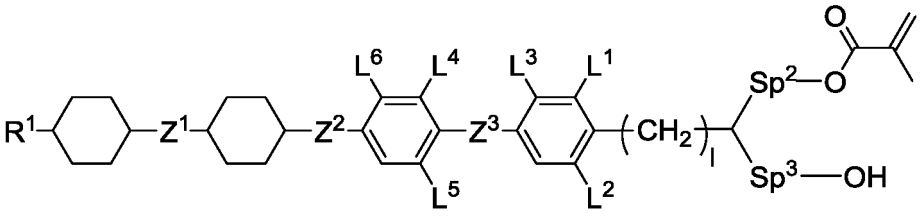
(1ε-32)



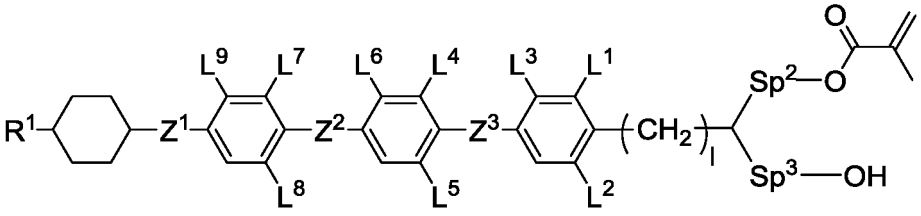
(1ε-33)



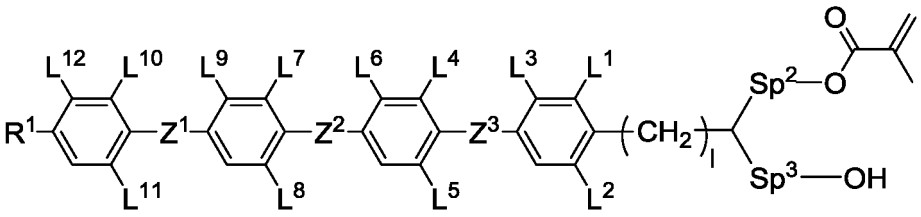
(1ε-34)



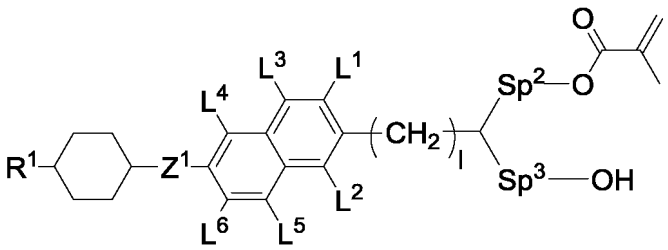
(1ε-35)



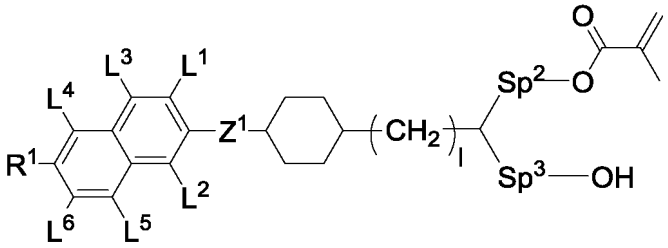
(1ε-36)



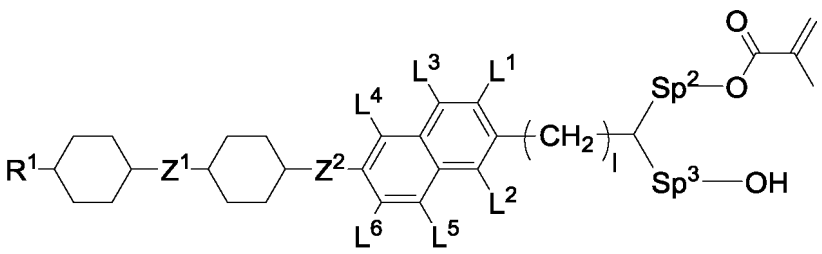
(1ε-37)



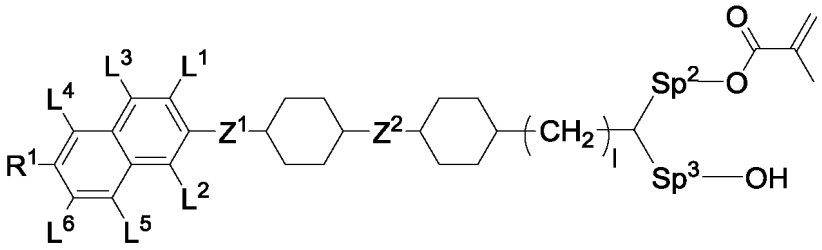
(1ε-38)



(1ε-39)



(1ε-40)



(1ε-41)

式（１ε－４）から式（１ε－４１）において、

Ｒ[1]は炭素数１から１０のアルキルあり；

Ｚ[1]、Ｚ[2]、およびＺ[3]は独立して、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、または－（ＣＨ$_2$）$_4$－であり；

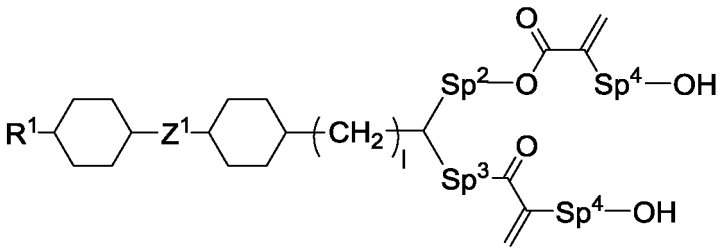
Ｓｐ[2]、Ｓｐ[3]、およびＳｐ[4]は独立して、炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、Ｌ[8]、Ｌ[9]、Ｌ[10]、Ｌ[11]、およびＬ[12]は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

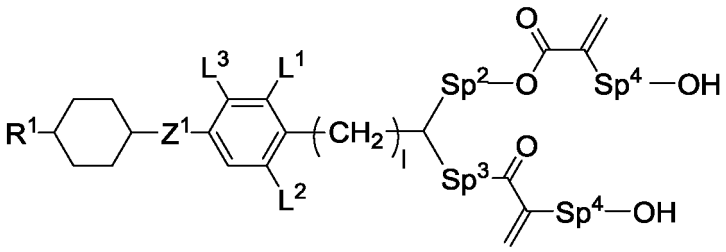
ｌは、１、２、３、４、５、または６である。

【０１４５】

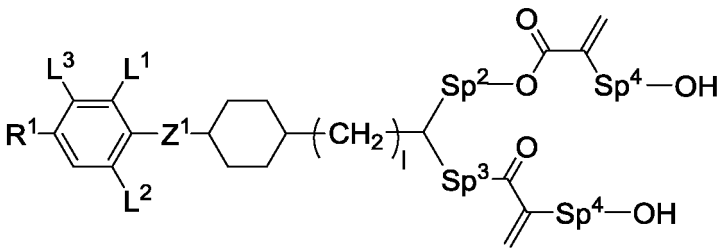
項８９．　式（１ε－４２）から式（１ε－６０）のいずれか１つで表される、項８１に記載の化合物。



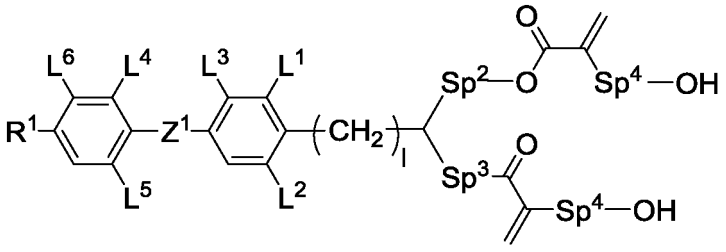
(1ε-42)



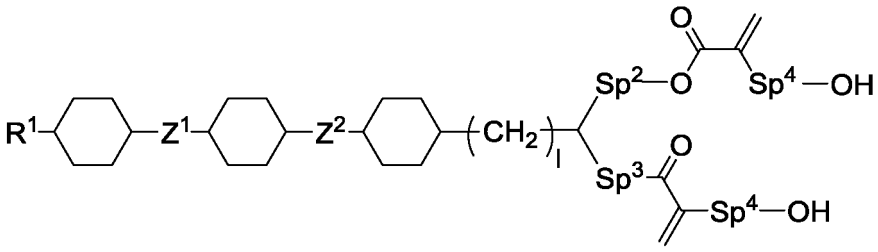
(1ε-43)



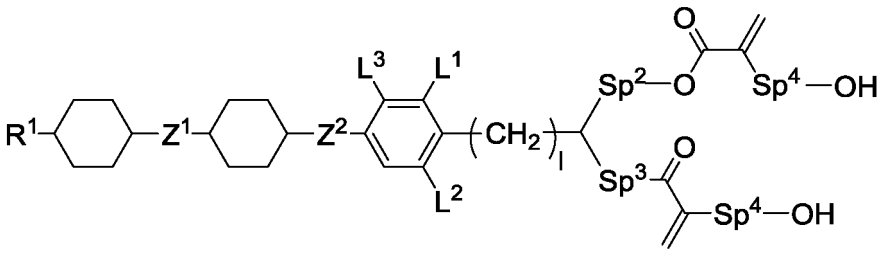
(1ε-44)



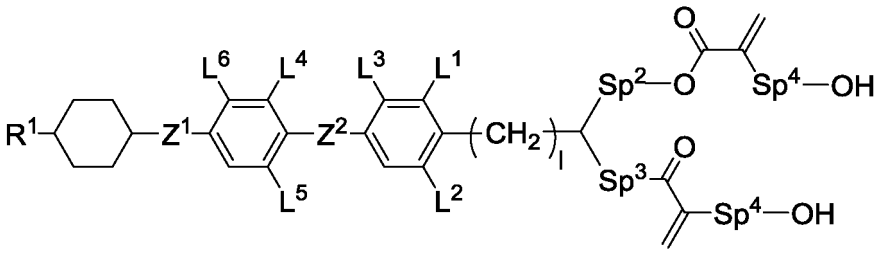
(1ε-45)



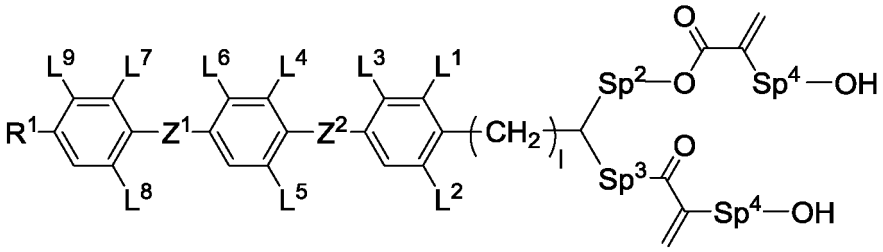
(1ε-46)



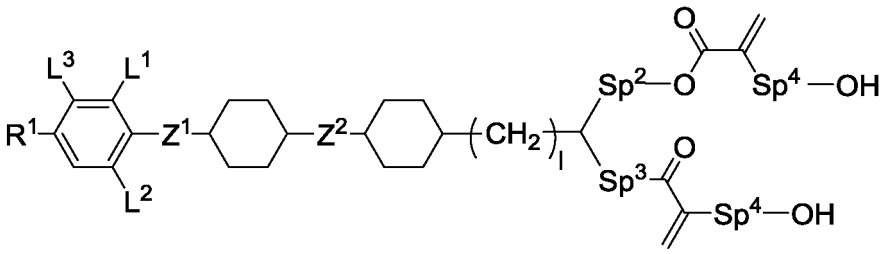
(1ε-47)



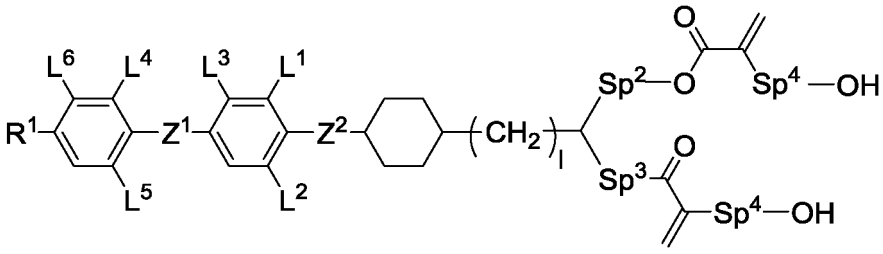
(1ε-48)



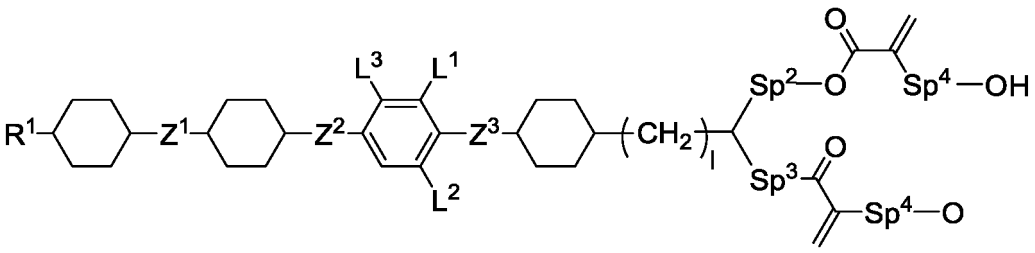
(1ε-49)



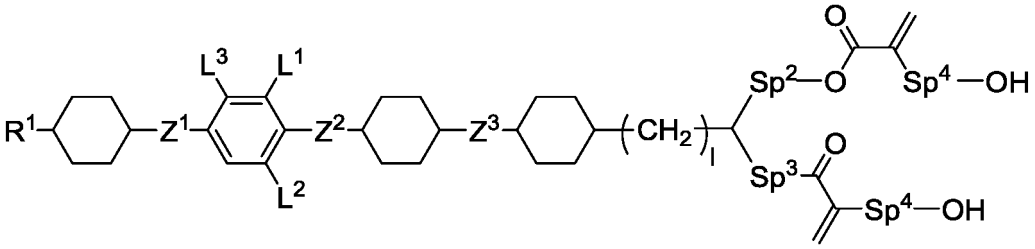
(1ε-50)



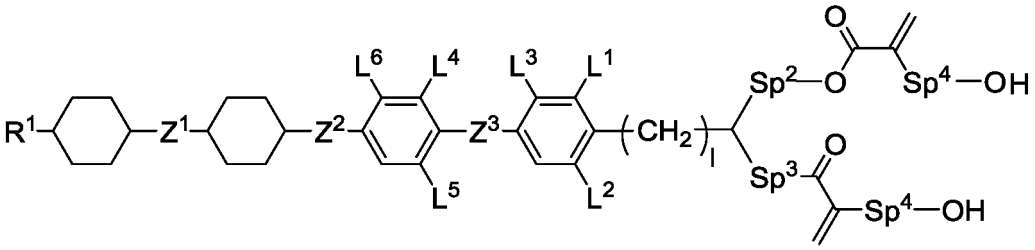
(1ε-51)



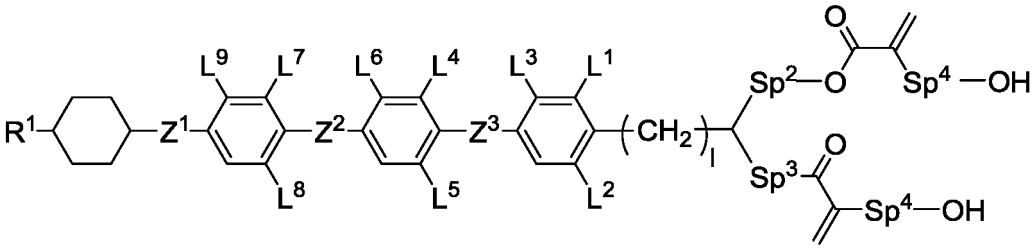
(1ε-52)



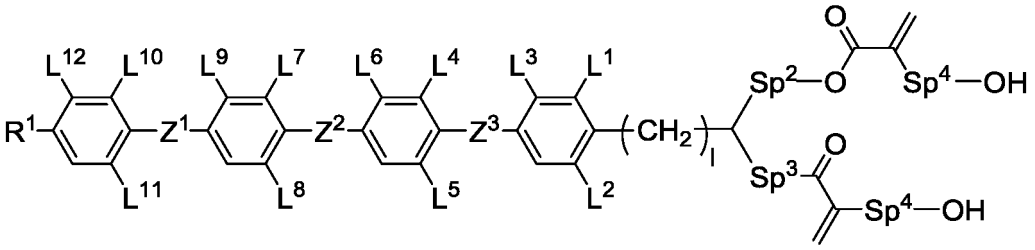
(1ε-53)



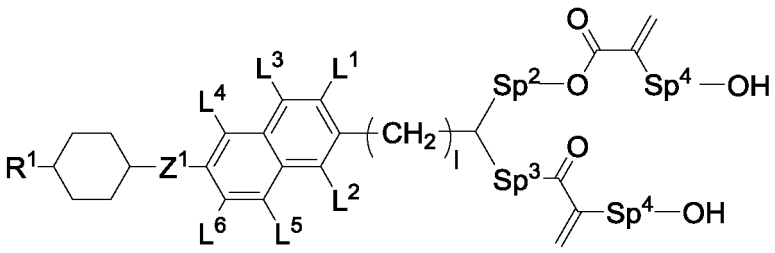
(1ε-54)



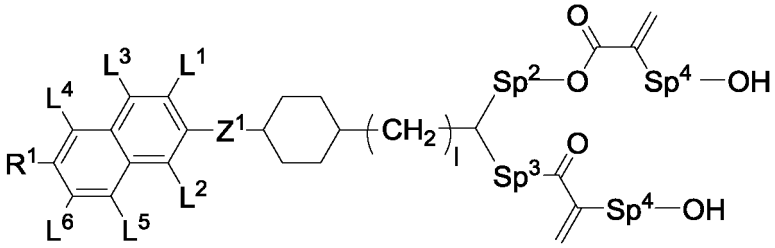
(1ε-55)



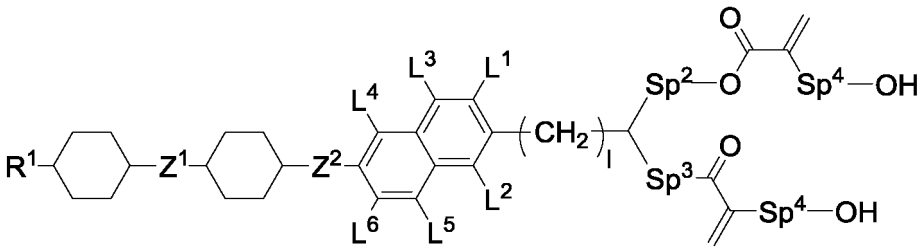
(1ε-56)



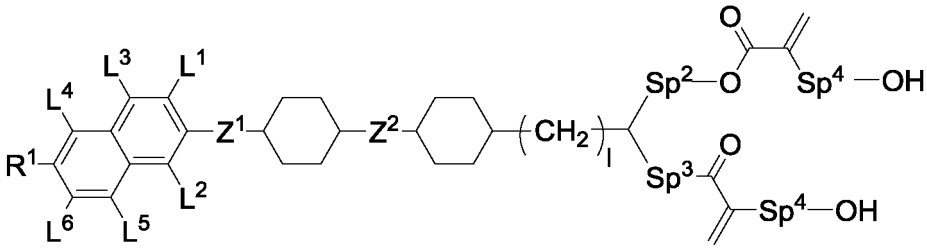
(1ε-57)



(1ε-58)



(1ε-59)



(1ε-60)

式（１ε－４２）から式（１ε－６０）において、

Ｒ[1]は炭素数１から１０のアルキルあり；

Ｚ[1]、Ｚ[2]、およびＺ[3]は独立して、単結合、－（ＣＨ$_2$）$_2$－、または－（ＣＨ$_2$）$_4$－であり；

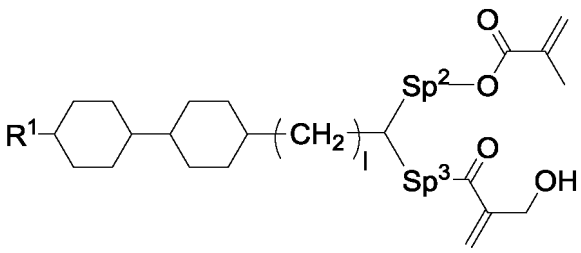
Ｓｐ[2]、Ｓｐ[3]、およびＳｐ[4]は独立して、炭素数１から５のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、Ｌ[8]、Ｌ[9]、Ｌ[10]、Ｌ[11]、およびＬ[12]は独立して、水素、フッ素、メチル、またはエチルであり；

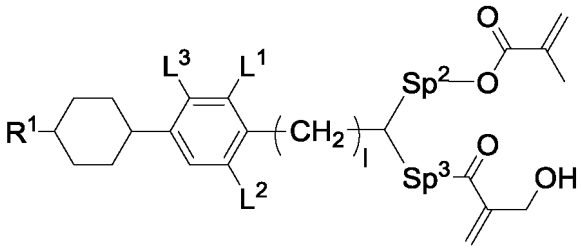
ｌは、１、２、３、４、５、または６である。

【０１４６】

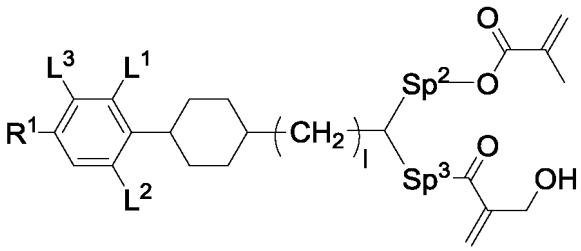
項９０．　式（１ε－６１）から式（１ε－９８）のいずれか１つで表される、項８１に記載の化合物。



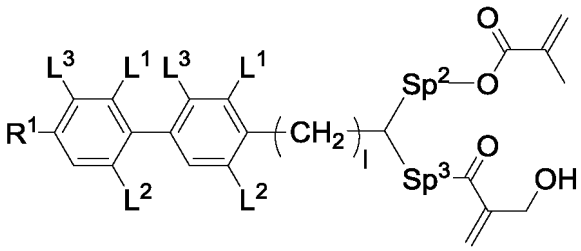
(1ε-61)



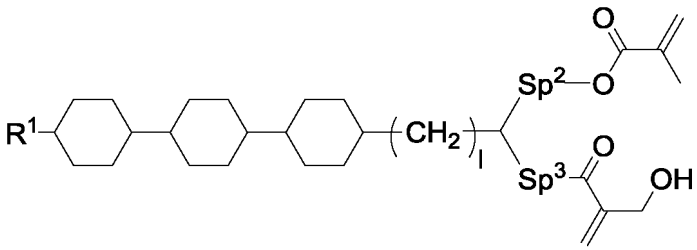
(1ε-62)



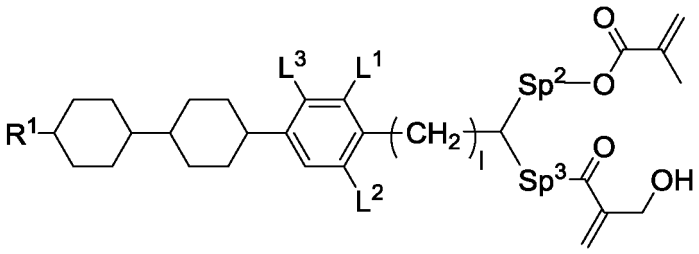
(1ε-63)



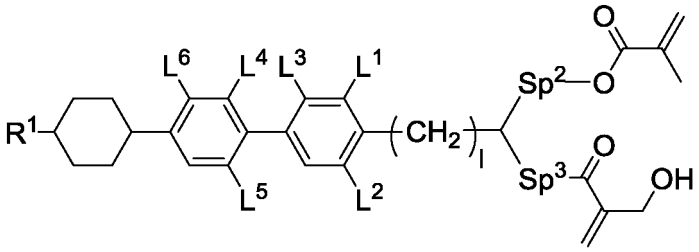
(1ε-64)



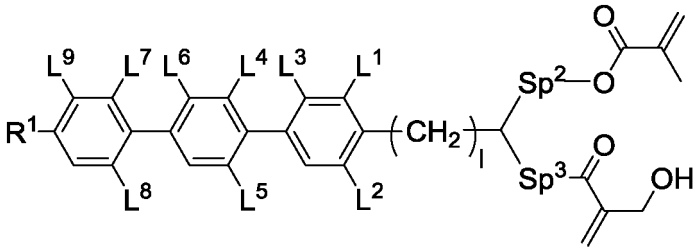
(1ε-65)



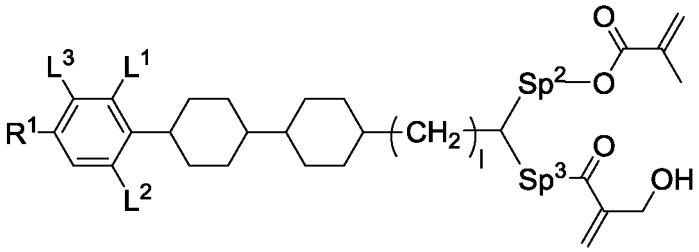
(1ε-66)



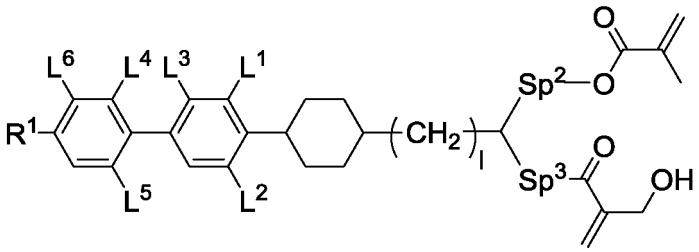
(1ε-67)



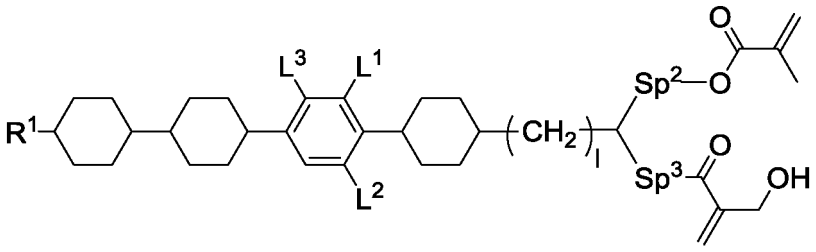
(1ε-68)



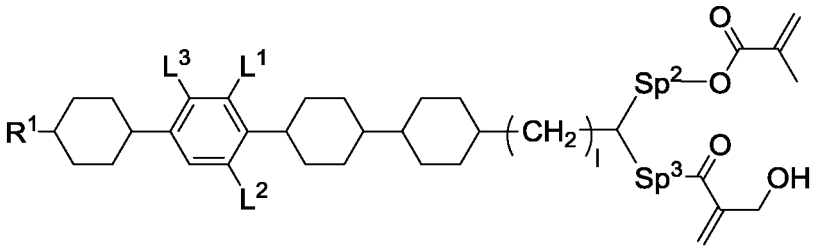
(1ε-69)



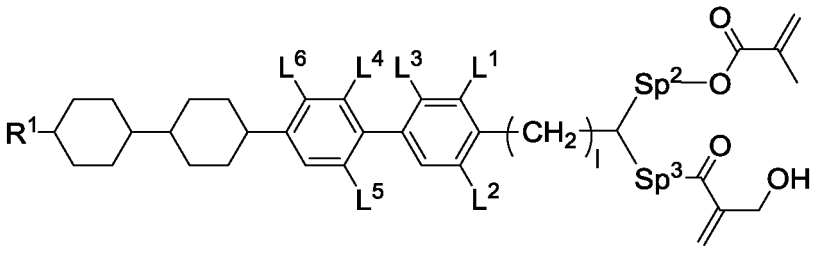
(1ε-70)



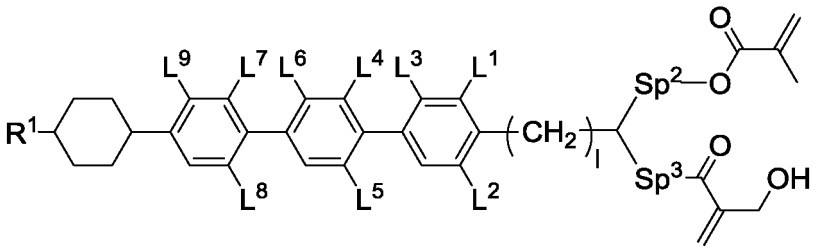
(1ε-71)



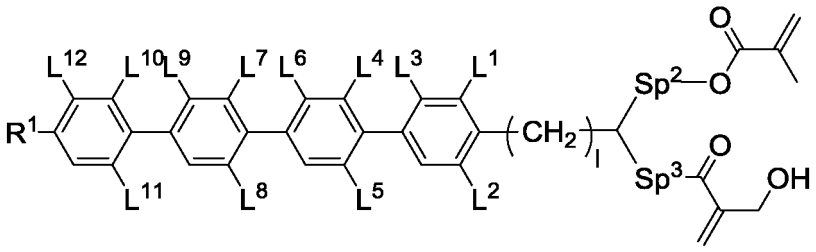
(1ε-72)



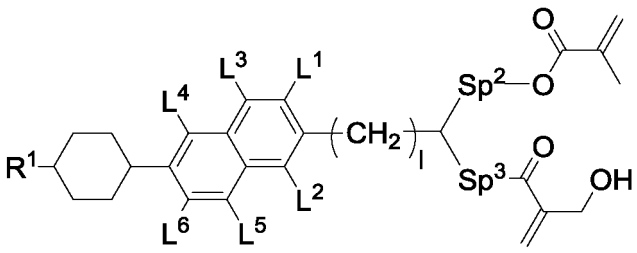
(1ε-73)



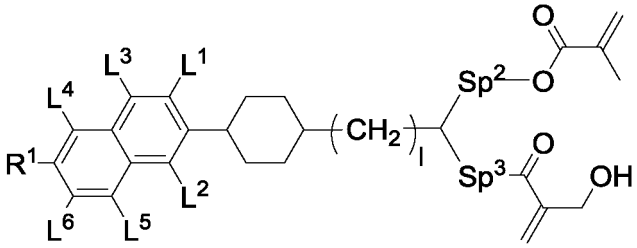
(1ε-74)



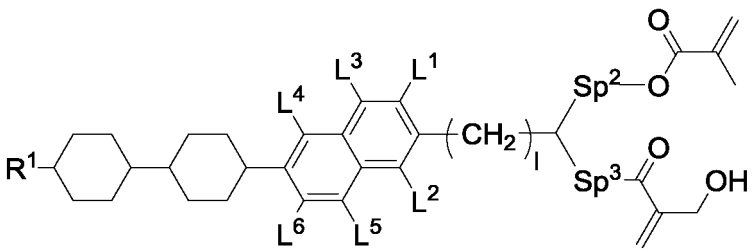
(1ε-75)



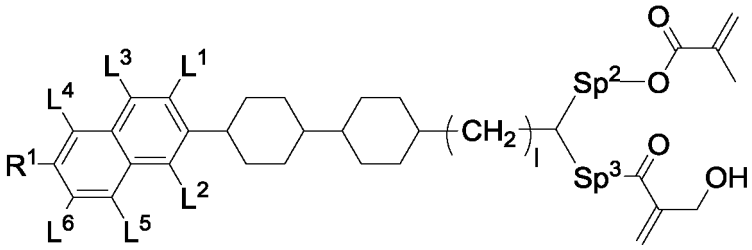
(1ε-76)



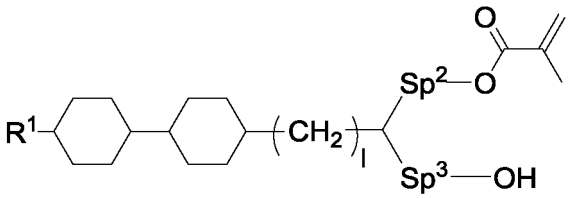
(1ε-77)



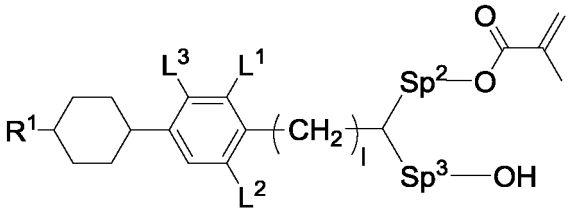
(1ε-78)



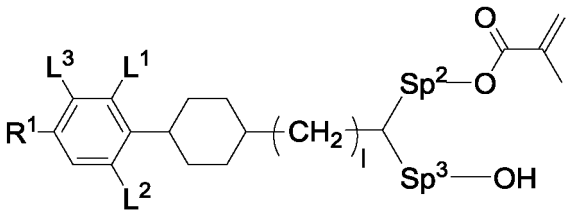
(1ε-79)



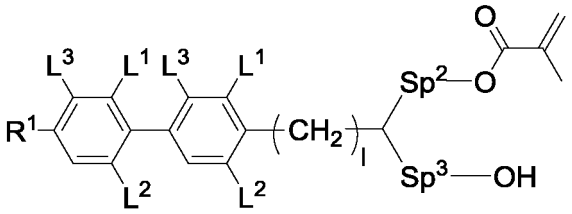
(1ε-80)



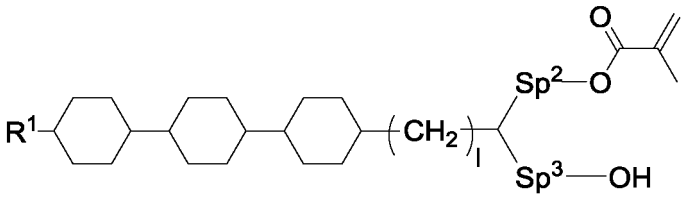
(1ε-81)



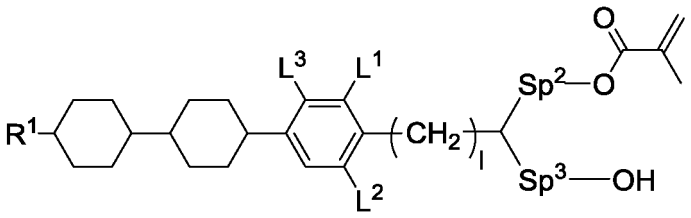
(1ε-82)



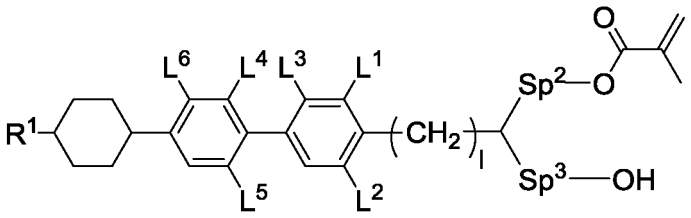
(1ε-83)



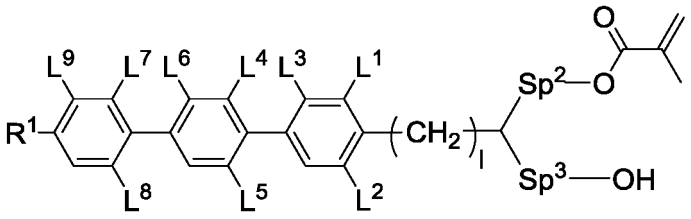
(1ε-84)



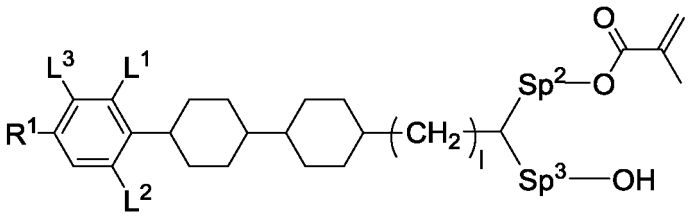
(1ε-85)



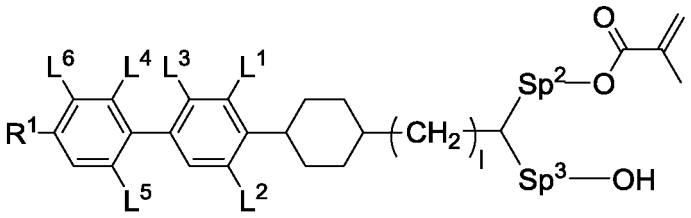
(1ε-86)



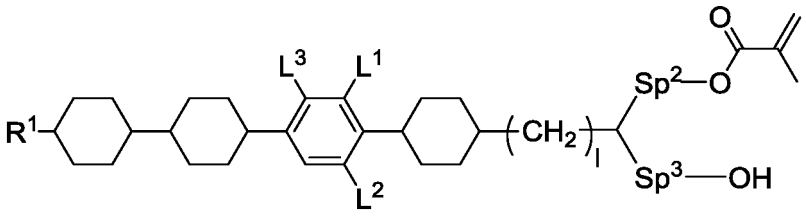
(1ε-87)



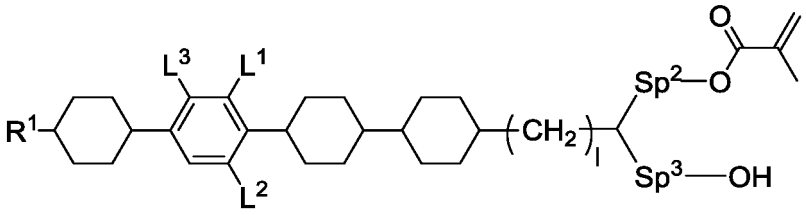
(1ε-88)



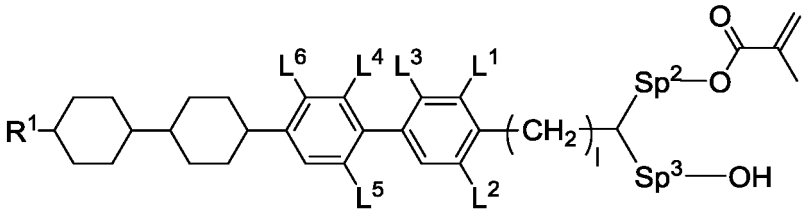
(1ε-89)



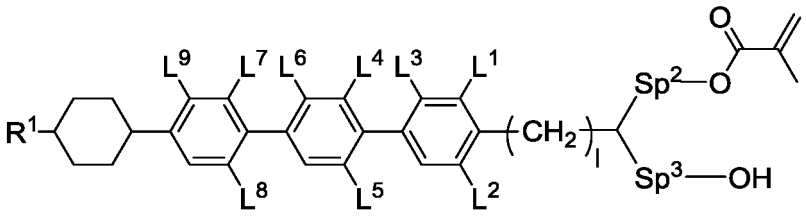
(1ε-90)



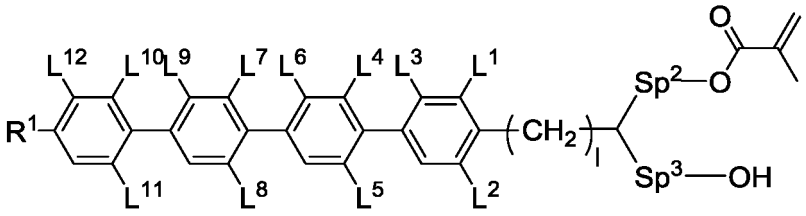
(1ε-91)



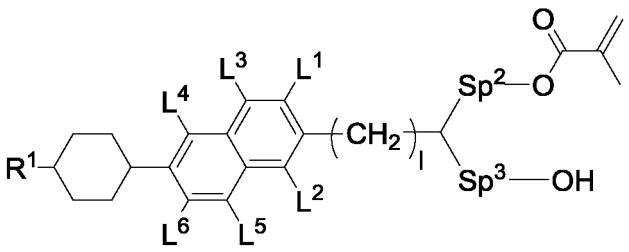
(1ε-92)



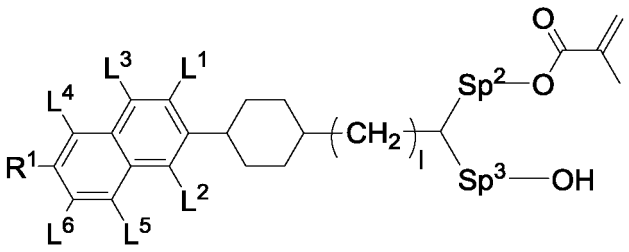
(1ε-93)



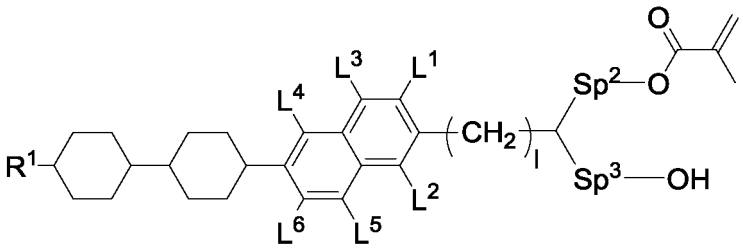
(1ε-94)



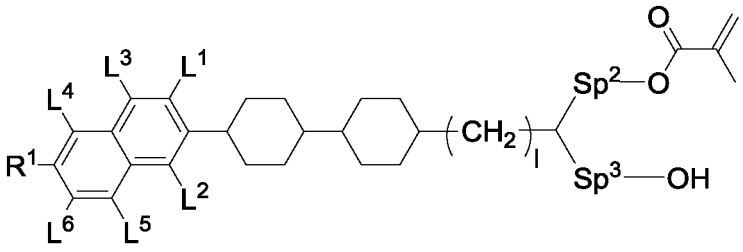
(1ε-95)



(1ε-96)



(1ε-97)



(1ε-98)

式（１ε－６１）から式（１ε－９８）において、

Ｒ[1]は炭素数１から１０のアルキルあり；

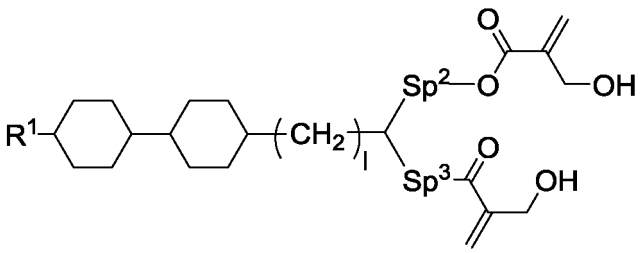
Ｓｐ[2]、およびＳｐ[3]は独立して、炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、Ｌ[8]、Ｌ[9]、Ｌ[10]、Ｌ[11]、およびＬ[12]は独立して、水素、フッ素、またはメチルであり；

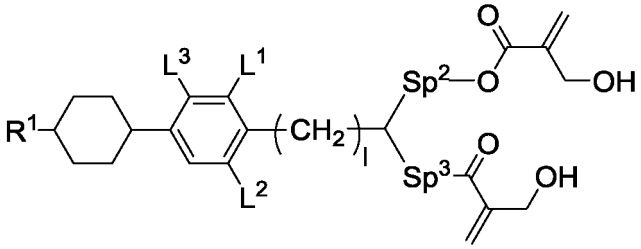
ｌが、１、２、３、または４であり、このアルキレンの少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－で置き換えられてもよい。

【０１４７】

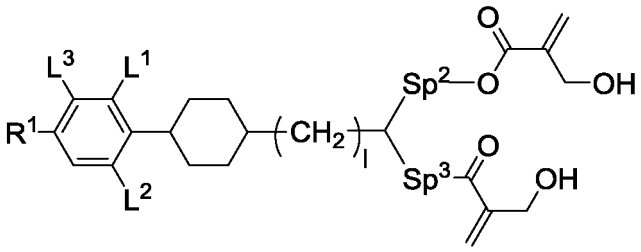
項９１．　式（１ε－９９）から式（１ε－１１７）のいずれか１つで表される、項８１に記載の化合物。



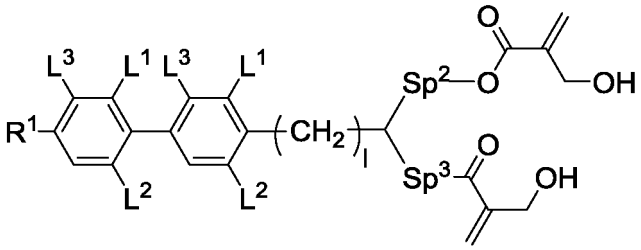
(1ε-99)



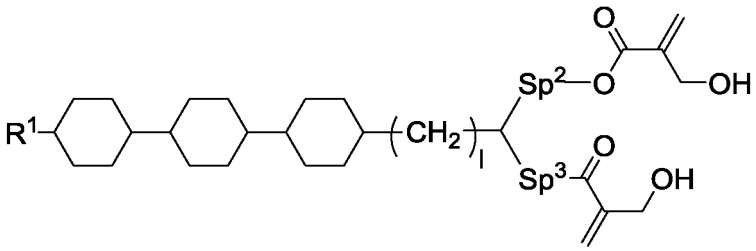
(1ε-100)



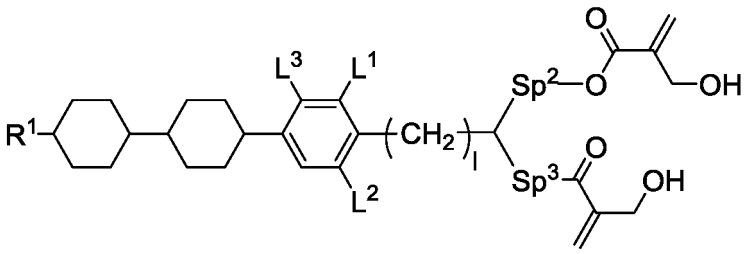
(1ε-101)



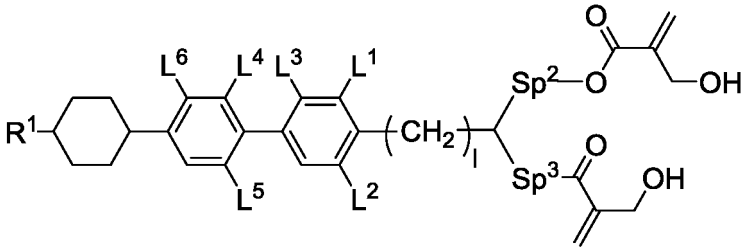
(1ε-102)



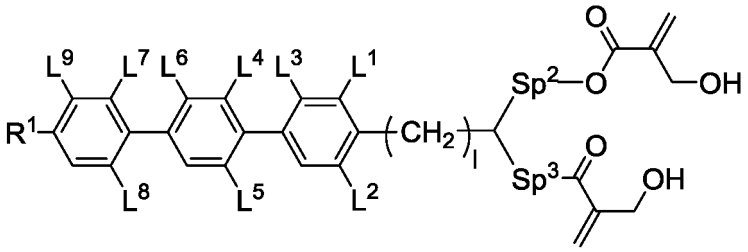
(1ε-103)



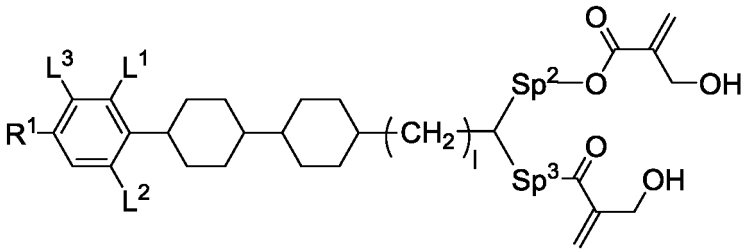
(1ε-104)



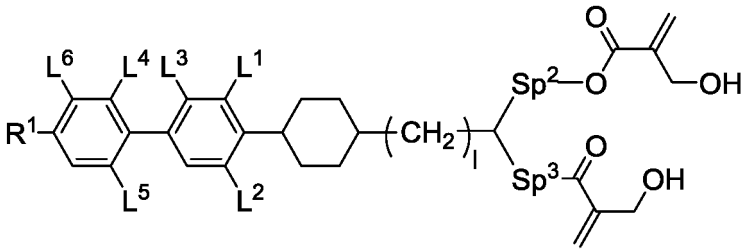
(1ε-105)



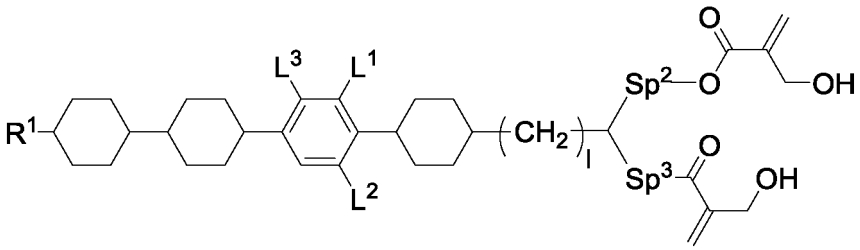
(1ε-106)



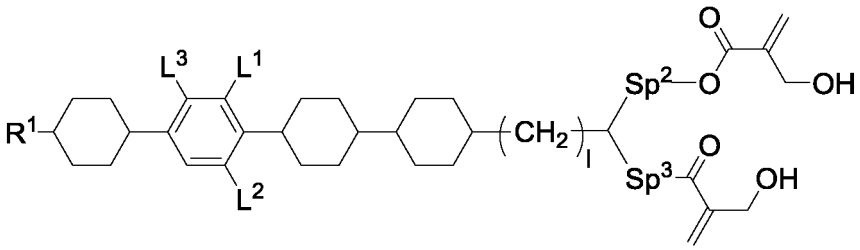
(1ε-107)



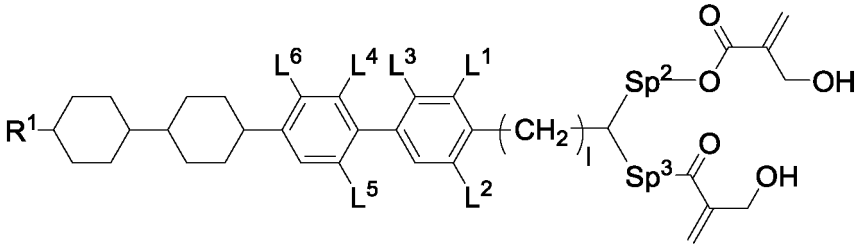
(1ε-108)



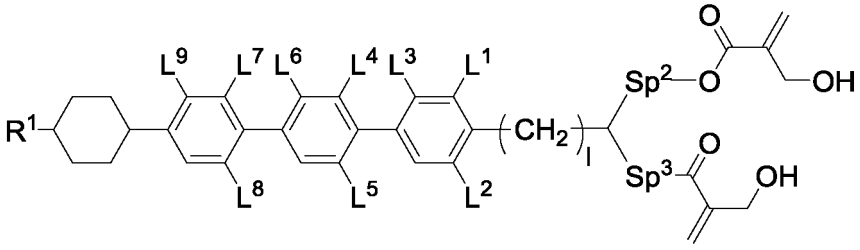
(1ε-109)



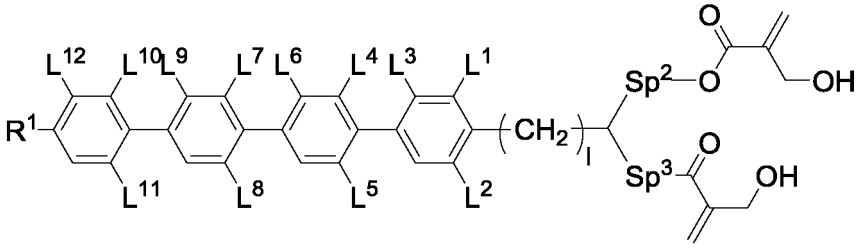
(1ε-110)



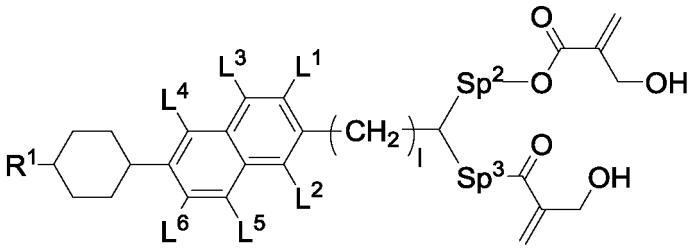
(1ε-111)



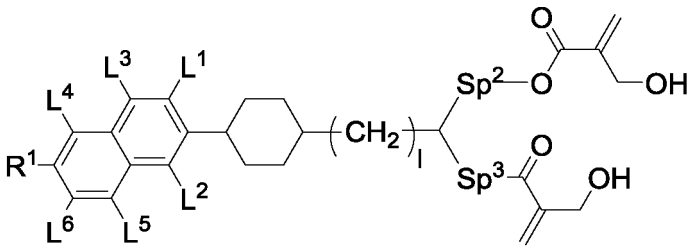
(1ε-112)



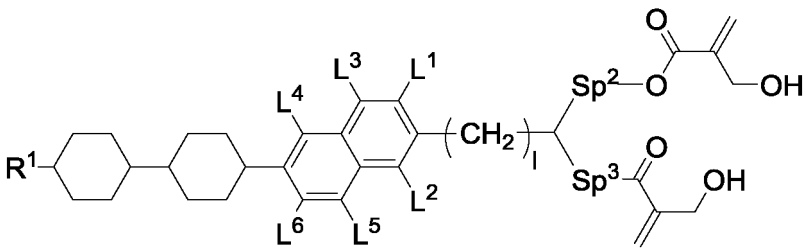
(1ε-113)



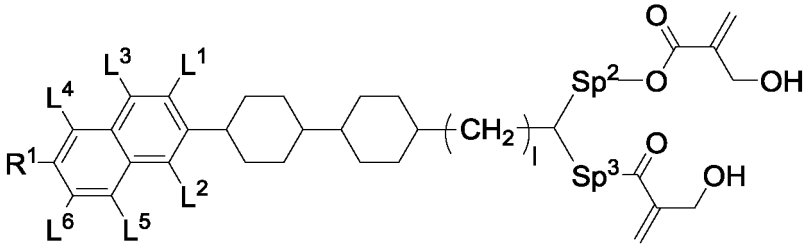
(1ε-114)



(1ε-115)



(1ε-116)



(1ε-117)

式（１ε－９９）から式（１ε－１１７）において、

Ｒ[1]は炭素数１から１０のアルキルあり；

Ｓｐ[2]、およびＳｐ[3]は独立して、炭素数１から３のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－で置き換えられてもよく；

Ｌ[1]、Ｌ[2]、Ｌ[3]、Ｌ[4]、Ｌ[5]、Ｌ[6]、Ｌ[7]、Ｌ[8]、Ｌ[9]、Ｌ[10]、Ｌ[11]、およびＬ[12]は独立して、水素、フッ素、またはメチルであり；

ｌが、１、２、３、または４であり、このアルキレンの少なくとも１つの－ＣＨ[2]－は、－Ｏ－で置き換えられてもよい。

【０１４８】

≪１４．化合物（１ε）の態様≫

本発明の化合物（１ε）は、少なくとも１つの環より構成されるメソゲン部位と、複数の極性基を有することを特徴とする。化合物（１ε）は、極性基がガラス（または金属酸化物）の基板表面と非共有結合的に相互作用するので有用である。用途の一つは、液晶表示素子に使われる液晶組成物用の添加物である。化合物（１ε）は液晶分子の配向を制御

する目的で添加される。このような添加物は、素子に密閉された条件下では化学的に安定であり、液晶組成物への高い溶解度を有し、そして液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きいことが好ましい。化合物（１ε）は、このような特性をかなりの程度で充足する。

【０１４９】

化合物（１ε）の好ましい例について説明をする。化合物（１ε）におけるR^1、ＭＥＳ、Sp^1、P^1などの記号の好ましい例は、化合物（１ε）の下位式にも適用される。化合物（１ε）において、これらの基の種類を適切に組み合わせることによって、特性を任意に調整することが可能である。化合物の特性に大きな差異がないので、化合物（１ε）は、^{2}Ｈ（重水素）、^{13}Ｃなどの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。

【０１５０】

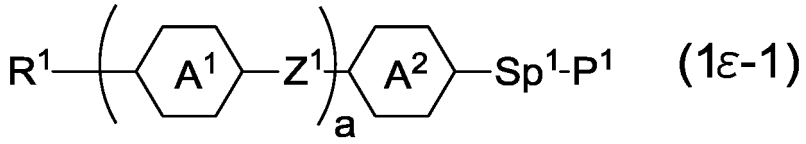
式（１ε）において、R^1は水素または炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は、－Ｏ－、－Ｓ－、または－ＮＨ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（CH_2）$_2$－は－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

【０１５１】

式（１ε）において、好ましいR^1は、水素、炭素数１から１５のアルキル、炭素数２から１５のアルケニル、炭素数１から１４のアルコキシ、または炭素数２から１４のアルケニルオキシであり、これらの基において、少なくとも１つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよい。さらに好ましいR^1は、水素、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数１から９のアルコキシであり、これらの基において、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよい。特に好ましいR^1は、炭素数１から１０のアルキルである。

【０１５２】

式（１ε）において、ＭＥＳは少なくとも１つの環を有するメソゲン基である。メソゲン基は、当業者に周知である。メソゲン基は、化合物が液晶相（中間相）を有するとき、液晶相の形成に寄与する部分を意味する。化合物（１ε）の好ましい例は、化合物（１ε－１）である。



【０１５３】

式（１ε－１）において、好ましい環A^1または環A^2は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、塩素、炭素数１から１２のアルキル、炭素数２から１２のアルケニル、炭素数１から１１のアルコキシ、または炭素数２から１１のアルケニルオキシで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。さらに好ましい環A^1または環A^2は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイル、または２，３，４，７，８，９，１０，１１，１２，１３，１４，１

５，１６，１７－テトラデカヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、または炭素数１から５のアルキルで置き換えられてもよい。特に好ましい環Ａ^{1}または環Ａ^{2}は、１，４－シクロヘキシレン、１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、ペルヒドロシクロペンタ［ａ］フェナントレン－３，１７－ジイルであり、これらの環において、少なくとも１つの水素は、フッ素、メチル、またはエチルで置き換えられてもよい。

【０１５４】

式（１ε－１）において、Ｚ^{1}は単結合または炭素数１から４のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく；

【０１５５】

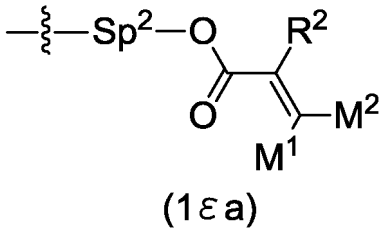
式（１ε－１）において、好ましいＺ^{1}は、単結合、－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、－ＣＦ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＦ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$Ｏ－、－ＯＣＨ$_{2}$－、または－ＣＦ＝ＣＦ－である。さらに好ましいＺ^{1}またはＺ^{2}は、単結合、－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－、－ＣＯＯ－、または－ＯＣＯ－である。特に好ましいＺ^{1}またはＺ^{2}は、単結合である。

【０１５６】

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

【０１５７】

式（１ε－１）において、Ｓｐ^{1}は単結合または炭素数１から１０のアルキレンであり、このアルキレンにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＣＯＯ－、－ＯＣＯ－、または－ＯＣＯＯ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つ以上の水素は、式（１εａ）で表される重合性基で置き換えられ；



(1εa)

式（１εａ）において、

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

Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルであり：

Ｒ^{2}は水素または炭素数１から１５のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－ＣＨ$_{2}$－は、－Ｏ－または－Ｓ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－は、－ＣＨ＝ＣＨ－または－Ｃ≡Ｃ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、ハロゲンで置き換えられてもよい。

【０１５８】

式（１ε－１）において、好ましいＳｐ^{1}は、炭素数１から５のアルキレン、または１

つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^{1}は、炭素数１から３のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から３のアルキレンであり、これらの基において、少なくとも１つの水素は、式（１εａ）で表される重合性基で置き換えられる。

【０１５９】

式（１εａ）において、好ましいＳｐ^{2}は、単結合、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^{1}は、単結合、炭素数１から３のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から３のアルキレンである。

【０１６０】

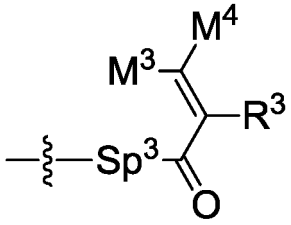
式（１εａ）において、好ましいＲ^{2}は、水素、または炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＲ^{2}は、水素、または炭素数１から３のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から３のアルキレンである。特に好ましいＲ^{2}は、水素またはメチルである。Ｒ^{2}が－ＣＨ$_2$－ＯＨである場合、分子内に２つの水酸基が存在する効果で低濃度添加での垂直配向が期待される。

【０１６１】

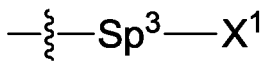
式（１εａ）において、Ｍ^{1}およびＭ^{2}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５のアルキルである。好ましいＭ^{1}またはＭ^{2}は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましいＭ^{1}またはＭ^{2}は水素である。

【０１６２】

式（１ε）において、Ｐ^{1}は式（１εｅ）および（１εｆ）で表される基から選択された基である。

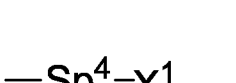


(1εe)

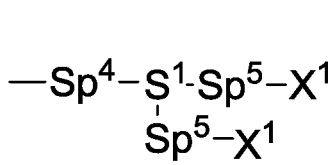


(1εf)

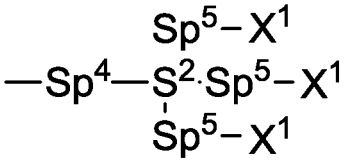
式（１εｅ）において、Ｒ^{3}は、式（１εｇ）、式（１εｈ）、および式（１εｉ）で表される基から選択された基である。



(1εg)



(1εh)



(1εi)

【０１６３】

式（１εｅ）および（１εｆ）において、好ましいＳｐ^{3}は、炭素数１から７のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいＳｐ^{3}は、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。特に好ましいＳｐ^{3}は、－ＣＨ$_2$－である。

【０１６４】

式（１εｅ）において、Ｍ^{3}およびＭ^{4}は独立して、水素、ハロゲン、炭素数１から５のアルキル、または少なくとも１つの水素がハロゲンで置き換えられた炭素数１から５の

アルキルである。好ましいM^3またはM^4は、反応性を上げるために水素またはメチルである。さらに好ましいM^3またはM^4は水素である。

【０１６５】

式（１εｅ）において、好ましいR^3は、式（１εｇ）、式（１εｈ）、および式（１εｉ）で表される極性基の群から選択された基である。好ましいR^3は、式（１ｇ）または式（１ｈ）で表される極性基である。さらに好ましいR^3は、式（１ｇ）で表される極性基である。

【０１６６】

式（１εｇ）、式（１εｈ）、および式（１εｉ）において、好ましいSp^4またはSp^5は、炭素数１から７のアルキレン、または１つの－CH_2－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。さらに好ましいSp^4またはSp^5は、炭素数１から５のアルキレン、または１つの－CH_2－が－Ｏ－で置き換えられた炭素数１から５のアルキレンである。特に好ましいSp^4またはSp^5は、－CH_2－である。

【０１６７】

式（１εｇ）および式（１εｉ）において、S^1は、＞ＣＨ－または＞Ｎ－であり、そしてS^2は、＞Ｃ＜または＞Ｓｉ＜である。好ましいS^1は、＞ＣＨ－であり、好ましいS^2は、＞Ｃ＜である。

【０１６８】

式（１εｆ）、式（１εｇ）、および式（１εｉ）において、X^1は、－ＯＨ、－NH_2、－OR^5、－$N(R^5)_2$、－ＣＯＯＨ、－ＳＨ、－$B(OH)_2$、または－$Si(R^5)_3$であり、ここで、R^5は、水素または炭素数１から１０のアルキルであり、このアルキルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの－$(CH_2)_2$－は－ＣＨ＝ＣＨ－で置き換えられてもよく、これらの基において、少なくとも１つの水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。

【０１６９】

好ましいX^1は、－ＯＨ、－NH_2、または－$N(R^5)_2$であり、ここで、R^5は、炭素数１から５のアルキルまたは炭素数１から４のアルコキシである。さらに好ましいX^1は、－ＯＨ、－NH_2、または－$N(R^5)_2$である。特に好ましいX^1は、－ＯＨである。

【０１７０】

≪１５．化合物（１ε）の合成≫

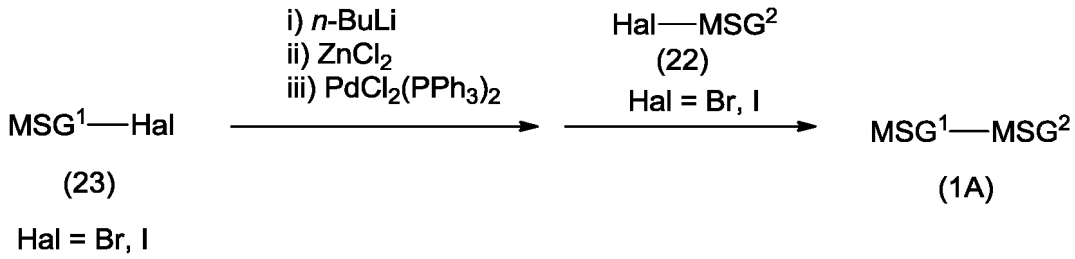
化合物（１ε）の合成法について説明する。化合物（１ε）は、有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成できる。合成法を記載しなかった化合物は、「オーガニック・シンセシス」（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc）、「オーガニック・リアクションズ」（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc）、「コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス」（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、「新実験化学講座」（丸善）などの成書に記載された方法によって合成する。

【０１７１】

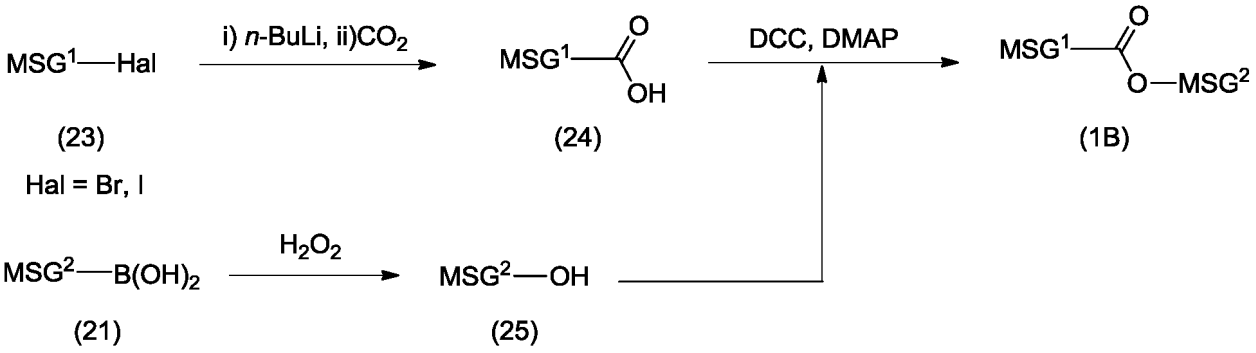
・結合基の生成

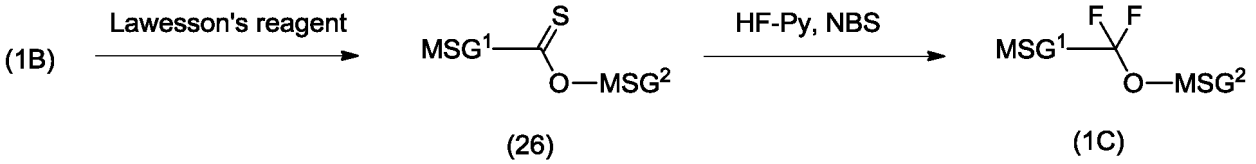
化合物（１ε）における結合基を生成する方法の例は、下記のスキームのとおりである。このスキームにおいて、MSG^1（またはMSG^2）は、少なくとも１つの環を有する一価の有機基である。複数のMSG^1（またはMSG^2）が表す一価の有機基は、同一であってもよいし、または異なってもよい。化合物（１Ａ）から（１Ｇ）は、化合物（１ε）または化合物（１ε）の中間体に相当する。

【０１７２】

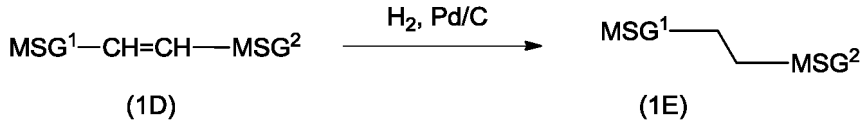


【０１７３】



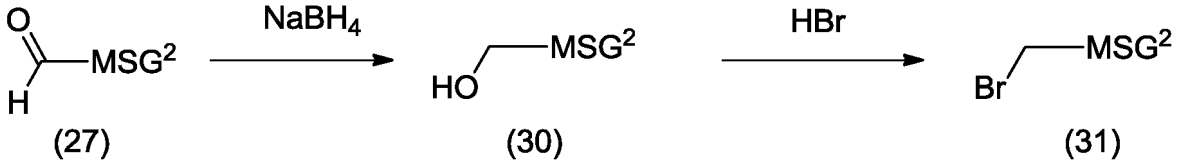


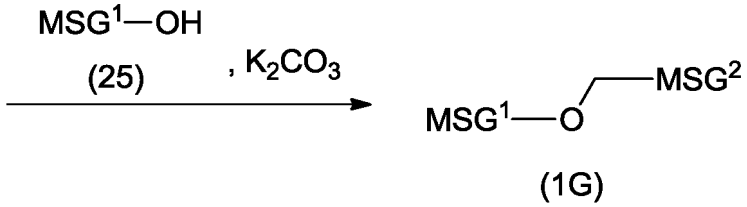
【０１７４】



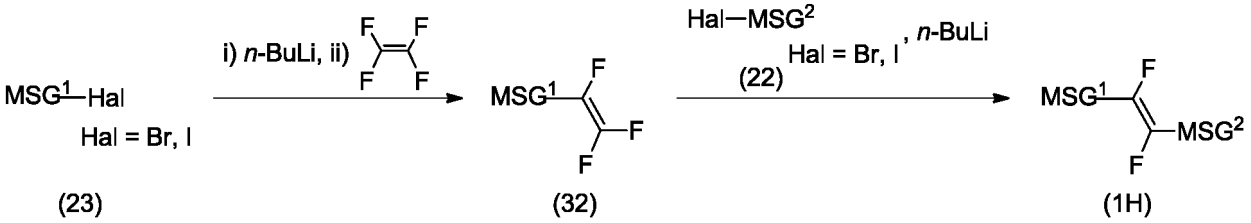
【０１７５】

【０１７６】





【０１７７】



【０１７８】

（Ｉ）単結合の生成

アリールホウ酸（２１）と化合物（２２）を、炭酸塩、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム触媒の存在下で反応させ、化合物（１Ａ）を合成する。この化合物（１Ａ）は、化合物（２３）にｎ－ブチルリチウムを、次いで塩化亜鉛を反応させ、ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム触媒の存在下で化合物（２２）を反応させても合成される。

【０１７９】

（ＩＩ）－ＣＯＯ－と－ＯＣＯ－の生成

化合物（２３）にｎ－ブチルリチウムを、次いで二酸化炭素を反応させ、カルボン酸（２４）を得る。このカルボン酸（２４）と、化合物（２１）から誘導したフェノール（２５）とをＤＣＣ（１，３－ジシクロヘキシルカルボジイミド）とＤＭＡＰ（４－ジメチルアミノピリジン）の存在下で脱水させて－ＣＯＯ－を有する化合物（１Ｂ）を合成する。この方法によって－ＯＣＯ－を有する化合物も合成する。

【０１８０】

（ＩＩＩ）－ＣＦ$_2$Ｏ－と－ＯＣＦ$_2$－の生成

化合物（１Ｂ）をローソン試薬で硫黄化し、化合物（２６）を得る。化合物（２６）をフッ化水素ピリジン錯体とＮＢＳ（Ｎ－ブロモスクシンイミド）でフッ素化し、－ＣＦ$_2$Ｏ－を有する化合物（１Ｃ）を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827.を参照。化合物（１Ｃ）は化合物（２６）をＤＡＳＴ（（ジエチルアミノ）サルファートリフルオリド）でフッ素化しても合成される。W. H. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768.を参照。この方法によって－ＯＣＦ$_2$－を有する化合物も合成する。

【０１８１】

（ＩＶ）－ＣＨ＝ＣＨ－の生成
化合物（２２）をｎ－ブチルリチウム、次いでＤＭＦ（Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド）と反応させてアルデヒド（２７）を得る。ホスホニウム塩（２８）とカリウムｔｅｒｔ－ブトキシドを反応させて発生させたリンイリドを、アルデヒド（２７）と反応させて化合物（１Ｄ）を合成する。反応条件によってはシス体が生成するので、必要に応じて公知の方法によりシス体をトランス体に異性化する。

【０１８２】
（Ｖ）－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－の生成
化合物（１Ｄ）をパラジウム炭素触媒の存在下で水素化し、化合物（１Ｅ）を合成する。

【０１８３】
（ＶＩ）－Ｃ≡Ｃ－の生成
ジクロロパラジウムとヨウ化銅の触媒存在下で、化合物（２３）に２－メチル－３－ブチン－２－オールを反応させたのち、塩基性条件下で脱保護して化合物（２９）を得る。ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウムとハロゲン化銅との触媒存在下、化合物（２９）を化合物（２２）と反応させて、化合物（１Ｆ）を合成する。

【０１８４】
（ＶＩＩ）－ＣＨ$_2$Ｏ－と－ＯＣＨ$_2$－の生成
化合物（２７）を水素化ホウ素ナトリウムで還元して化合物（３０）を得る。これを臭化水素酸で臭素化して化合物（３１）を得る。炭酸カリウムの存在下、化合物（２５）と化合物（３１）を反応させて、化合物（１Ｇ）を合成する。この方法によって－ＯＣＨ$_2$－を有する化合物も合成する。

【０１８５】
（ＶＩＩＩ）－ＣＦ＝ＣＦ－の生成
化合物（２３）をｎ－ブチルリチウムで処理したあと、テトラフルオロエチレンを反応させて化合物（３２）を得る。化合物（２２）をｎ－ブチルリチウムで処理したあと化合物（３２）と反応させて、化合物（１Ｈ）を合成する。

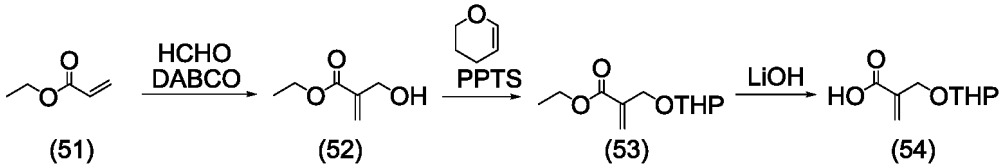
【０１８６】
・環Ａ^{2}の生成
１，４－シクロヘキシレン、１，４－シクロヘキセニレン、１，４－フェニレン、２－フルオロ－１，４－フェニレン、２－メチル－１，４－フェニレン、２－エチル－１，４－フェニレン、ナフタレン－２，６－ジイル、デカヒドロナフタレン－２，６－ジイル、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン－２，６－ジイル、テトラヒドロピラン－２，５－ジイル、１，３－ジオキサン－２，５－ジイル、ピリミジン－２，５－ジイル、ピリジン－２，５－ジイルなどの環に関しては出発物が市販されているか、または合成法がよく知られている。

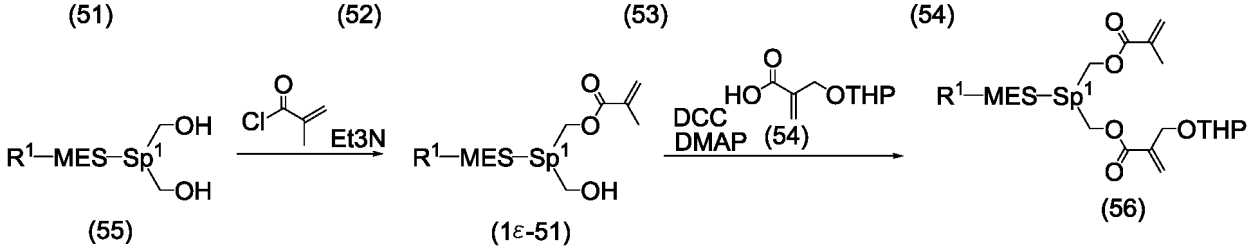
【０１８７】
・合成例
化合物（１ε）を合成する方法の例は、次のとおりである。これらの化合物において、Ｒ^1、ＭＥＳ、Ｍ^1、およびＭ^{2}の定義は、項８１に記載と同一である。

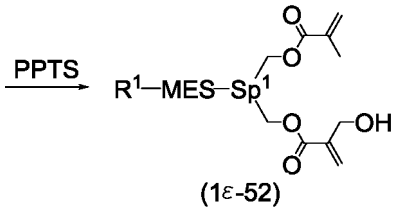
【０１８８】
Ｒ^{2}が式（１εａ）で表される基であり、Ｓｐ^{4}が－ＣＨ$_2$－であり、Ｘ^{1}が－ＯＨである化合物（１ε－５１）、および（１ε－５２）は、以下の方法で合成できる。
化合物（５１）を、ホルムアルデヒドおよびＤＡＢＣＯ（１，４－ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン）の存在下で反応させ、化合物（５２）を得る。化合物（５２）をＰＰＴＳ（ｐ－トルエンスルホン酸ピリジニウム）および、３，４－ジヒドロ－２Ｈ－ピランの存在下で反応させ、化合物（５３）を得る。
化合物（５４）を、Ｅｔ$_3$Ｎ（トリエチルアミン）、メタクリロイルクロリドの存在下で反応させ、化合物（１ε－５１）を得ることができる。化合物（１ε－５１）と化合物（５３）をＤＣＣおよびＤＭＡＰの存在下で反応させ、化合物（５５）を得た後、ＰＰＴ

Ｓ（テトラブチルアンモニウムフルオリド）を用いて脱保護させる事により、化合物（１ε－５２）へと導く事ができる。

【０１８９】



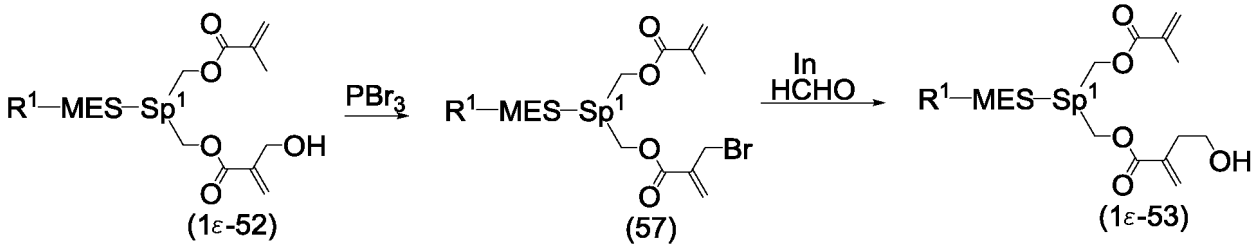




【０１９０】

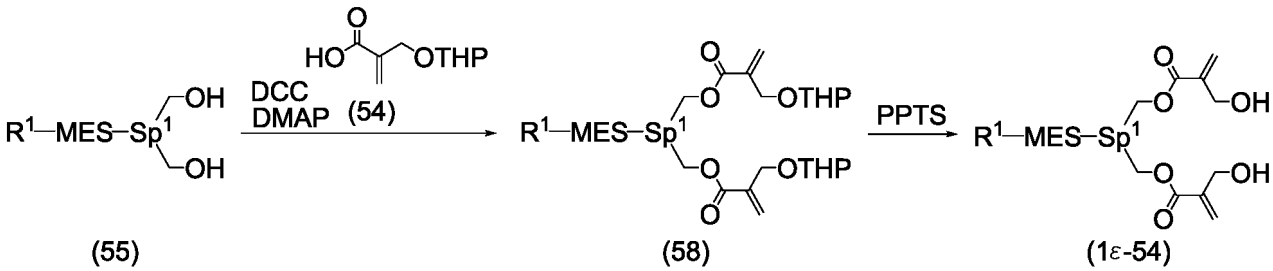
Ｒ^{2}が式（１εａ）で表される基であり、Ｓｐ^{4}が－（ＣＨ$_{2}$）$_{2}$－であり、Ｘ^{1}が－ＯＨである化合物（１ε－５３）は、以下の方法で合成できる。化合物（１ε－５２）に三臭化リンを作用させて、化合物（５６）を得る。次に化合物（５７）にインジウムを作用させた後、ホルムアルデヒドと反応させる事によって、化合物（１ε－５３）へと導く事ができる。

【０１９１】



【０１９２】

Ｒ^{2}が式（１εａ）で表される基であり、Ｓｐ^{4}が－ＣＨ$_{2}$－であり、Ｘ^{1}が－ＯＨである化合物（１ε－５４）は、以下の方法で合成できる。



【０１９３】

≪１６．液晶組成物≫

液晶組成物は、配向性モノマーとして機能する化合物（１）、すなわち化合物（１α）（１β）（１γ）（１δ）（１ε）の少なくとも１つの重合性極性化合物を成分Ａとして含む。化合物（１）は、素子の基板との非共有結合的な相互作用によって、液晶分子の配向を制御することができる。

この組成物は、
化合物（１）を成分Ａとして含み、下に示す成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥから選択された液晶性化合物をさらに含むことが好ましい。
成分Ｂは、化合物（２）から（４）である。
成分Ｃは化合物（５）から（７）である。
成分Ｄは、化合物（８）である。
成分Ｅは、化合物（９）から（１５）である。
この組成物は、化合物（２）から（１５）とは異なる、その他の液晶性化合物を含んでもよい。この組成物を調製するときには、正または負の誘電率異方性の大きさなどを考慮して成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥを選択することが好ましい。成分を適切に選択した組成物は、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性（すなわち、大きな光学異方性または小さな光学異方性）、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、熱または紫外線に対する安定性、および適切な弾性定数（すなわち、大きな弾性定数または小さな弾性定数）を有する。
この組成物には、反応性（重合性）を上げる目的で、反応性モノマーとして機能する化合物（１６）を添加してもよい。

【０１９４】

化合物（１）の好ましい割合は、紫外線に対して高い安定性を維持するために約０．０１重量％以上であり、液晶組成物へ溶解させるために約５重量％以下である。さらに好ましい割合は約０．０５重量％から約２重量％の範囲である。最も好ましい割合は、約０．０５重量％から約１重量％の範囲である。

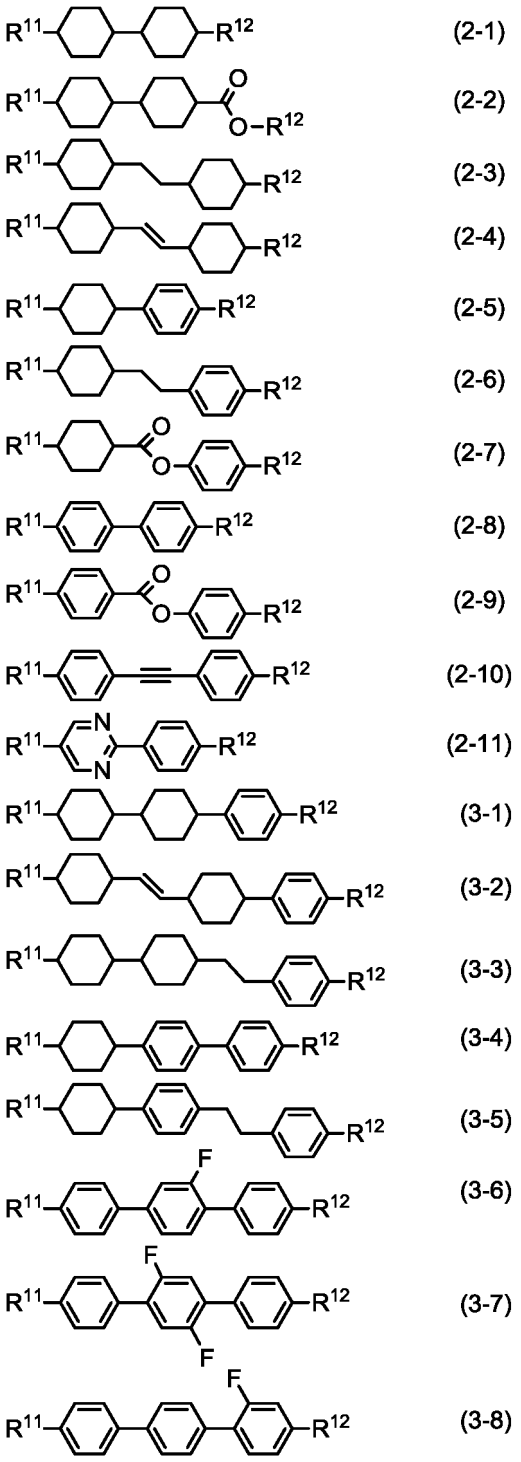
なお、化合物（１δ）、化合物（１ε）については、約０．０５重量％以上であり、素子の表示不良を防ぐために約１０重量％以下である。さらに好ましい割合は、約０．１重量％から約７重量％の範囲である。特に好ましい割合は、約０．５重量％から約５重量％の範囲である。

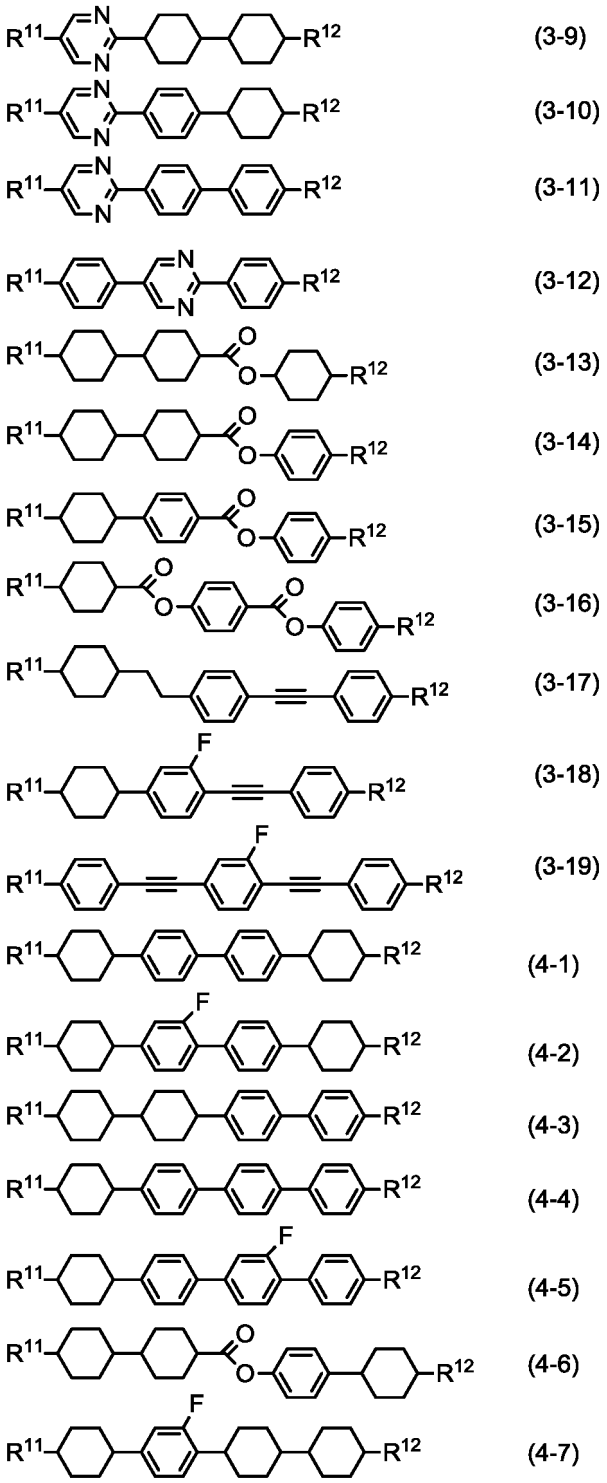
なお、化合物（１６）を添加する場合の好ましい割合は、０．０１重量％から１．０重量％である。

【０１９５】

成分Ｂは、２つの末端基がアルキルなどである化合物である。成分Ｂの好ましい例として、化合物（２－１）から（２－１１）、化合物（３－１）から（３－１９）、および化合物（４－１）から（４－７）を挙げることができる。成分Ｂの化合物において、R^{11}およびR^{12}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルまたはアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよい。

【０１９６】





【０１９７】

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

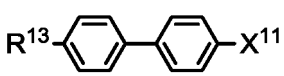
【０１９８】

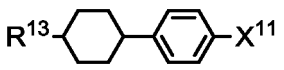
成分Ｂの含有量を増加させるにつれて組成物の誘電率異方性が小さくなるが粘度は小さくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量は多いほうが好ましい。ＩＰＳ、ＶＡなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分Ｂの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて、好ましくは３０重量％以上、さらに好ましくは４０重量％以上である。

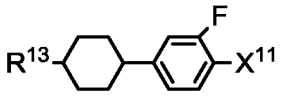
【０１９９】

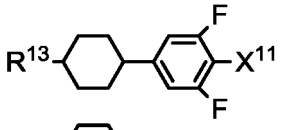
成分Ｃは、右末端にハロゲンまたはフッ素含有基を有する化合物である。成分Ｃの好ましい例として、化合物（５－１）から（５－１６）、化合物（６－１）から（６－１１３）、化合物（７－１）から（７－５７）を挙げることができる。成分Ｃの化合物において、R^{13}は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；X^{11}は、フッ素、塩素、－OCF_3、－$OCHF_2$、－CF_3、－CHF_2、－CH_2F、－OCF_2CHF_2、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

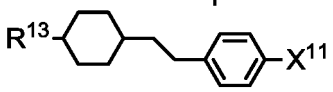
【０２００】

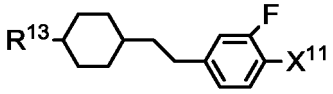

(5-1)

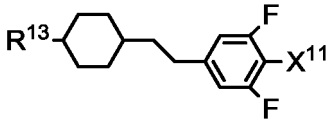

(5-2)

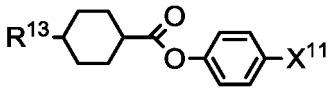

(5-3)

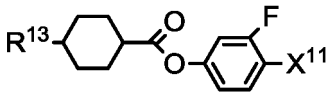

(5-4)

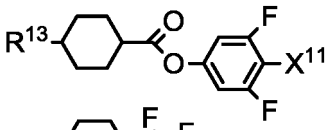

(5-5)

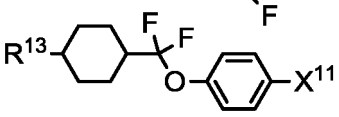

(5-6)

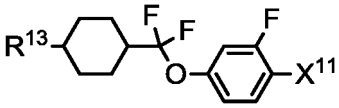

(5-7)

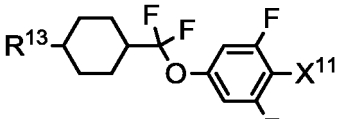

(5-8)

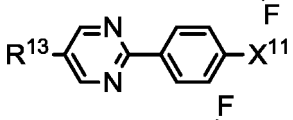

(5-9)

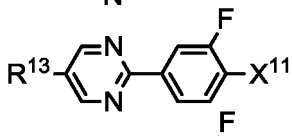

(5-10)

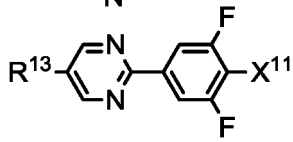

(5-11)


(5-12)

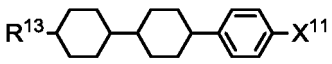

(5-13)

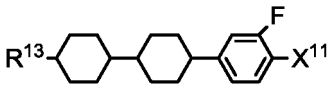

(5-14)

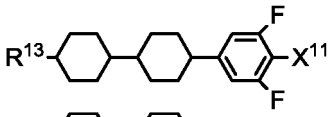

(5-15)

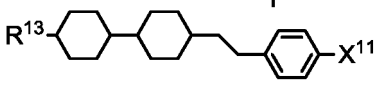

(5-16)

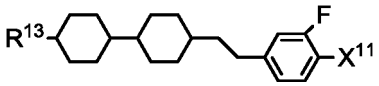
【０２０１】

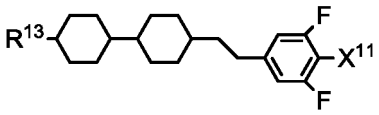

(6-1)

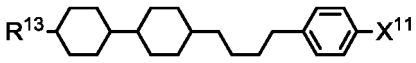

(6-2)

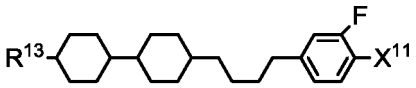

(6-3)

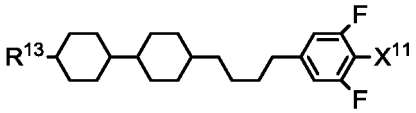

(6-4)

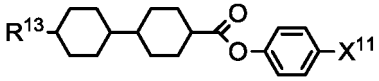

(6-5)

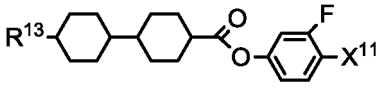

(6-6)

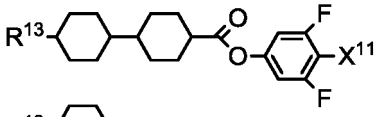

(6-7)

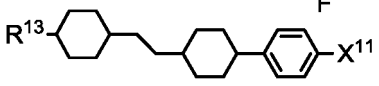

(6-8)

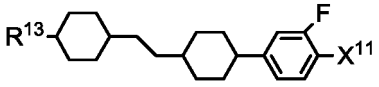

(6-9)

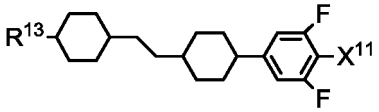

(6-10)

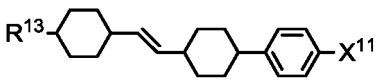

(6-11)

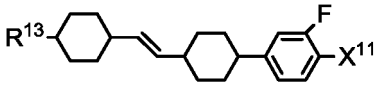

(6-12)

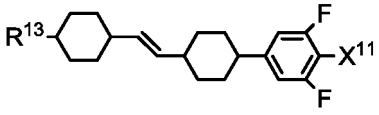

(6-13)

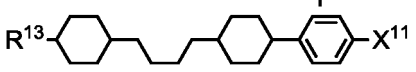

(6-14)

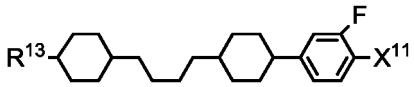

(6-15)

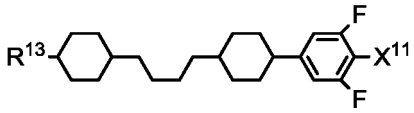

(6-16)

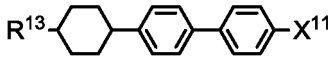

(6-17)

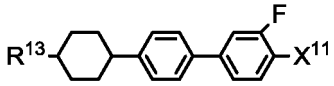

(6-18)

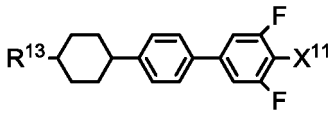

(6-19)

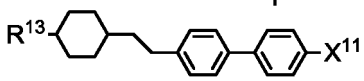

(6-20)

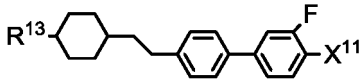

(6-21)

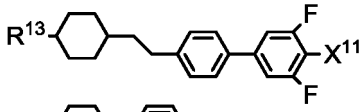

(6-22)

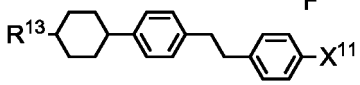

(6-23)

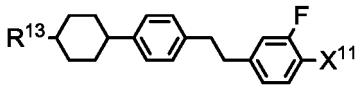

(6-24)

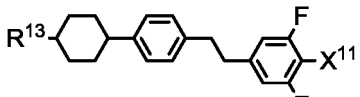

(6-25)

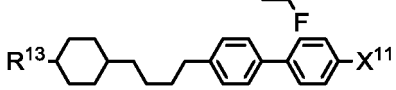

(6-26)

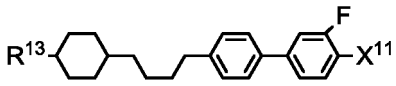

(6-27)

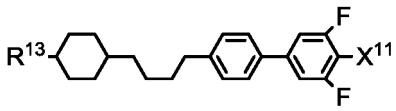

(6-28)

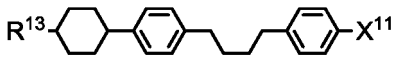

(6-29)

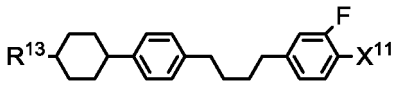

(6-30)

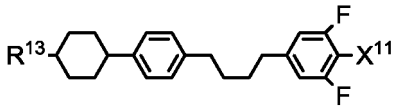

(6-31)

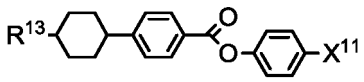

(6-32)

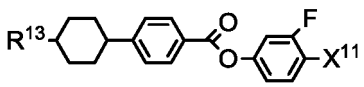

(6-33)


(6-34)

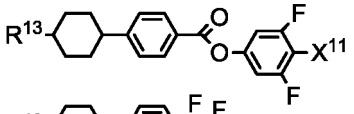

(6-35)

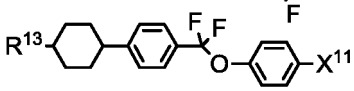

(6-36)

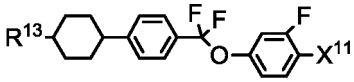

(6-37)

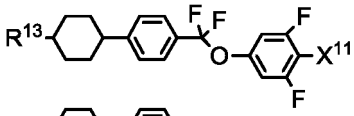

(6-38)

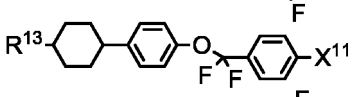
【０２０２】

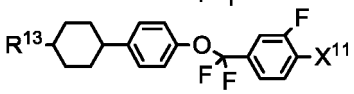

(6-39)

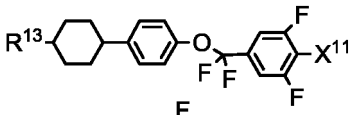

(6-40)

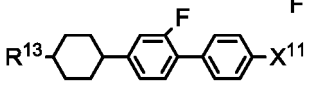

(6-41)

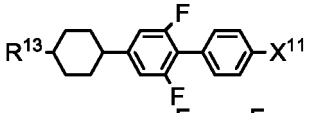

(6-42)

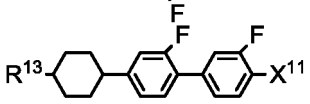

(6-43)

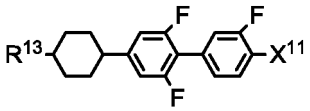

(6-44)

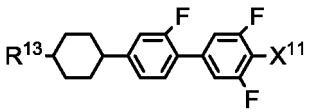

(6-45)

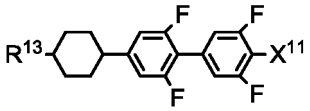

(6-46)

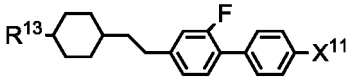

(6-47)

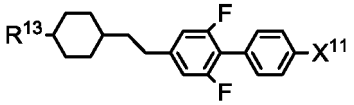

(6-48)

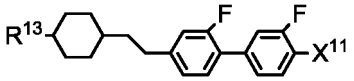

(6-49)

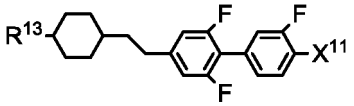

(6-50)

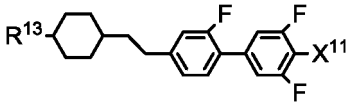

(6-51)

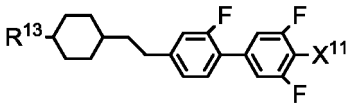

(6-52)

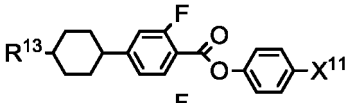

(6-53)

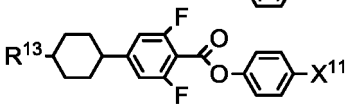

(6-54)

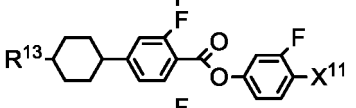

(6-55)

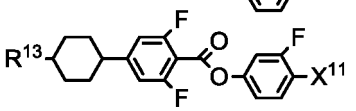

(6-56)

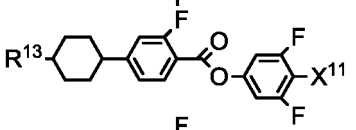

(6-57)

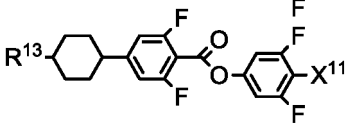

(6-58)

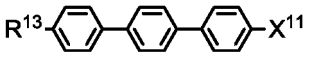

(6-59)

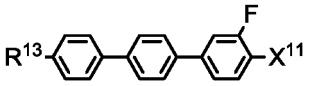

(6-60)

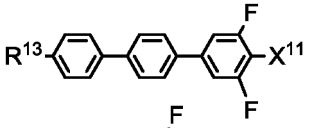

(6-61)

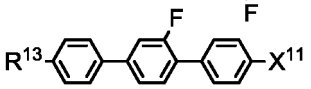

(6-62)

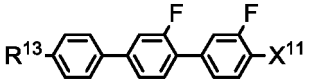

(6-63)

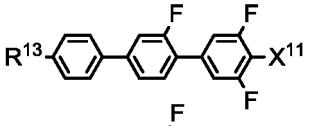

(6-64)

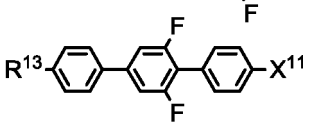

(6-65)

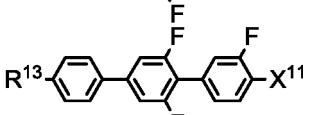

(6-66)

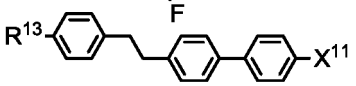

(6-67)

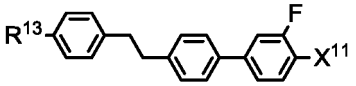

(6-68)

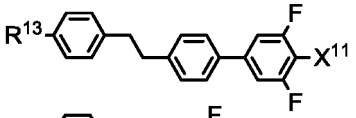

(6-69)

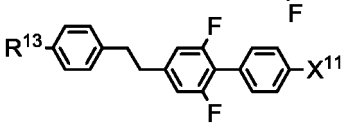

(6-70)

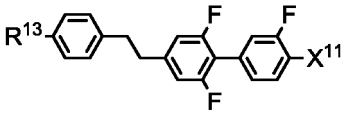

(6-71)


(6-72)

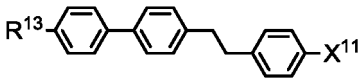

(6-73)

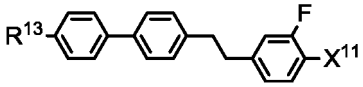

(6-74)

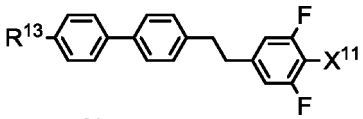

(6-75)

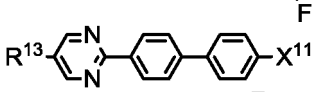

(6-76)

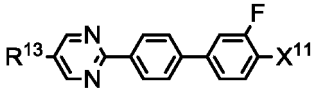
【０２０３】

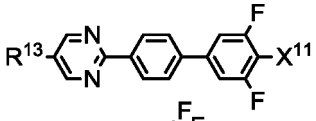

(6-77)

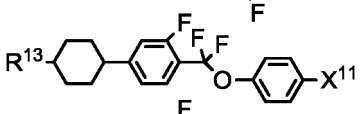

(6-78)

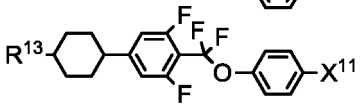

(6-79)

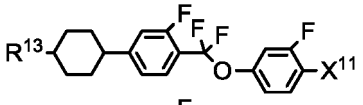

(6-80)

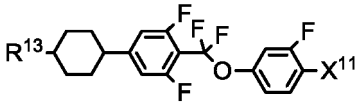

(6-81)

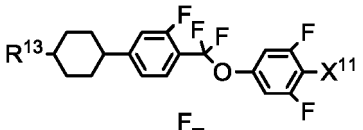

(6-82)

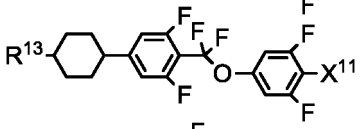

(6-83)

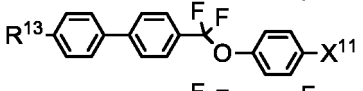

(6-84)

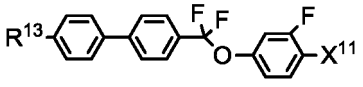

(6-85)

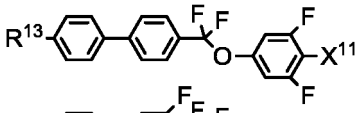

(6-86)

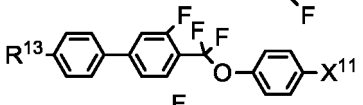

(6-87)

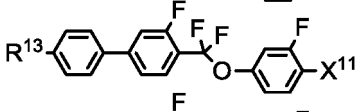

(6-88)

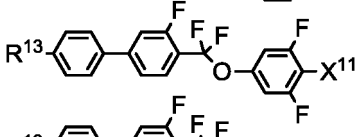

(6-89)

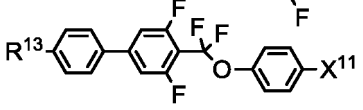

(6-90)

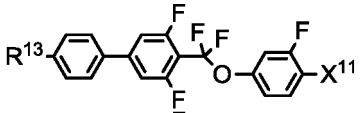

(6-91)

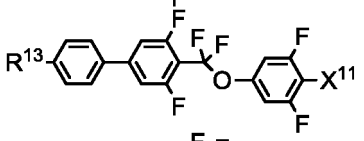

(6-92)

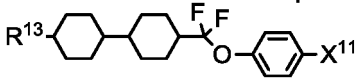

(6-93)

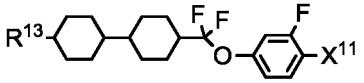

(6-94)

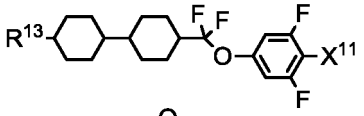

(6-95)

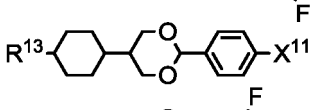

(6-96)

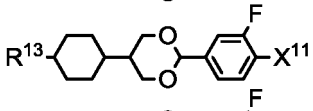

(6-97)

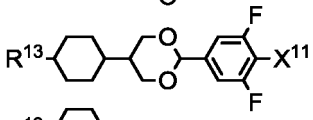

(6-98)

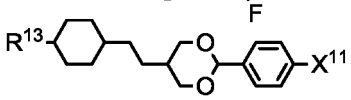

(6-99)

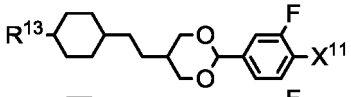

(6-100)

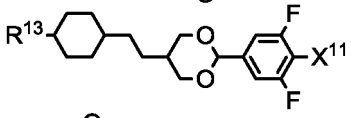

(6-101)

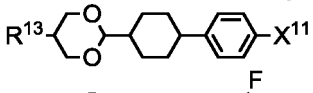

(6-102)

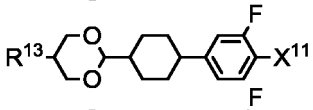

(6-103)

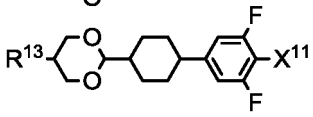

(6-104)

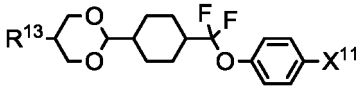

(6-105)

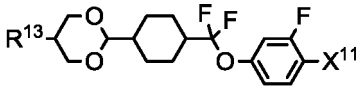

(6-106)

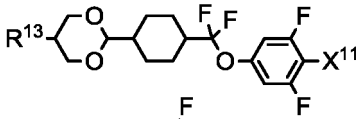

(6-107)

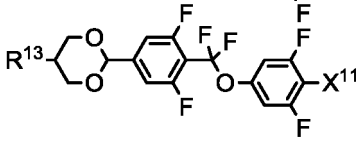

(6-108)


(6-109)

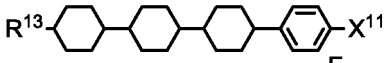

(6-110)

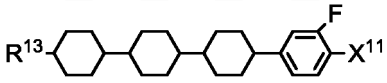

(6-111)

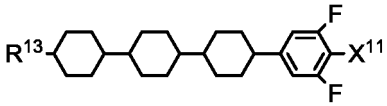

(6-112)

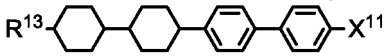

(6-113)

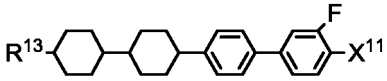
【０２０４】

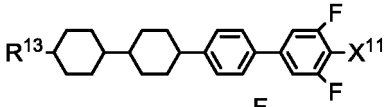

(7-1)

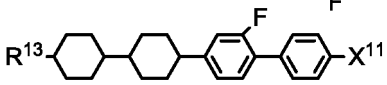

(7-2)

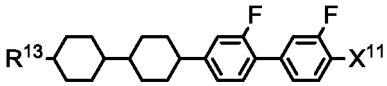

(7-3)

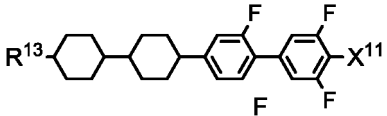

(7-4)

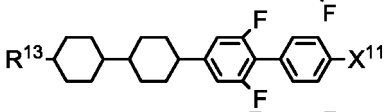

(7-5)

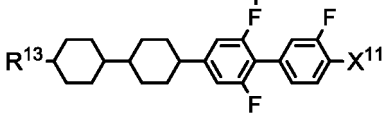

(7-6)

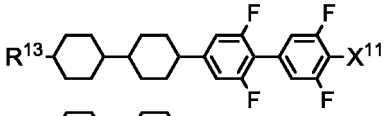

(7-7)

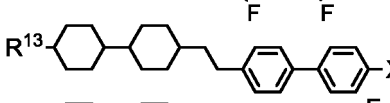

(7-8)

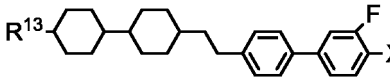

(7-9)

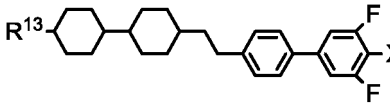

(7-10)

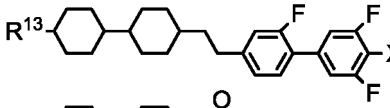

(7-11)

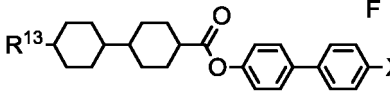

(7-12)

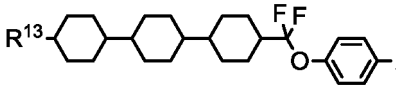

(7-13)

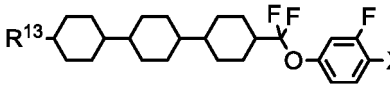

(7-14)

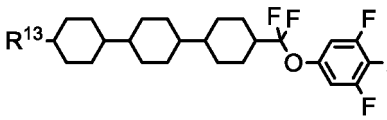

(7-15)

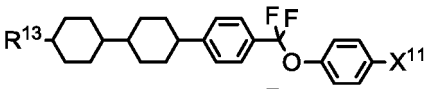

(7-16)

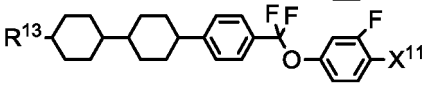

(7-17)

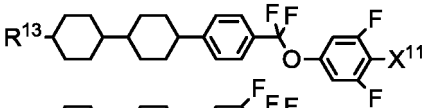

(7-18)

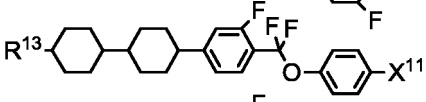

(7-19)

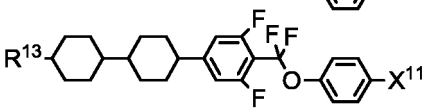

(7-20)

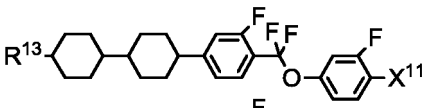

(7-21)

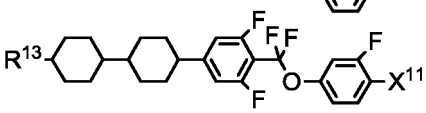

(7-22)

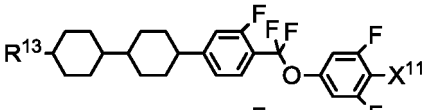

(7-23)

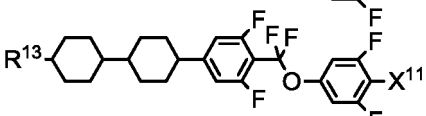

(7-24)

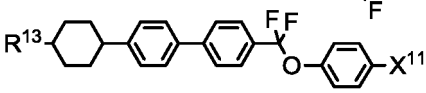

(7-25)

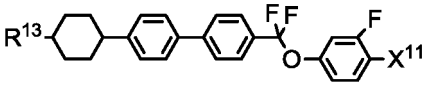

(7-26)

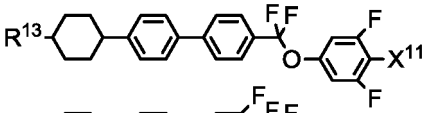

(7-27)

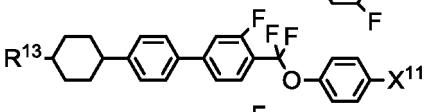

(7-28)

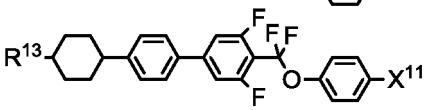

(7-29)

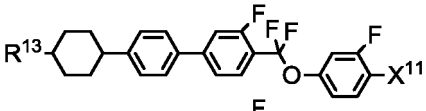

(7-30)

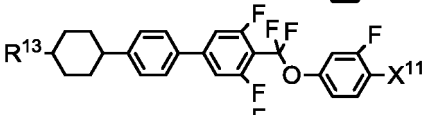

(7-31)

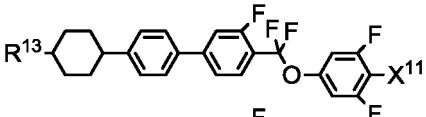

(7-32)

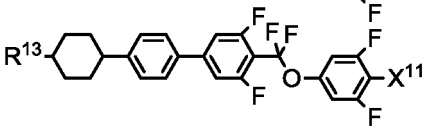

(7-33)


(7-34)

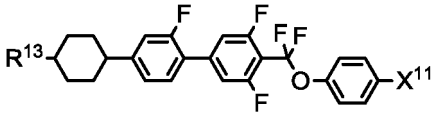

(7-35)

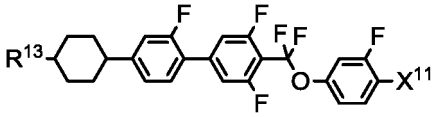

(7-36)

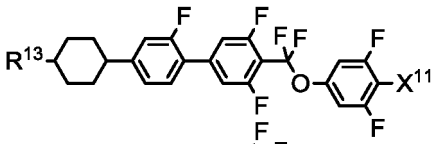

(7-37)

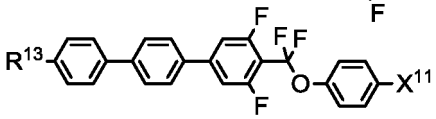

(7-38)

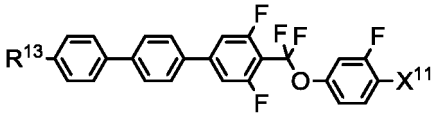
【０２０５】

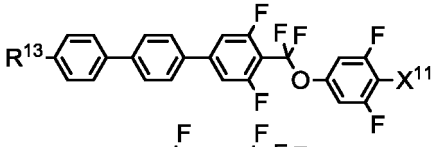

(7-39)

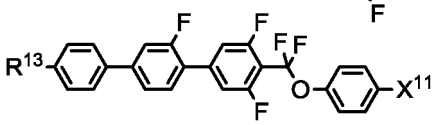

(7-40)

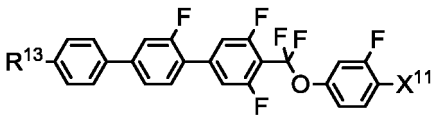

(7-41)

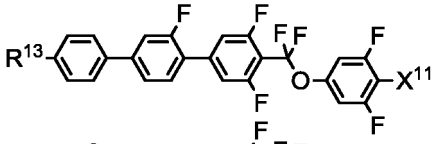

(7-42)

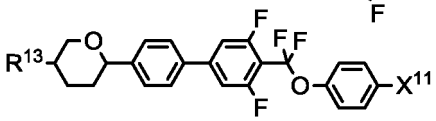

(7-43)

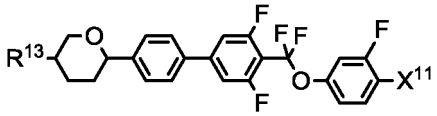

(7-44)

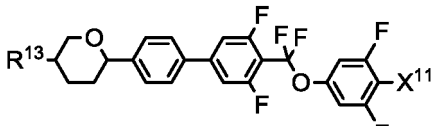

(7-45)

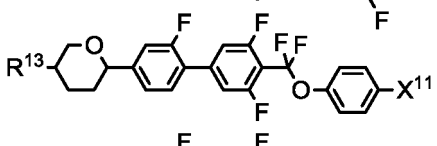

(7-46)

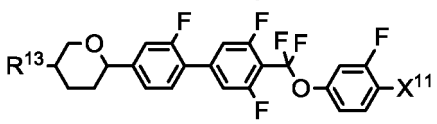

(7-47)

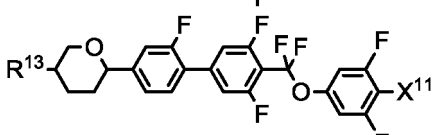

(7-48)

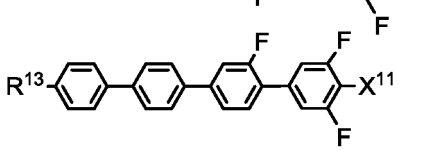

(7-49)

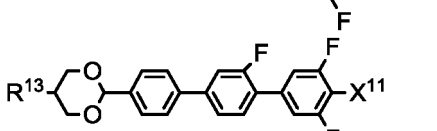

(7-50)

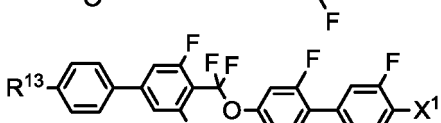

(7-51)

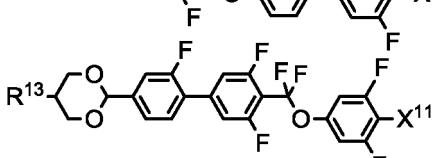

(7-52)


(7-53)


(7-54)


(7-55)


(7-56)


(7-57)

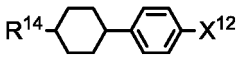
【０２０６】

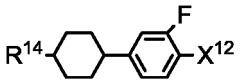
成分Ｃは、誘電率異方性が正であり、熱、光などに対する安定性が非常に優れているので、ＩＰＳ、ＦＦＳ、ＯＣＢなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分Ｃの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて１重量％から９９重量％の範囲が適しており、好ましくは１０重量％から９７重量％の範囲、さらに好ましくは４０重量％から９５重量％の範囲である。成分Ｃを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Ｃの含有量は液晶組成物の重量に基づいて３０重量％以下が好ましい。成分Ｃを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

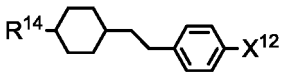
【０２０７】

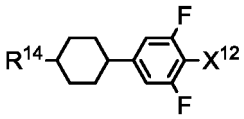
成分Ｄは、右末端基が－Ｃ≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎである化合物（８）である。成分Ｄの好ましい例として、化合物（８－１）から（８－６４）を挙げることができる。成分Ｄの化合物において、R^{14}は炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；－X^{12}は－Ｃ≡Ｎまたは－Ｃ≡Ｃ－Ｃ≡Ｎである。

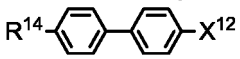
【０２０８】

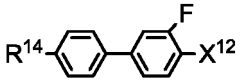

(8-1)

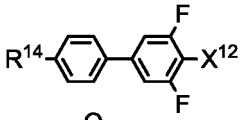

(8-2)

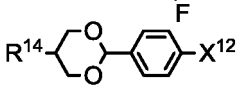

(8-3)

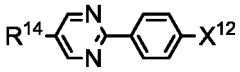

(8-4)

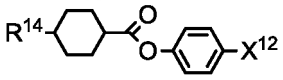

(8-5)

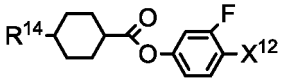

(8-6)

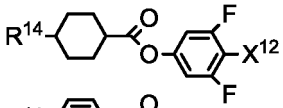

(8-7)

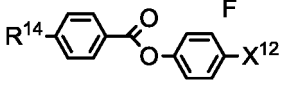

(8-8)

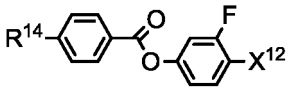

(8-9)

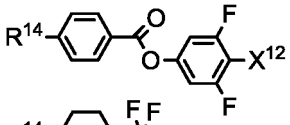

(8-10)

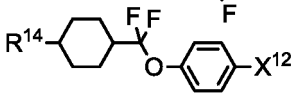

(8-11)

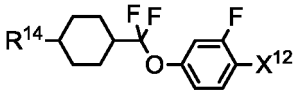

(8-12)

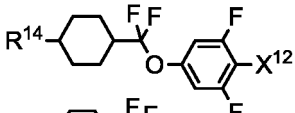

(8-13)

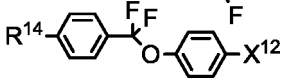

(8-14)

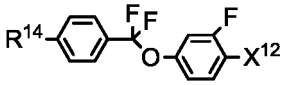

(8-15)

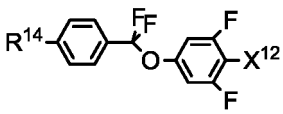

(8-16)

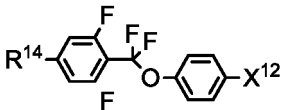

(8-17)

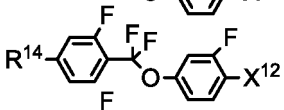

(8-18)

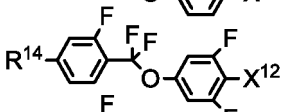

(8-19)

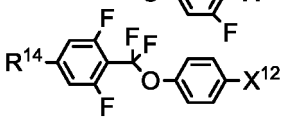

(8-20)

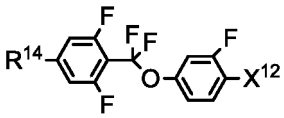

(8-21)

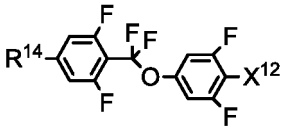

(8-22)

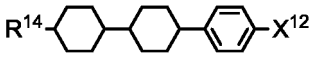

(8-23)

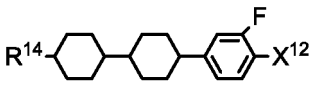

(8-24)

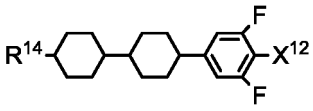

(8-25)

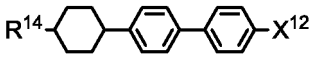

(8-26)

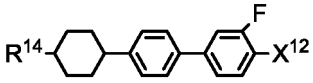

(8-27)

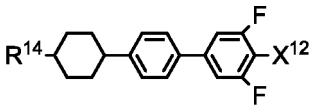

(8-28)

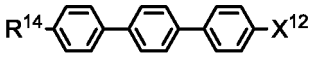

(8-29)

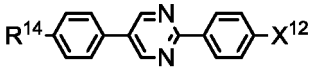

(8-30)

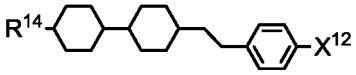

(8-31)

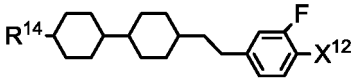

(8-32)

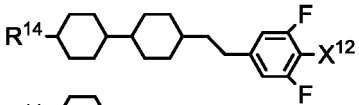

(8-33)

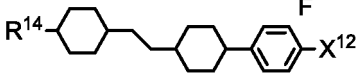

(8-34)

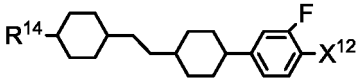

(8-35)

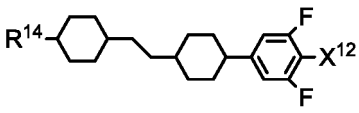

(8-36)


(8-37)

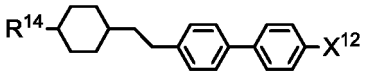

(8-38)

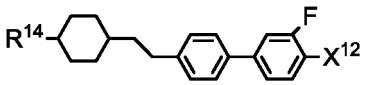

(8-39)

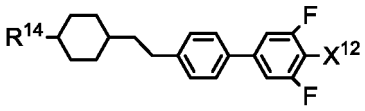

(8-40)

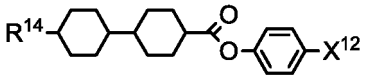

(8-41)

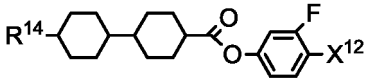
【０２０９】

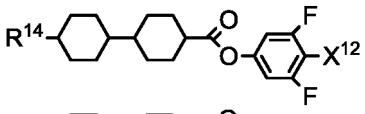

(8-42)

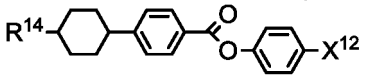

(8-43)

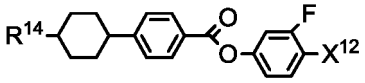

(8-44)

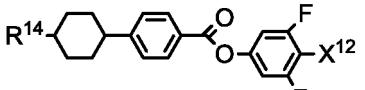

(8-45)

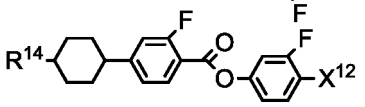

(8-46)

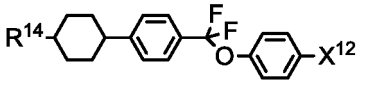

(8-47)

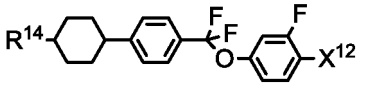

(8-48)


(8-49)

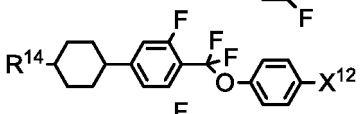

(8-50)

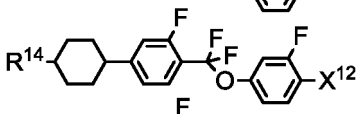

(8-51)

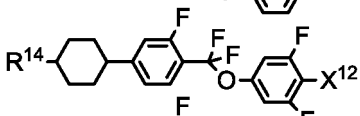

(8-52)

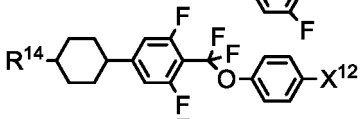

(8-53)

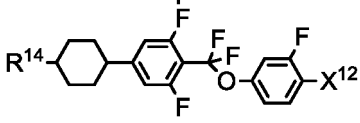
(8-54)

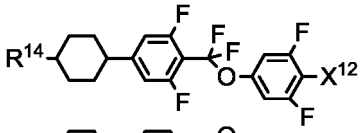

(8-55)

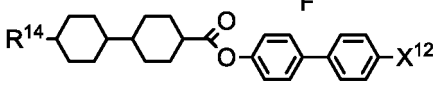

(8-56)

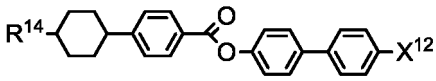

(8-57)

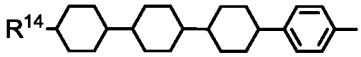

(8-58)

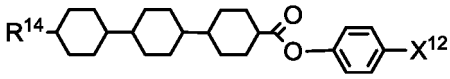

(8-59)


(8-60)


(8-61)


(8-62)


(8-63)


(8-64)

【０２１０】

成分Ｄは、誘電率異方性が正であり、その値が大きいので、ＴＮなどのモード用の組成物を調製する場合に主として用いられる。この成分Ｄを添加することにより、組成物の誘電率異方性を大きくすることができる。成分Ｄは、液晶相の温度範囲を広げる、粘度を調整する、または光学異方性を調整する、という効果がある。成分Ｄは、素子の電圧－透過率曲線の調整にも有用である。

【０２１１】

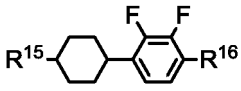
ＴＮなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分Ｄの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて１重量％から９９重量％の範囲が適しており、好ましくは１０重量％から９７重量％の範囲、さらに好ましくは４０重量％から９５重量％の範囲である。成分Ｄを誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分Ｄの含有量は液晶組成物の重量に基づいて３０重量％以下が好ましい。成分Ｄを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

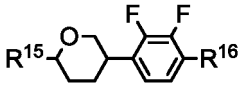
【０２１２】

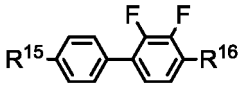
成分Ｅは、化合物（９）から（１５）である。これらの化合物は、２，３－ジフルオロ－１，４－フェニレンのように、ラテラル位が２つのハロゲンで置換されたフェニレンを有する。成分Ｅの好ましい例として、化合物（９－１）から（９－８）、化合物（１０－１）から（１０－１７）、化合物（１１－１）、化合物（１２－１）から（１２－３）、化合物（１３－１）から（１３－１１）、化合物（１４－１）から（１４－３）、および化合物（１５－１）から（１５－３）を挙げることができる。成分Ｅの化合物おいて、R^{15}およびR^{16}は独立して、炭素数１から１０のアルキルまたは炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－

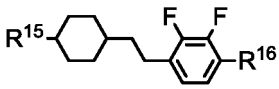
は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；R^{17}は、水素、フッ素、炭素数１から１０のアルキル、または炭素数２から１０のアルケニルであり、このアルキルおよびアルケニルにおいて、少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置き換えられてもよく、少なくとも１つの水素はフッ素で置き換えられてもよい。

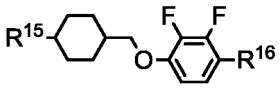
【０２１３】

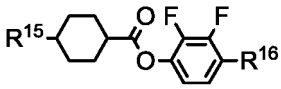

(9-1)

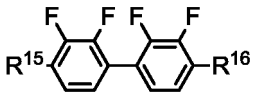

(9-2)

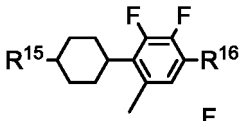

(9-3)

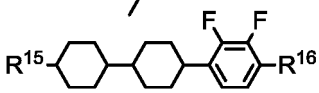

(9-4)

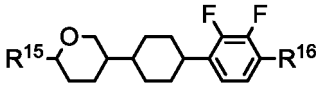

(9-5)

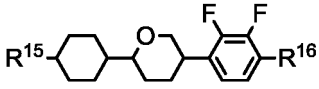

(9-6)

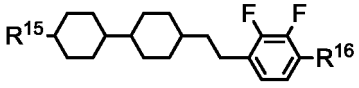

(9-7)

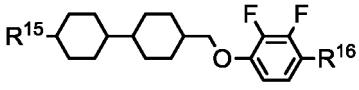

(9-8)

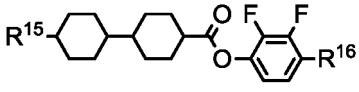

(10-1)

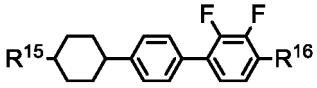

(10-2)

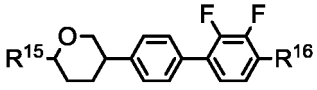

(10-3)

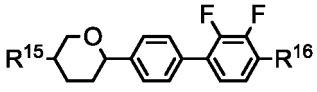

(10-4)

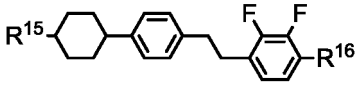

(10-5)

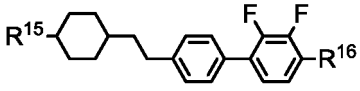

(10-6)

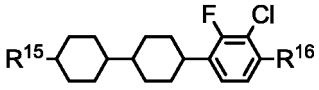

(10-7)

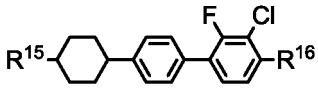

(10-8)

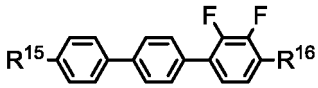

(10-9)

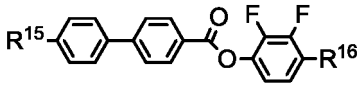

(10-10)

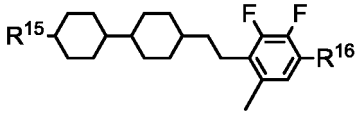

(10-11)

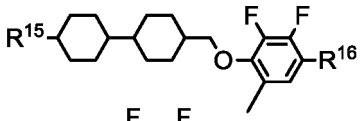

(10-12)

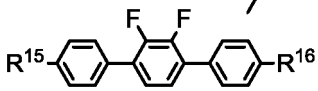

(10-13)

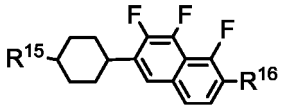

(10-14)

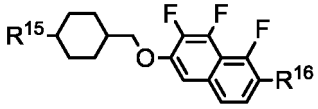

(10-15)

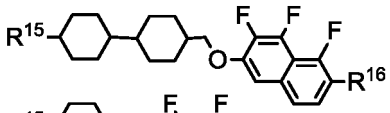

(10-16)

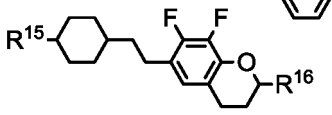

(10-17)

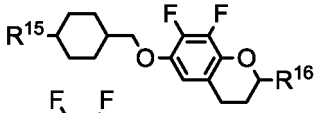

(11-1)

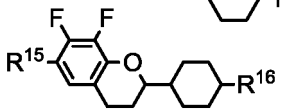

(12-1)

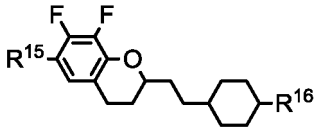

(12-2)

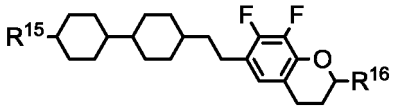

(12-3)

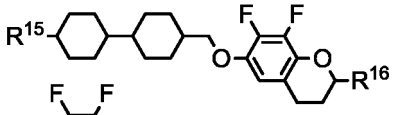

(13-1)

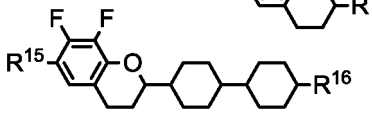

(13-2)

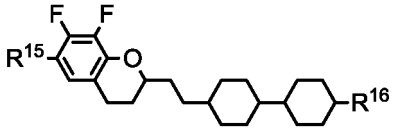

(13-3)


(13-4)

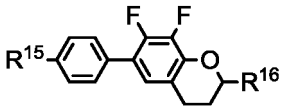

(13-5)

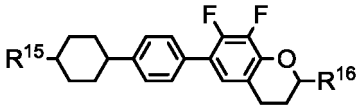

(13-6)

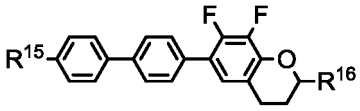

(13-7)

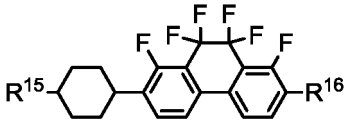

(13-8)

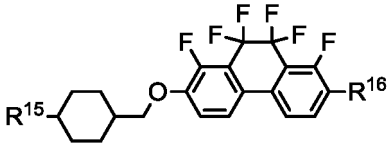
【０２１４】

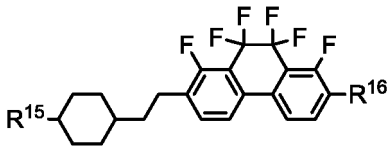

(13-9)

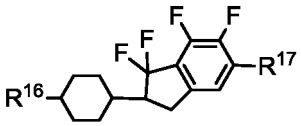

(13-10)

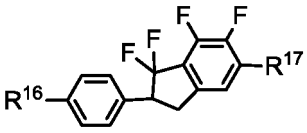

(13-11)

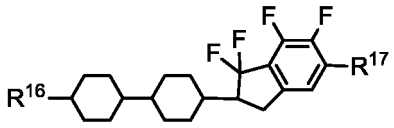

(14-1)


(14-2)


(14-3)


(15-1)


(15-2)


(15-3)

【０２１５】

成分Ｅは、誘電率異方性が負に大きい。成分Ｅは、ＩＰＳ、ＶＡ、ＰＳＡなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分Ｅの含有量を増加させるにつれて組成物の誘電率異方性が負に大きくなるが、粘度が大きくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量は少ないほうが好ましい。誘電率異方性が－５程度であることを考慮すると、充分な電圧駆動をさせるには、含有量が４０重量％以上であることが好ましい。

【０２１６】

成分Ｅのうち、化合物（９）は二環化合物であるので、主として、粘度の減少、光学異方性の調整、または誘電率異方性の増加に効果がある。化合物（１０）および（１１）は三環化合物であるので、上限温度を高くする、光学異方性を大きくする、または誘電率異方性を大きくするという効果がある。化合物（１２）から（１５）は、誘電率異方性を大きくするという効果がある。

【０２１７】

ＩＰＳ、ＶＡ、ＰＳＡなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分Ｅの含有量は、液晶組成物の重量に基づいて、好ましくは４０重量％以上であり、さらに好ましくは５０重量％から９５重量％の範囲である。成分Ｅを誘電率異方性が正である組成物に添加する場合は、成分Ｅの含有量が液晶組成物の重量に基づいて３０重量％以下が好ましい。成分Ｅを添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

【０２１８】

以上に述べた成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥを適切に組み合わせることによって、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数などの特性の少なくとも１つを充足する液晶組成物を調製することができる。必要に応じて、成分Ｂ、Ｃ、Ｄ、およびＥとは異なる液晶性化合物を添加してもよい。

【０２１９】

液晶組成物は公知の方法によって調製される。例えば、成分化合物を混合し、そして加熱によって互いに溶解させる。用途に応じて、この組成物に添加物を添加してよい。添加物の例は、式（１）および式（１６）以外の重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、消泡剤などである。このような添加物は当業者によく知られており、文献に記載されている。

【０２２０】

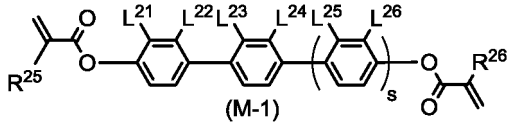
式（１６）や式（１６）以外の重合性化合物は、液晶組成物中に重合体を生成させる目

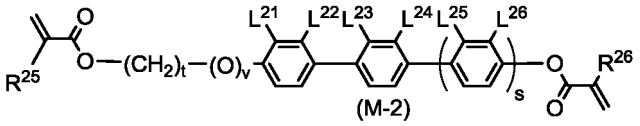
的で添加される。電極間に電圧を印加した状態で紫外線を照射して、重合性化合物と化合物（１）とを共重合させることによって、液晶組成物の中に重合体を生成させる。この際、化合物（１）は、極性基が基板表面と非共有結合的に相互作用した状態で固定化される。これにより、液晶分子の配向を制御する能力がさらに向上すると同時に、極性化合物が液晶組成物中に漏れ出す事が無くなる。また、基板表面においても、適切なプレチルトが得られるので、応答時間が短縮され、かつ電圧保持率の大きな液晶表示素子が得られる。重合性化合物の好ましい例は、アクリレート、メタクリレート、ビニル化合物、ビニルオキシ化合物、プロペニルエーテル、エポキシ化合物（オキシラン、オキセタン）、およびビニルケトンである。さらに好ましい例は、少なくとも１つのアクリロイルオキシを有する化合物および少なくとも１つのメタクリロイルオキシを有する化合物である。さらに好ましい例には、アクリロイルオキシとメタクリロイルオキシの両方を有する化合物も含まれる。

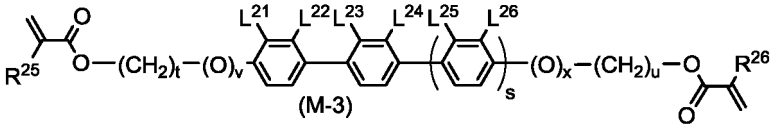
【０２２１】

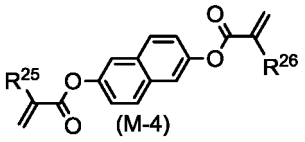
化合物（１α）を含む組成物において、さらに好ましい例は、化合物（Ｍ－１）から（Ｍ－１７）である。化合物（Ｍ－１）から（Ｍ－１７）において、R^{25}からR^{31}は独立して、水素またはメチルであり；ｓ、ｖ、およびｘは独立して、０または１であり；ｔおよびｕは独立して、１から１０の整数であり；L^{21}からL^{26}は独立して、水素またはフッ素であり、L^{27}およびL^{28}は独立して、水素、フッ素、またはメチルである。

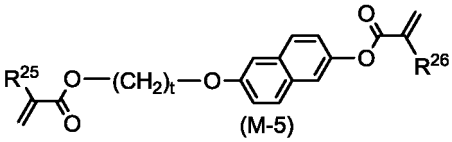
【０２２２】

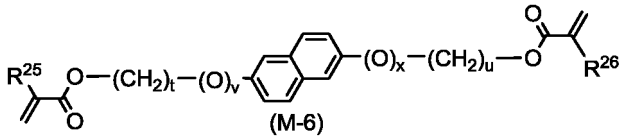

(M-1)

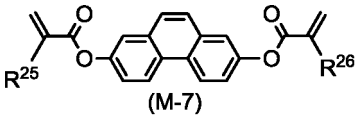

(M-2)

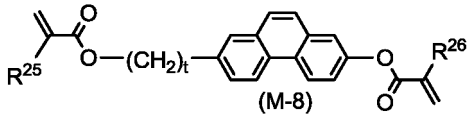

(M-3)

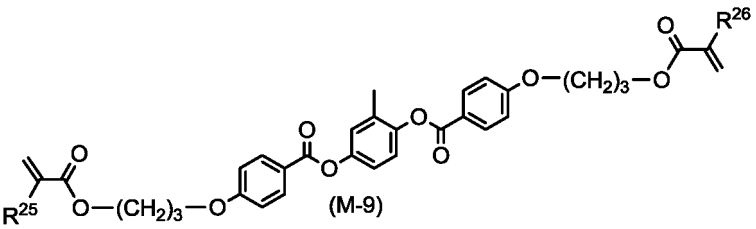

(M-4)

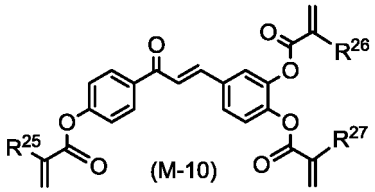

(M-5)

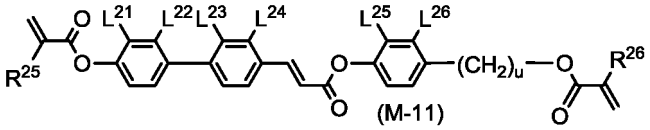

(M-6)

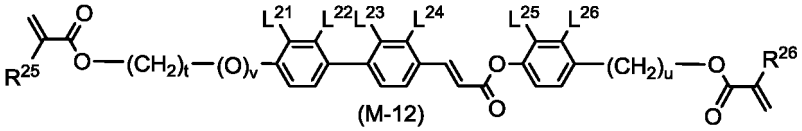

(M-7)

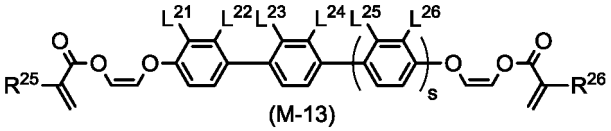

(M-8)

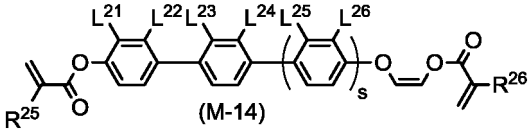

(M-9)

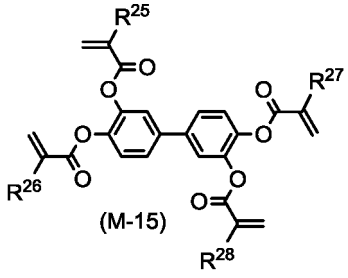

(M-10)

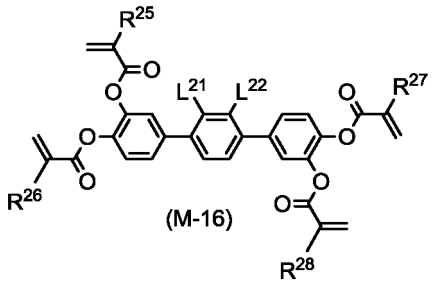

(M-11)

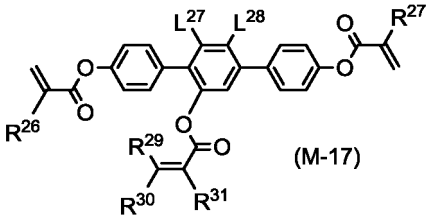

(M-12)


(M-13)


(M-14)


(M-15)


(M-16)

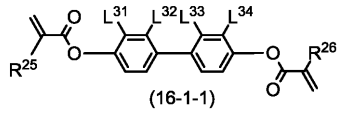

(M-17)

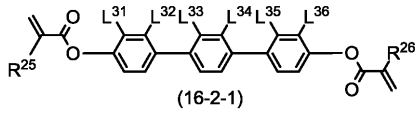
【０２２３】

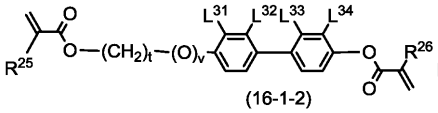
化合物（１β）または化合物（１γ）を含む組成物において、さらに好ましい例は、化

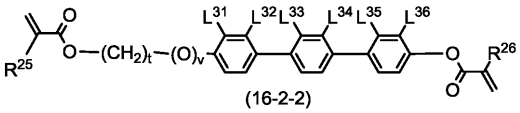
合物（１６－１－１）から（１６－１６）である。化合物（１６－１－１）から（１６－１６）において、Ｒ^{25}からＲ^{31}は独立して、水素またはメチルであり；ｖ、およびｘは独立して、０または１であり；ｔおよびｕは独立して、１から１０の整数であり；Ｌ^{31}からＬ^{36}は独立して、水素またはフッ素であり、Ｌ^{37}およびＬ^{38}は独立して、水素、フッ素、またはメチルである。

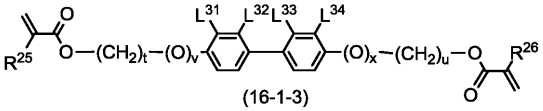
【０２２４】

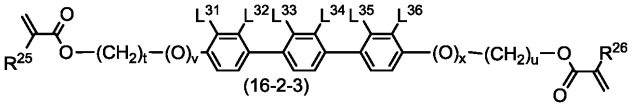

(16-1-1)

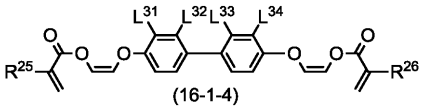

(16-2-1)

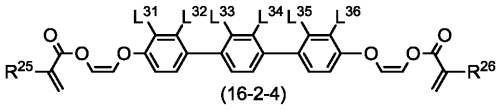

(16-1-2)

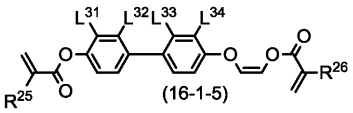

(16-2-2)

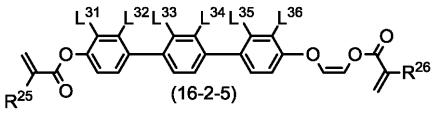

(16-1-3)

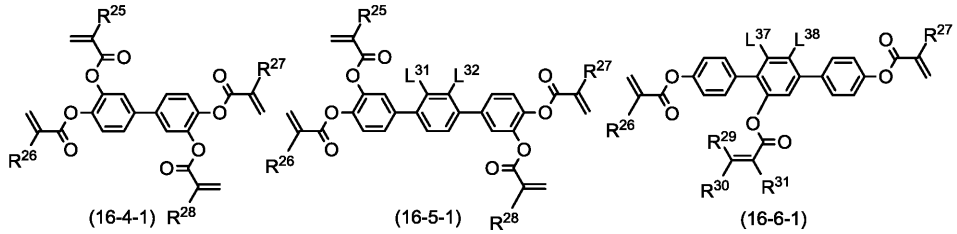

(16-2-3)


(16-1-4)

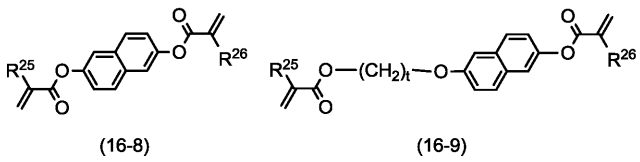

(16-2-4)


(16-1-5)

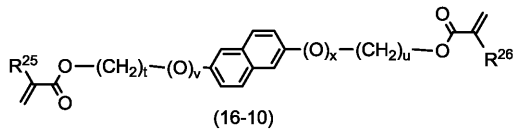

(16-2-5)



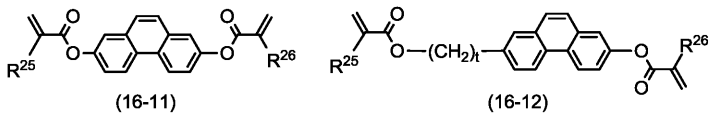
(16-4-1) (16-5-1) (16-6-1)



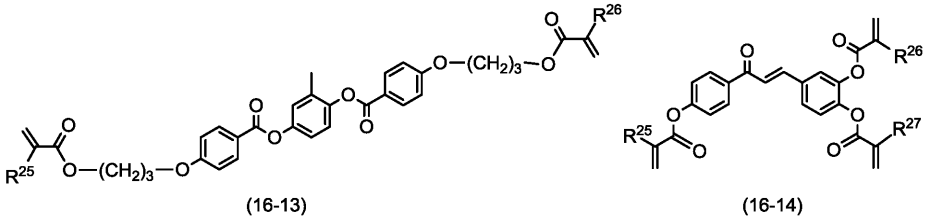
(16-8) (16-9)



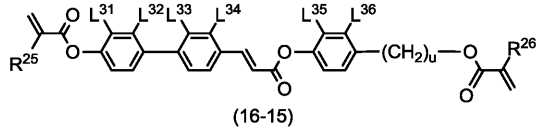
(16-10)



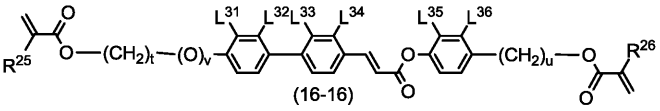
(16-11) (16-12)



(16-13) (16-14)



(16-15)



(16-16)

【０２２５】

重合性化合物は、重合開始剤を添加することによって、速やかに重合させることができる。反応温度を最適化することによって、残存する重合性化合物の量を減少させることができる。光ラジカル重合開始剤の例は、ＢＡＳＦ社のダロキュアシリーズからＴＰＯ、１１７３、および４２６５であり、イルガキュアシリーズから１８４、３６９、５００、６５１、７８４、８１９、９０７、１３００、１７００、１８００、１８５０、および２９５９である。

【０２２６】

光ラジカル重合開始剤の追加例は、４－メトキシフェニル－２，４－ビス（トリクロロメチル）トリアジン、２－（４－ブトキシスチリル）－５－トリクロロメチル－１，３，４－オキサジアゾール、９－フェニルアクリジン、９，１０－ベンズフェナジン、ベンゾフェノン／ミヒラーズケトン混合物、ヘキサアリールビイミダゾール／メルカプトベンズイミダゾール混合物、１－（４－イソプロピルフェニル）－２－ヒドロキシ－２－メチルプロパン－１－オン、ベンジルジメチルケタール、２－メチル－１－［４－（メチルチオ）フェニル］－２－モルホリノプロパン－１－オン、２，４－ジエチルキサントン／ｐ－ジメチルアミノ安息香酸メチル混合物、ベンゾフェノン／メチルトリエタノールアミン混

合物である。

【０２２７】

液晶組成物に光ラジカル重合開始剤を添加したあと、電場を印加した状態で紫外線を照射することによって重合を行うことができる。しかし、未反応の重合開始剤または重合開始剤の分解生成物は、素子に画像の焼き付きなどの表示不良を引き起こすかもしれない。これを防ぐために重合開始剤を添加しないまま光重合を行ってもよい。照射する光の好ましい波長は１５０ｎｍから５００ｎｍの範囲である。さらに好ましい波長は２５０ｎｍから４５０ｎｍの範囲であり、最も好ましい波長は３００ｎｍから４００ｎｍの範囲である。

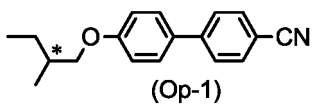
【０２２８】

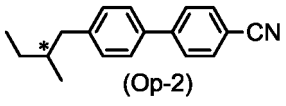
重合性化合物を保管するとき、重合を防止するために重合禁止剤を添加してもよい。重合性化合物は、通常は重合禁止剤を除去しないまま組成物に添加される。重合禁止剤の例は、ヒドロキノン、メチルヒドロキノンのようなヒドロキノン誘導体、４－ｔ－ブチルカテコール、４－メトキシフェノール、フェノチアジンなどである。

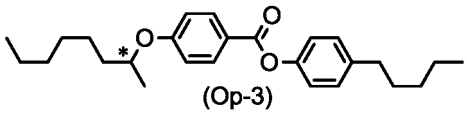
【０２２９】

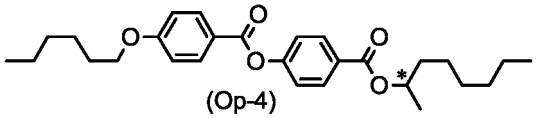
光学活性化合物は、液晶分子にらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与えることによって逆ねじれを防ぐ、という効果を有する。光学活性化合物を添加することによって、らせんピッチを調整することができる。らせんピッチの温度依存性を調整する目的で２つ以上の光学活性化合物を添加してもよい。光学活性化合物の好ましい例として、下記の化合物（Ｏｐ－１）から（Ｏｐ－１８）を挙げることができる。化合物（Ｏｐ－１８）において、環Ｊは１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであり、R^{28}は炭素数１から１０のアルキルである。

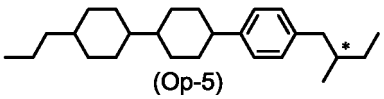
【０２３０】

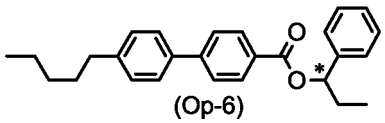

(Op-1)

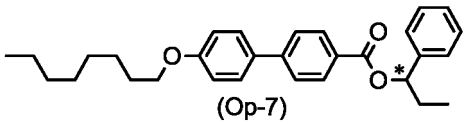

(Op-2)

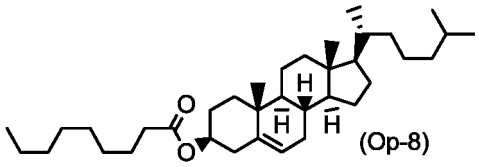

(Op-3)

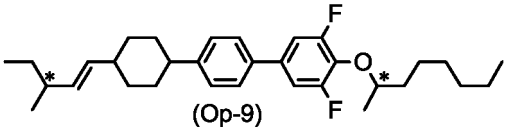

(Op-4)

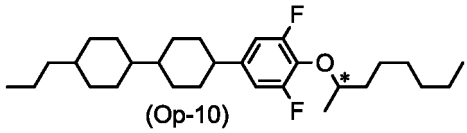

(Op-5)

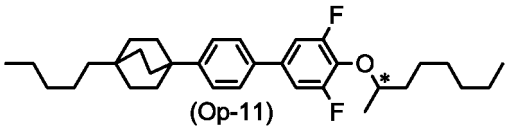

(Op-6)

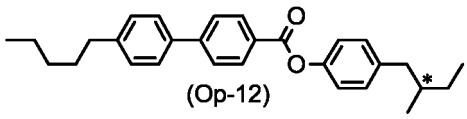

(Op-7)

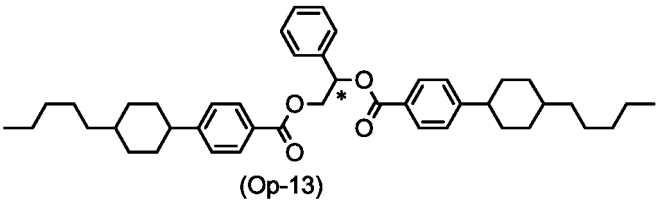

(Op-8)

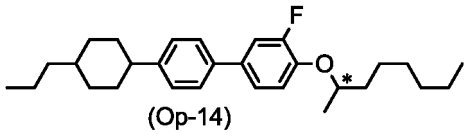

(Op-9)

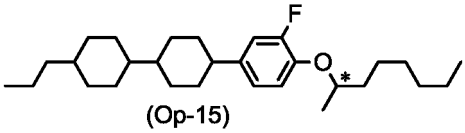

(Op-10)

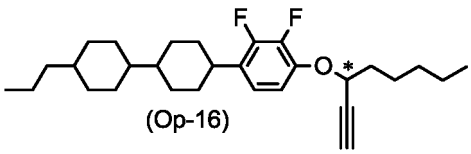

(Op-11)

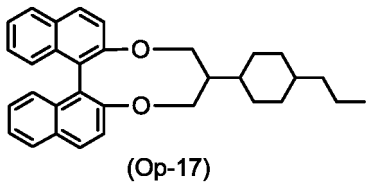

(Op-12)

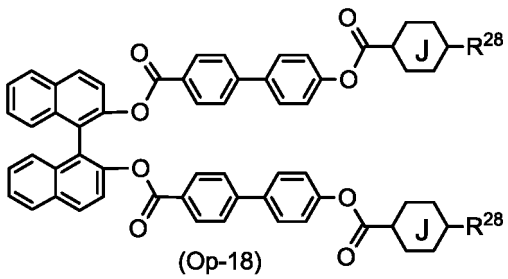

(Op-13)


(Op-14)


(Op-15)


(Op-16)


(Op-17)


(Op-18)

【０２３１】

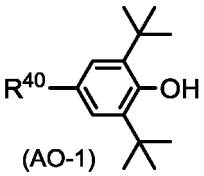
酸化防止剤は、大きな電圧保持率を維持するために有効である。酸化防止剤の好ましい例として、下記の化合物（ＡＯ－１）および（ＡＯ－２）；ＩＲＧＡＮＯＸ　４１５、ＩＲＧＡＮＯＸ　５６５、ＩＲＧＡＮＯＸ　１０１０、ＩＲＧＡＮＯＸ　１０３５、ＩＲＧＡＮＯＸ　３１１４、およびＩＲＧＡＮＯＸ　１０９８（商品名：ＢＡＳＦ社）を挙げる

ことができる。紫外線吸収剤は、上限温度の低下を防ぐために有効である。紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。具体例として下記の化合物（ＡＯ－３）および（ＡＯ－４）；ＴＩＮＵＶＩＮ３２９、ＴＩＮＵＶＩＮ Ｐ、ＴＩＮＵＶＩＮ ３２６、ＴＩＮＵＶＩＮ ２３４、ＴＩＮＵＶＩＮ ２１３、ＴＩＮＵＶＩＮ ４００、ＴＩＮＵＶＩＮ ３２８、およびＴＩＮＵＶＩＮ ９９－２（商品名：ＢＡＳＦ社）；および１，４－ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン（ＤＡＢＣＯ）を挙げることができる。

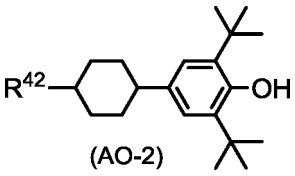
【０２３２】

立体障害のあるアミンのような光安定剤は、大きな電圧保持率を維持するために好ましい。光安定剤の好ましい例として、下記の化合物（ＡＯ－５）および（ＡＯ－６）；ＴＩＮＵＶＩＮ １４４、ＴＩＮＵＶＩＮ ７６５、およびＴＩＮＵＶＩＮ ７７０ＤＦ（商品名：ＢＡＳＦ社）を挙げることができる。熱安定剤も大きな電圧保持率を維持するために有効であり、好ましい例としてＩＲＧＡＦＯＳ １６８（商品名：ＢＡＳＦ社）を挙げることができる。消泡剤は、泡立ちを防ぐために有効である。消泡剤の好ましい例は、ジメチルシリコーンオイル、メチルフェニルシリコーンオイルなどである。

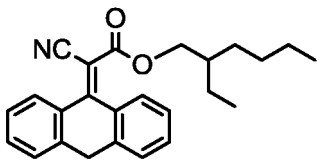
【０２３３】



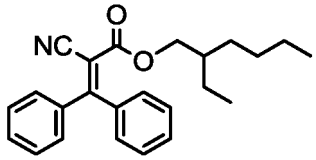
(AO-1)



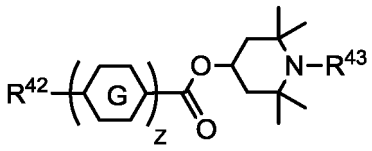
(AO-2)



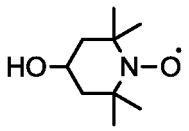
(AO-3)



(AO-4)



(AO-5)



(AO-6)

【０２３４】

化合物（ＡＯ－１）において、Ｒ^{40}は炭素数１から２０のアルキル、炭素数１から２０のアルコキシ、－ＣＯＯＲ^{41}、または－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$ＣＯＯＲ^{41}であり、ここでＲ^{41}は炭素数１から２０のアルキルである。化合物（ＡＯ－２）および（ＡＯ－５）において、Ｒ^{42}は炭素数１から２０のアルキルである。化合物（ＡＯ－５）において、Ｒ^{43}は水素、メチル、またはＯ・（酸素ラジカル）であり、環Ｇは１，４－シクロヘキシレンまたは１，４－フェニレンであり、ｚは１、２、または３である。

【０２３５】

≪１７．液晶表示素子≫

上記の液晶組成物は、ＰＣ、ＴＮ、ＳＴＮ、ＯＣＢ、ＰＳＡなどの動作モードを有し、アクティブマトリックス方式で駆動する液晶表示素子に使用できる。この組成物は、ＰＣ、ＴＮ、ＳＴＮ、ＯＣＢ、ＶＡ、ＩＰＳなどの動作モードを有し、パッシブマトリクス方式で駆動する液晶表示素子にも使用することができる。これらの素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。

【０２３６】

この組成物は、ネマチック液晶をマイクロカプセル化して作製したＮＣＡＰ（nematic curvilinear aligned phase）素子、液晶中に三次元網目状高分子を形成して作製したポリマー分散型液晶表示素子（ＰＤＬＣＤ）、そしてポリマーネットワーク液晶表示素子（ＰＮＬＣＤ）にも使用できる。重合性化合物（化合物（１）、化合物（１６）、これら以外の重合性化合物の総量）の添加量が液晶組成物の重量に基づいて約１０重量％以下であるとき、ＰＳＡモードの液晶表示素子が作製される。好ましい割合は約０．１重量％から

約２重量％の範囲である。さらに好ましい割合は、約０．２重量％から約１．０重量％の範囲である。ＰＳＡモードの素子は、アクティブマトリックス、パッシブマトリクスのような駆動方式で駆動させることができる。このような素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。重合性化合物の添加量を増やすことによって、高分子分散（polymer dispersed）モードの素子も作製することができる。

【０２３７】

高分子支持配向型の素子では、組成物に含まれる重合体が液晶分子を配向させる。極性化合物は、液晶分子が配列するのを援助する。すなわち、極性化合物は、配向膜の代わりに用いることができる。このような素子を製造する方法の一例は、次のとおりである。アレイ基板とカラーフィルタ基板と呼ばれる２つの基板を有する素子を用意する。この基板は配向膜を有しない。この基板の少なくとも１つは、電極層を有する。液晶性化合物を混合して液晶組成物を調製する。この組成物に重合性化合物および極性化合物を添加する。必要に応じて添加物をさらに添加してもよい。この組成物を素子に注入する。この素子に電圧を印加した状態で光照射する。紫外線が好ましい。光照射によって重合性化合物を重合させる。この重合によって、重合体を含む組成物が生成し、ＰＳＡモードを有する素子が作製される。

【０２３８】

この手順において、極性化合物は、極性基が基板表面と相互作用するので、基板上に配列する。この極性化合物が、液晶分子を配向させる。電圧を印加したとき、電場の作用によって液晶分子の配向がさらに促進される。この配向に従って重合性化合物も配向する。この状態で重合性化合物が紫外線によって重合するので、この配向を維持した重合体が生成する。この重合体の効果によって、液晶分子の配向が追加的に安定化するので、素子の応答時間が短縮される。画像の焼き付きは、液晶分子の動作不良であるから、この重合体の効果によって焼き付きも同時に改善されることになる。特に本発明に用いる化合物（１）は重合性の極性化合物である為、液晶分子を配向させると共に、単独重合する、または、他の重合性化合物としての反応性モノマーと共重合する。これによって本発明は、極性化合物が液晶組成物中に漏れ出す事が無くなる為、電圧保持率の大きな液晶表示素子が得られる。

【０２３９】

図１に、極性基と基板表面との相互作用により、配向性モノマー５として機能する化合物（１）が、カラーフィルタ基板１とアレイ基板２上に配列した状態の素子１１を示す。化合物（１）の重合により配向制御層を形成する。図２に、極性基と基板表面との相互作用により、配向性モノマー５として機能する化合物（１）が、カラーフィルタ基板１とアレイ基板２上に配列した状態の素子１２を示す。化合物（１）と反応性モノマー６として機能する化合物（１６）との共重合により配向制御層を形成する。図３は、従来の配向膜を有し重合性化合物を含む素子２１の概略図である。

なお、本発明の液晶表示素子は、図１～図２に示すようなアレイ基板２とカラーフィルタ基板１の２つの基板を有する構造の素子に限られず、例えば、ＴＦＴ基板上にカラーフィルタ（ＣＦ）を形成したカラーフィルター・オン・アレイ（ＣＯＡ）構造の素子であってもよく、当然にこれら以外の構造の素子であってもよい。

【０２４０】

基板上に配列した化合物（１）は、紫外線の照射により重合しそれぞれの基板上で配向制御層を形成する。配向制御層の１層（片側のみ）の厚みは１０～１００ｎｍであり、好ましくは１０～８０ｎｍであり、より好ましくは２０～８０ｎｍである。１０ｎｍ以上であると、電気特性を維持できるため好ましい。１００ｎｍ以下であると、駆動電圧を適切に下げることができるため好ましい。

【０２４１】

このように、本願の液晶表示素子は配向制御層を形成できるため、液晶性化合物を基板面に対して垂直配向させる。このときの液晶性化合物と基板面との角度（すなわちプレチルト角）は、９０°±１０°であり、好ましくは９０°±５°であり、より好ましくは９

０°±３°である。９０°±１０°であると、光学特性の観点から好ましい。
配向制御層により液晶性化合物にプレチルト角を付与することができると、スリットを有する画素分割した画素電極と組み合わせることにより、画素分割による広視野角を達成できる。

【０２４２】

本発明の一実施例である垂直配向（ＶＡ）型液晶表示素子では、電圧無印加時に液晶分子の配向方向は基板面に対して略垂直配向する。通常、液晶分子を垂直配向させるためには、図３のように、カラーフィルタ基板１と液晶層３との間、アレイ基板２と液晶層３との間に、それぞれポリイミド、ポリアミド、ポリシロキサン等の垂直配向膜が配置されるが、本発明の液晶表示素子は、このような配向膜を必要としない。

【実施例】

【０２４３】

実施例（合成例を含む）により、本発明をさらに詳しく説明する。本発明はこれらの実施例によっては制限されない。本発明は、組成物（ｉ）と組成物（ｉｉ）との混合物を含む。本発明は、組成物の少なくとも２つを混合することによって調製した混合物をも含む。

【０２４４】

［１．測定方法］

特に記載のないかぎり、反応は窒素雰囲気下で行った。化合物（１）は、合成例などに示した手順により合成した。合成した化合物は、ＮＭＲ分析などの方法により同定した。化合物（１）、液晶性化合物、組成物、素子の特性は、下記の方法により測定した。

【０２４５】

ＮＭＲ分析：測定には、ブルカーバイオスピン社製のＤＲＸ－５００を用いた。^{1}Ｈ－ＮＭＲの測定では、試料を$CDCl_3$などの重水素化溶媒に溶解させ、測定は、室温で、５００ＭＨｚ、積算回数１６回の条件で行った。テトラメチルシランを内部標準として用いた。^{19}Ｆ－ＮＭＲの測定では、$CFCl_3$を内部標準として用い、積算回数２４回で行った。核磁気共鳴スペクトルの説明において、ｓはシングレット、ｄはダブレット、ｔはトリプレット、ｑはカルテット、ｑｕｉｎはクインテット、ｓｅｘはセクステット、ｍはマルチプレット、ｂｒはブロードであることを意味する。

【０２４６】

ガスクロマト分析：測定には、島津製作所製のＧＣ－２０１０型ガスクロマトグラフを用いた。カラムは、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムＤＢ－１（長さ６０ｍ、内径０．２５ｍｍ、膜厚０．２５μｍ）を用いた。キャリアーガスとしてはヘリウム（１ｍｌ／分）を用いた。試料気化室の温度を３００℃、検出器（ＦＩＤ）部分の温度を３００℃に設定した。試料はアセトンに溶解して、１重量％の溶液となるように調製し、得られた溶液１μｌを試料気化室に注入した。記録計には島津製作所製のＧＣＳｏｌｕｔｉｏｎシステムなどを用いた。

【０２４７】

ＨＰＬＣ分析：測定には、島津製作所製のＰｒｏｍｉｎｅｎｃｅ（ＬＣ－２０ＡＤ；ＳＰＤ－２０Ａ）を用いた。カラムはワイエムシー製のＹＭＣ－Ｐａｃｋ　ＯＤＳ－Ａ（長さ１５０ｍｍ、内径４．６ｍｍ、粒子径５μｍ）を用いた。溶出液はアセトニトリルと水を適宜混合して用いた。検出器としてはＵＶ検出器、ＲＩ検出器、ＣＯＲＯＮＡ検出器などを適宜用いた。ＵＶ検出器を用いた場合、検出波長は２５４ｎｍとした。試料はアセトニトリルに溶解して、０．１重量％の溶液となるように調製し、この溶液１μＬを試料室に導入した。記録計としては島津製作所製のＣ－Ｒ７Ａｐｌｕｓを用いた。

【０２４８】

紫外可視分光分析：測定には、島津製作所製のＰｈａｒｍａＳｐｅｃ　ＵＶ－１７００用いた。検出波長は１９０ｎｍから７００ｎｍとした。試料はアセトニトリルに溶解して、０．０１ｍｍｏｌ／Ｌの溶液となるように調製し、石英セル（光路長１ｃｍ）に入れて測定した。

【０２４９】
測定試料：相構造および転移温度（透明点、融点、重合開始温度など）を測定するときには、化合物そのものを試料として用いた。
【０２５０】
測定方法：特性の測定は下記の方法で行った。これらの多くは、社団法人電子情報技術産業協会（ＪＥＩＴＡ；Japan Electronics and Information Technology Industries Association）で審議制定されるＪＥＩＴＡ規格（ＪＥＩＴＡ・ＥＤ－２５２１Ｂ）に記載された方法、またはこれを修飾した方法であった。測定に用いたＴＮ素子には、薄膜トランジスター（ＴＦＴ）を取り付けなかった。
【０２５１】
（１）相構造
偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレート（メトラー社ＦＰ－５２型ホットステージ）に試料を置いた。この試料を、３℃／分の速度で加熱しながら相状態とその変化を偏光顕微鏡で観察し、相の種類を特定した。
【０２５２】
（２）転移温度（℃）
測定には、パーキンエルマー社製の走査熱量計、Ｄｉａｍｏｎｄ　ＤＳＣシステムまたはエスエスアイ・ナノテクノロジー社製の高感度示差走査熱量計、Ｘ－ＤＳＣ７０００を用いた。試料は、３℃／分の速度で昇降温し、試料の相変化に伴う吸熱ピークまたは発熱ピークの開始点を外挿により求め、転移温度を決定した。化合物の融点、重合開始温度もこの装置を使って測定した。化合物が固体からスメクチック相、ネマチック相などの液晶相に転移する温度を「液晶相の下限温度」と略すことがある。化合物が液晶相から液体に転移する温度を「透明点」と略すことがある。
【０２５３】
結晶はＣと表した。結晶の種類の区別がつく場合は、それぞれをC_1、C_2のように表した。スメクチック相はＳ、ネマチック相はＮと表した。スメクチック相の中で、スメクチックＡ相、スメクチックＢ相、スメクチックＣ相、またはスメクチックＦ相の区別がつく場合は、それぞれS_A、S_B、S_C、またはS_Fと表した。液体（アイソトロピック）はＩと表した。転移温度は、例えば、「Ｃ　５０．０　Ｎ　１００．０　Ｉ」のように表記した。これは、結晶からネマチック相への転移温度が５０．０℃であり、ネマチック相から液体への転移温度が１００．０℃であることを示す。
【０２５４】
（３）ネマチック相の上限温度（T_{NI}またはＮＩ；℃）
偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレートに試料を置き、１℃／分の速度で加熱した。試料の一部がネマチック相から等方性液体に変化したときの温度を測定した。ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。試料が化合物（１）と母液晶との混合物であるときは、T_{NI}の記号で示した。試料が化合物（１）と成分Ｂ、Ｃ、Ｄのような化合物との混合物であるときは、ＮＩの記号で示した。
【０２５５】
（４）ネマチック相の下限温度（T_C；℃）
ネマチック相を有する試料を０℃、－１０℃、－２０℃、－３０℃、および－４０℃のフリーザー中に１０日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が－２０℃ではネマチック相のままであり、－３０℃では結晶またはスメクチック相に変化したとき、T_Cを≦－２０℃と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。
【０２５６】
（５）粘度（バルク粘度；η；２０℃で測定；ｍＰａ・ｓ）
測定には、東京計器株式会社製のＥ型回転粘度計を用いた。
【０２５７】
（６）光学異方性（屈折率異方性；２５℃で測定；Δｎ）
測定は、波長５８９ｎｍの光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッベ屈折計により

行った。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率（ｎ∥）は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率（ｎ⊥）は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学異方性（Δｎ）の値は、Δｎ＝ｎ∥－ｎ⊥、の式から計算した。

【０２５８】

（７）比抵抗（ρ；２５℃で測定；Ωｃｍ）

電極を備えた容器に試料１．０ｍＬを注入した。この容器に直流電圧（１０Ｖ）を印加し、１０秒後の直流電流を測定した。比抵抗は次の式から算出した。（比抵抗）＝｛（電圧）×（容器の電気容量）｝／｛（直流電流）×（真空の誘電率）｝。

【０２５９】

誘電率異方性が正の試料と負の試料とでは、特性の測定法が異なることがある。誘電率異方性が正であるときの測定法は、項（８ａ）から（１２ａ）に記載した。誘電率異方性が負の場合は、項（８ｂ）から（１２ｂ）に記載した。

【０２６０】

（８ａ）粘度（回転粘度；γ１；２５℃で測定；ｍＰａ・ｓ）

正の誘電率異方性：測定は、M. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。ツイスト角が０度であり、そして２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が５μｍであるＴＮ素子に試料を入れた。この素子に１６Ｖから１９．５Ｖの範囲で０．５Ｖ毎に段階的に印加した。０．２秒の無印加のあと、ただ１つの矩形波（矩形パルス；０．２秒）と無印加（２秒）の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流（transient current）のピーク電流（peak current）とピーク時間（peak time）を測定した。これらの測定値とＭ．Ｉｍａｉらの論文、４０頁の計算式（８）とから回転粘度の値を得た。この計算で必要な誘電率異方性の値は、この回転粘度を測定した素子を用い、下に記載した方法で求めた。

【０２６１】

（８ｂ）粘度（回転粘度；γ１；２５℃で測定；ｍＰａ・ｓ）

負の誘電率異方性：測定は、M. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が２０μｍのＶＡ素子に試料を入れた。この素子に３９ボルトから５０ボルトの範囲で１ボルト毎に段階的に印加した。０．２秒の無印加のあと、ただ１つの矩形波（矩形パルス；０．２秒）と無印加（２秒）の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流（transient current）のピーク電流（peak current）とピーク時間（peak time）を測定した。これらの測定値とＭ．Ｉｍａｉらの論文、４０頁の計算式（８）とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性は、下記の誘電率異方性の項で測定した値を用いた。

【０２６２】

（９ａ）誘電率異方性（Δε；２５℃で測定）

正の誘電率異方性：２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が９μｍであり、そしてツイスト角が８０度であるＴＮ素子に試料を入れた。この素子にサイン波（１０Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率（ε∥）を測定した。この素子にサイン波（０．５Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率（ε⊥）を測定した。誘電率異方性の値は、Δε＝ε∥－ε⊥、の式から計算した。

【０２６３】

（９ｂ）誘電率異方性（Δε；２５℃で測定）

負の誘電率異方性：誘電率異方性の値は、Δε＝ε∥－ε⊥、の式から計算した。誘電率（ε∥およびε⊥）は次のように測定した。

１）誘電率（ε∥）の測定：よく洗浄したガラス基板にオクタデシルトリエトキシシラン（０．１６ｍＬ）のエタノール（２０ｍＬ）溶液を塗布した。ガラス基板をスピンナーで回転させたあと、１５０℃で１時間加熱した。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）

が４μｍであるＶＡ素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子にサイン波（０．５Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率（ε∥）を測定した。
２）誘電率（ε⊥）の測定：よく洗浄したガラス基板にポリイミド溶液を塗布した。このガラス基板を焼成した後、得られた配向膜にラビング処理をした。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が９μｍであり、ツイスト角が８０度であるＴＮ素子に試料を入れた。この素子にサイン波（０．５Ｖ、１ｋＨｚ）を印加し、２秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率（ε⊥）を測定した。

【０２６４】

（１０ａ）弾性定数（Ｋ；２５℃で測定；ｐＮ）

正の誘電率異方性：測定には横河・ヒューレットパッカード株式会社製のＨＰ４２８４Ａ型ＬＣＲメータを用いた。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が２０μｍである水平配向素子に試料を入れた。この素子に０ボルトから２０ボルト電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。測定した静電容量（Ｃ）と印加電圧（Ｖ）の値を「液晶デバイスハンドブック」（日刊工業新聞社）、７５頁にある式（２．９８）、式（２．１０１）を用いてフィッティングし、式（２．９９）からK_{11}およびK_{33}の値を得た。次に１７１頁にある式（３．１８）に、先ほど求めたK_{11}およびK_{33}の値を用いてK_{22}を算出した。弾性定数Ｋは、このようにして求めたK_{11}、K_{22}およびK_{33}の平均値で表した。

【０２６５】

（１０ｂ）弾性定数（K_{11}およびK_{33}；２５℃で測定；ｐＮ）

負の誘電率異方性：測定には株式会社東陽テクニカ製のＥＣ－１型弾性定数測定器を用いた。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が２０μｍである垂直配向素子に試料を入れた。この素子に２０ボルトから０ボルト電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。静電容量（Ｃ）と印加電圧（Ｖ）の値を、「液晶デバイスハンドブック」（日刊工業新聞社）、７５頁にある式（２．９８）、式（２．１０１）を用いてフィッティングし、式（２．１００）から弾性定数の値を得た。

【０２６６】

（１１ａ）しきい値電圧（Ｖｔｈ；２５℃で測定；Ｖ）

正の誘電率異方性：測定には大塚電子株式会社製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が０．４５／Δｎ（μｍ）であり、ツイスト角が８０度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）のＴＮ素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧（３２Ｈｚ、矩形波）は０Ｖから１０Ｖまで０．０２Ｖずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率１００％であり、この光量が最小であったときが透過率０％である電圧－透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が９０％になったときの電圧で表した。

【０２６７】

（１１ｂ）しきい値電圧（Ｖｔｈ；２５℃で測定；Ｖ）

負の誘電率異方性：測定には大塚電子株式会社製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が４μｍであり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード（normally black mode）のＶＡ素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子に印加する電圧（６０Ｈｚ、矩形波）は０Ｖから２０Ｖまで０．０２Ｖずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率１００％であり、この光量が最小であったときが透過率０％である電圧－透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が１０％になったときの電圧で表した。

【０２６８】

（１２ａ）応答時間（τ；２５℃で測定；ｍｓ）

正の誘電率異方性：測定には大塚電子株式会社製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。ローパス・フィルター（Low-pass filter）は５ｋＨｚに設定した。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が５．０μｍであり、ツイスト角が８０度であるノーマリーホワイトモード（normally white mode）のＴＮ素子に試料を入れた。この素子に矩形波（６０Ｈｚ、５Ｖ、０．５秒）を印加した。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率１００％であり、この光量が最小であったときが透過率０％であるとみなした。立ち上がり時間（τｒ：rise time；ミリ秒）は、透過率が９０％から１０％に変化するのに要した時間である。立ち下がり時間（τｆ：fall time；ミリ秒）は透過率１０％から９０％に変化するのに要した時間である。応答時間は、このようにして求めた立ち上がり時間と立ち下がり時間との和で表した。

【０２６９】

（１２ｂ）応答時間（τ；２５℃で測定；ｍｓ）

負の誘電率異方性：測定には大塚電子株式会社製のＬＣＤ５１００型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。ローパス・フィルター（Low-pass filter）は５ｋＨｚに設定した。２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．２μｍであり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード（normally black mode）のＰＶＡ素子に試料を入れた。この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子にしきい値電圧を若干超える程度の電圧を１分間印加し、次に５．６Ｖの電圧を印加しながら２３．５ｍＷ／ｃｍ^{2}の紫外線を８分間照射した。この素子に矩形波（６０Ｈｚ、１０Ｖ、０．５秒）を印加した。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率１００％であり、この光量が最小であったときが透過率０％であるとみなした。応答時間は透過率９０％から１０％に変化するのに要した時間（立ち下がり時間；fall time；ミリ秒）で表した。

【０２７０】

（１３）電圧保持率

アイグラフィックス株式会社製ブラックライト、Ｆ４０Ｔ１０／ＢＬ（ピーク波長３６９ｎｍ）を用いて紫外線を照射することによって、重合性化合物を重合させた。この素子に６０℃でパルス電圧（１Ｖで６０マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で１．６７秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Ａを求めた。面積Ｂは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Ｂに対する面積Ａの百分率で表した。

【０２７１】

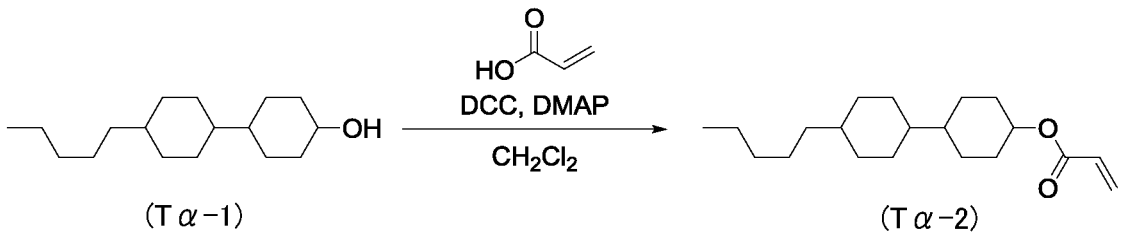
原料

ソルミックス（登録商標）Ａ－１１は、エタノール（８５．５％）、メタノール（１３．４％）とイソプロパノール（１．１％）の混合物であり、日本アルコール販売株式会社から入手した。

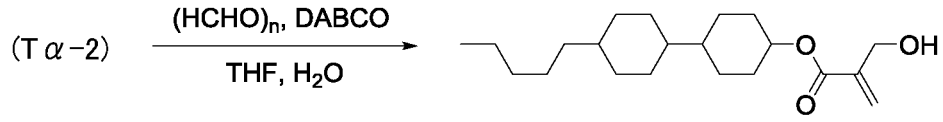
【０２７２】

［２．化合物（１α）の合成例］

合成例１α：化合物（１α－４－２）の合成



(Tα-1) (Tα-2)



(Tα-2) (1α-4-2)

【０２７３】

第１工程

化合物（Ｔα－１）（２５．０ｇ）、アクリル酸（７．１４ｇ）、ＤＭＡＰ（１．２１ｇ）、およびジクロロメタン（３００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（２４．５ｇ）のジクロロメタン（１２５ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：トルエン＝２：１）で精製した。さらにソルミックス（登録商標）Ａ－１１からの再結晶により精製して、化合物（Ｔα－２）（１１．６ｇ；３８％）を得た。

【０２７４】

第２工程

パラホルムアルデヒド（２．７５ｇ）、ＤＡＢＣＯ（４．６２ｇ）、および水（４０ｍｌ）を反応器に入れ、室温で１５分間撹拌した。そこへ化合物（Ｔα－２）（６．３１ｇ）のＴＨＦ（９０ｍｌ）溶液を滴下し、室温で７２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝５：１）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（１α－４－２）（１．９７ｇ；２９％）を得た。

【０２７５】

得られた化合物（１α－４－２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：６．２３（ｓ，１Ｈ）、５．７９（ｄ，Ｊ＝１．２Ｈｚ，１Ｈ）、４．７９－４．７０（ｍ，１Ｈ）、４．３２（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、２．２９（ｔ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，１Ｈ）、２．０７－２．００（ｍ，２Ｈ）、１．８３－１．６７（ｍ，６Ｈ）、１．４２－１．１８（ｍ，８Ｈ）、１．１８－０．９１（ｍ，９Ｈ）、０．９１－０．７９（ｍ，５Ｈ）．

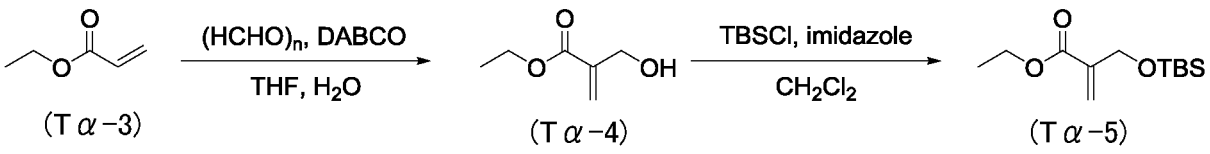
【０２７６】

化合物（１α－４－２）の物性は、次のとおりであった。

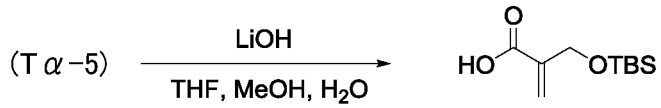
転移温度：Ｃ　４０．８　Ｓ$_A$　１０９　Ｉ．

【０２７７】

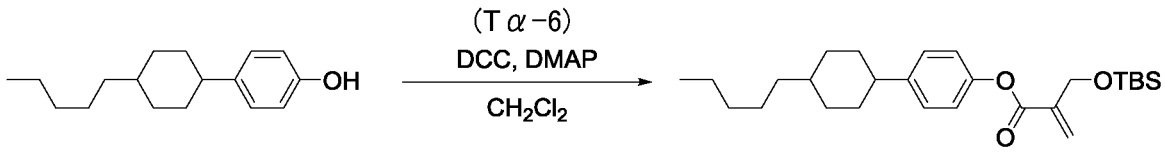
合成例２α：化合物（１α－４－２２）の合成



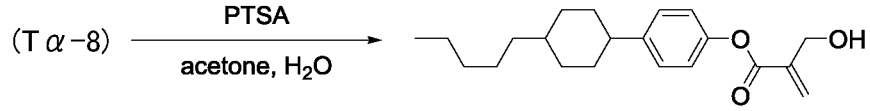
(Tα-3) (Tα-4) (Tα-5)



(Tα-6)



(Tα-7) (Tα-8)



(1α-4-22)

【０２７８】

第１工程

化合物（Ｔα－３）（５０．０ｇ）を原料として用い、合成例１αの第２工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－４）（４２．５ｇ；６５％）を得た。

【０２７９】

第２工程

化合物（Ｔα－４）（４２．５ｇ）、イミダゾール（２４．５ｇ）、およびジクロロメタン（７４０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへｔ－ブチルジメチルシリルクロリド（５４．１ｇ）のジクロロメタン（１１０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝１０：１）で精製して、化合物（Ｔα－５）（７９．８ｇ；１００％）を得た。

【０２８０】

第３工程

化合物（Ｔα－５）（７９．８ｇ）、ＴＨＦ（６４０ｍｌ）、メタノール（１６０ｍｌ）、および水（８０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ水酸化リチウム一水和物（２７．４ｇ）を加え、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、６Ｎ塩酸（１５ｍｌ）をゆっくりと加え酸性にした後、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮して、化合物（Ｔα－６）（６０．６ｇ；８６％）を得た。

【０２８１】

第４工程

化合物（Ｔα－７）（２．８３ｇ）、化合物（Ｔα－６）（２．９８ｇ）、ＤＭＡＰ（０．１４０ｇ）、およびジクロロメタン（８０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（２．８４ｇ）のジクロロメタン（４０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、

ヘプタン：トルエン＝２：１）で精製して、化合物（Ｔα－８）（３．２２ｇ；６３％）を得た。

【０２８２】

第５工程

化合物（Ｔα－８）（３．２２ｇ）、ｐ－トルエンスルホン酸一水和物（ＰＴＳＡ、０．５５１ｇ）、アセトン（５０ｍｌ）、および水（３．５ｍｌ）を反応器に入れ、室温で１時間攪拌した。次にピリジン（０．３０ｍｌ）を加えた後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝２：１）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（１α－４－２２）（２．０５ｇ；８６％）を得た。

【０２８３】

得られた化合物（１α－４－２２）のＮＭＲ分析値は、以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．２３（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，２Ｈ）、７．０３（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，２Ｈ）、６．５０（ｓ，１Ｈ）、６．０３（ｄ，Ｊ＝１．０Ｈｚ，１Ｈ）、４．４４（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、２．４７（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，１Ｈ）、２．２４（ｔ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，１Ｈ）、１．９３－１．８３（ｍ，４Ｈ）、１．４８－１．３７（ｍ，２Ｈ）、１．３７－１．１８（ｍ，９Ｈ）、１．１０－０．９８（ｍ，２Ｈ）、０．９０（ｔ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，３Ｈ）．

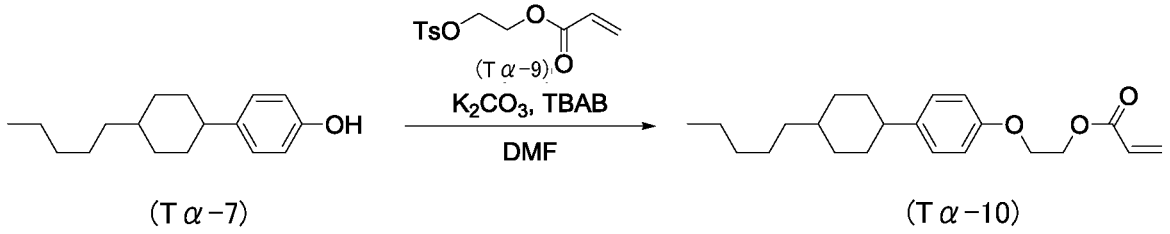
【０２８４】

化合物（１α－４－２２）の物性は、次のとおりであった。

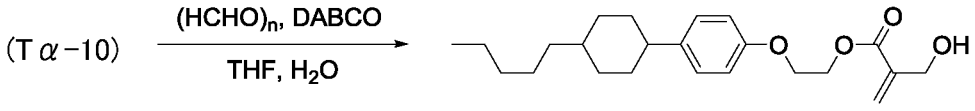
転移温度：Ｃ　６７．６　Ｓ$_{C}$　８４．４　Ｓ$_{A}$　８７．７　Ｎ　８９．８　Ｉ．

【０２８５】

合成例３α：化合物（１α－４－２７）の合成



(Tα-7)　　(Tα-10)



(1α-4-27)

【０２８６】

第１工程

化合物（Ｔα－７）（４．００ｇ）、炭酸カリウム（４．４９ｇ）、テトラブチルアンモニウムブロミド（ＴＢＡＢ）（１．０５ｇ）、およびＤＭＦ（６０ｍｌ）を反応器に入れ、８０℃で１時間撹拌した。そこへ、特開２０１１－２１１１８号公報に記載された手法に従い合成した化合物（Ｔα－９）（５．２７ｇ）のＤＭＦ（２０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、８０℃でさらに２時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：トルエン＝２：１）で精製して、化合物（Ｔα－１０）（４．００ｇ；７２％）を得た。

【０２８７】

第２工程

化合物（Ｔα－１０）（４．００ｇ）を原料として用い、合成例１αの第２工程と同様の手法により、化合物（１α－４－２７）（１．８１ｇ；４２％）を得た。

【０２８８】

得られた化合物（１α－４－２７）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１３（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，２Ｈ）、６．８４（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ）、６．２９（ｓ，１Ｈ）、５．８５（ｄ，Ｊ＝１．２Ｈｚ，１Ｈ）、４．５２（ｔ，Ｊ＝４．８Ｈｚ，２Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、４．２１（ｔ，Ｊ＝４．８Ｈｚ，２Ｈ）、２．４１（ｔｔ，Ｊ＝１２．３Ｈｚ，Ｊ＝３．０Ｈｚ，１Ｈ）、２．２６（ｔ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，１Ｈ）、１．９０－１．８１（ｍ，４Ｈ）、１．４６－１．１７（ｍ，１１Ｈ）、１．０９－０．９８（ｍ，２Ｈ）、０．８９（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，３Ｈ）．

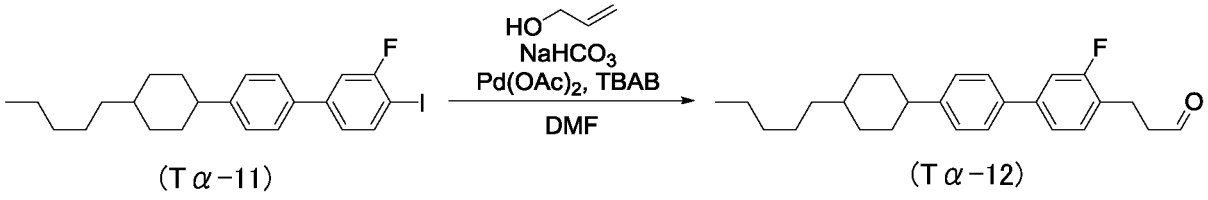
【０２８９】

化合物（１α－４－２７）の物性は、次のとおりであった。

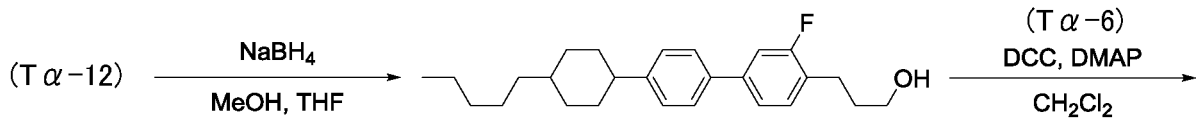
転移温度：Ｃ　４０．４　Ｓ$_{Ａ}$　６９．９　Ｉ．

【０２９０】

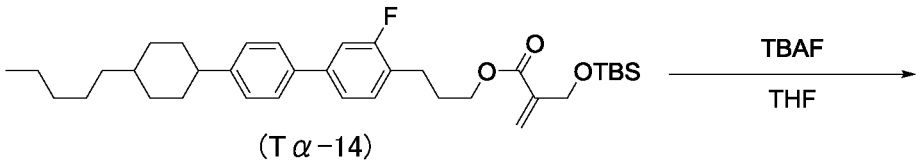
合成例４α：化合物（１α－５－３１）の合成



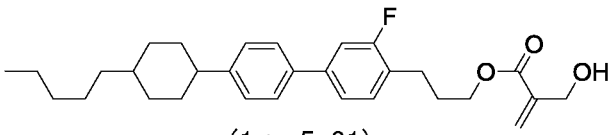
（Ｔα－11）　（Ｔα－12）



（Ｔα－12）　（Ｔα－13）



（Ｔα－14）



（1α－5－31）

【０２９１】

第１工程

国際公開第２００８／１０５２８６号パンフレットに記載された手法に従い合成した化合物（Ｔα－１１）（１０．７ｇ）、アリルアルコール（３．３ｍｌ）、酢酸パラジウム（０．１０７ｇ）、炭酸水素ナトリウム（５．９９ｇ）、ＴＢＡＢ（８．４２ｇ）、およびＤＭＦ（１１０ｍｌ）を反応器に入れて、４０℃で８時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（トルエン）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（Ｔα－１２）（６．９３ｇ；７７％）を得た。

【０２９２】

第２工程

水素化ホウ素ナトリウム（０．７２３ｇ）およびメタノール（１１０ｍｌ）を反応器に入れて、０℃に冷却した。そこへ化合物（Ｔα－１２）（６．９３ｇ）のＴＨＦ（３０ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝５：１）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（Ｔα－１３）（５．７３ｇ；８２％）を得た。

【０２９３】

第３工程

化合物（Ｔα－１３）（４．７３ｇ）を原料として用い、合成例２αの第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－１４）（３．３６ｇ；４７％）を得た。

【０２９４】

第４工程

化合物（Ｔα－１４）（２．３６ｇ）およびＴＨＦ（５０ｍｌ）を反応器に入れて、０℃に冷却した。そこへＴＢＡＦ（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；４．５ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝５：１）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（１α－５－３１）（１．４７ｇ；７７％）を得た。

【０２９５】

得られた化合物（１α－５－３１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．４８（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、７．３１－７．１４（ｍ，５Ｈ）、６．２５（ｓ，１Ｈ）、５．８４（ｄ，Ｊ＝１．２Ｈｚ，１Ｈ）、４．３４（ｄ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，２Ｈ）、４．２４（ｔ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，２Ｈ）、２．７８（ｔ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．５１（ｔｔ，Ｊ＝１２．１Ｈｚ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，１Ｈ）、２．２０（ｔ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，１Ｈ）、２．１０－２．２０（ｍ，２Ｈ）、１．９６－１．８４（ｍ，４Ｈ）、１．５４－１．４２（ｍ，２Ｈ）、１．３８－１．２０（ｍ，９Ｈ）、１．１３－１．０１（ｍ，２Ｈ）、０．９０（ｔ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，３Ｈ）．

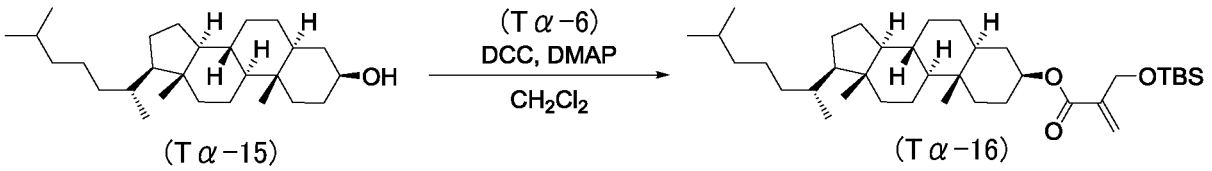
【０２９６】

化合物（１α－５－３１）の物性は、次のとおりであった。

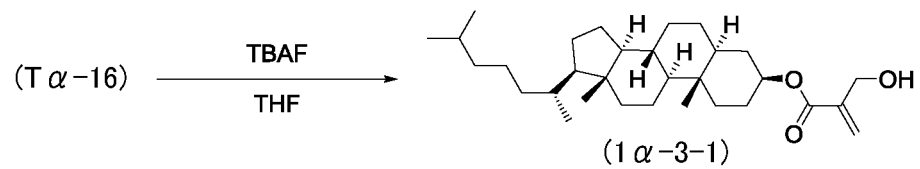
転移温度：Ｓ$_{A}$　１１５　Ｉ．

【０２９７】

合成例５α：化合物（１α－３－１）の合成



(Tα-15)　　(Tα-16)



(1α-3-1)

【０２９８】

第１工程

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

【０２９９】

第２工程

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

【０３００】

得られた化合物（１α－３－１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２３（ｓ，１Ｈ）、５．７９（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．８７－４．７６（ｍ，１Ｈ）、４．３２（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．２６（ｔ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，１Ｈ）、１．９７（ｄｔ，Ｊ＝１２．６Ｈｚ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，１Ｈ）、１．９０－１．７２（ｍ，３Ｈ）、１．６９－０．８１（ｍ，３８Ｈ）、０．７０－０．６１（ｍ，４Ｈ）．

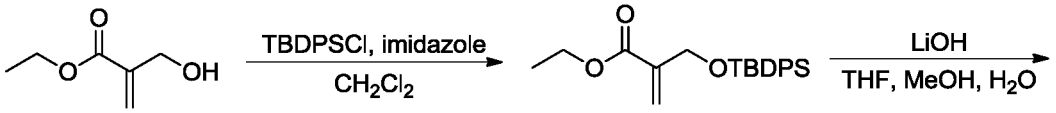
【０３０１】

化合物（１α－３－１）の物性は、次のとおりであった。

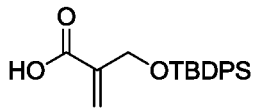
転移温度：Ｃ　１２２　Ｉ．

【０３０２】

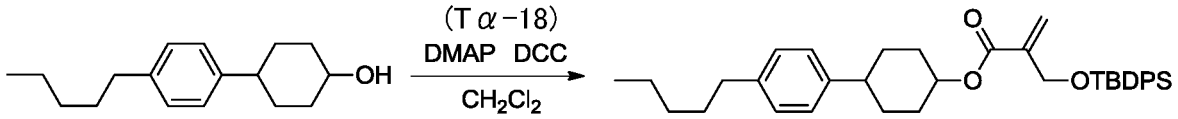
合成例６α：化合物（１α－４－８２）の合成



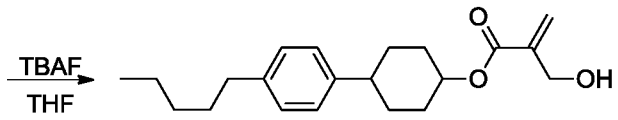
(Tα-4)　　(Tα-17)



(Tα-18)



(Tα-19)　　(Tα-20)



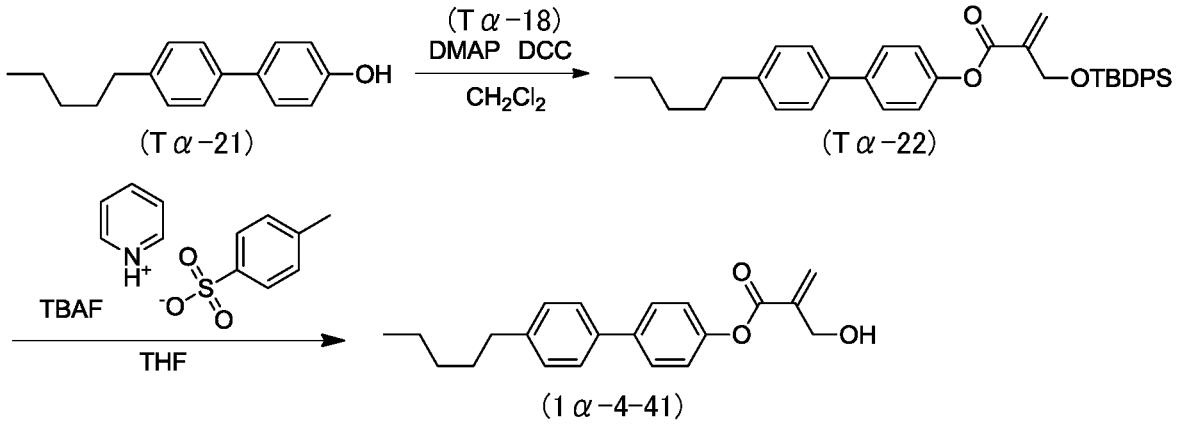
(1α-4-82)

【０３０３】

第１工程

化合物（Ｔα－４）（５０．０ｇ）を原料として用い、イミダゾール（２８．７ｇ）、およびジクロロメタン（８００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへｔ－ブチルジフェニルクロロシラン（１１６．１ｇ）のジクロロメタン（１１０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、ヘプタン：酢酸エチル＝１０：１）で精製して、化合物（Ｔα－１７）（１２７．４ｇ；９０％）を得た。

【０３０４】
第２工程
化合物（Ｔα－１７）（１２７．４ｇ）を原料として用い、合成例２αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－１８）（６３．６ｇ；５４％）を得た。
【０３０５】
第３工程
化合物（Ｔα－１９）（５．００ｇ）、化合物（Ｔα－１８）（８．２９ｇ）、ＤＭＡＰ（１．０ｇ）、およびジクロロメタン（８０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（５．００ｇ）のジクロロメタン（４０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、ヘプタン：トルエン＝１：１）で精製して、化合物（Ｔα－２０）（８．６６ｇ；７５％）を得た。
【０３０６】
第４工程
化合物（Ｔα－２０）（８．６６ｇ）およびＴＨＦ（５０ｍｌ）を反応器に入れて、０℃に冷却した。そこへＴＢＡＦ（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；１８ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（１α－４－８２）（４．４３ｇ；８８％）を得た。
【０３０７】
得られた化合物（１α－４－８２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１１（ｓ，４Ｈ）、６．２６（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．９２－４．８７（ｍ，１Ｈ）、４．３４（ｄ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，２Ｈ）、２．５８－２．４８（ｍ，３Ｈ）、２．３４－２．３３（ｍ，１Ｈ）、２．１５－２．１３（ｍ，２Ｈ）、１．９８－１．９３（ｍ，２Ｈ）、１．６５－１．５２（ｍ，６Ｈ）、１．３７－１．２５（ｍ，４Ｈ）、０．８９（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．
【０３０８】
化合物（１α－４－８２）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　４４．０（Ｓ$_{A}$　４０．０）Ｉ
【０３０９】
合成例７α：化合物（１α－４－４１）の合成



【０３１０】
第１工程
化合物（Ｔα－２１）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様

の手法により、化合物（Ｔα－２２）（９．１３ｇ；７８％）を得た。

【０３１１】

第２工程

化合物（Ｔα－２２）（９．１３ｇ）およびＴＨＦ（５０ｍｌ）を反応器に入れて、０℃に冷却した。そこへピリジニウムｐ－トルエンスルホナート（４．８９ｇ）、ＴＢＡＦ（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；１９ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（体積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（１α－４－４１）（４．５３ｇ；８６％）を得た。

【０３１２】

得られた化合物（１α－４－４１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．６０（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ）、７．４８（ｄ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，２Ｈ），７．２５（ｄ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，２Ｈ）、７．１８（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ）、６．５４（ｓ，１Ｈ）、６．０６（ｄ，Ｊ＝０．８Ｈｚ，１Ｈ）、４．４６（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．６４（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．２８－２．２６（ｍ，１Ｈ）、１．６６－１．６３（ｍ，２Ｈ）、１．３６－１．３３（ｍ，４Ｈ）、０．９０（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

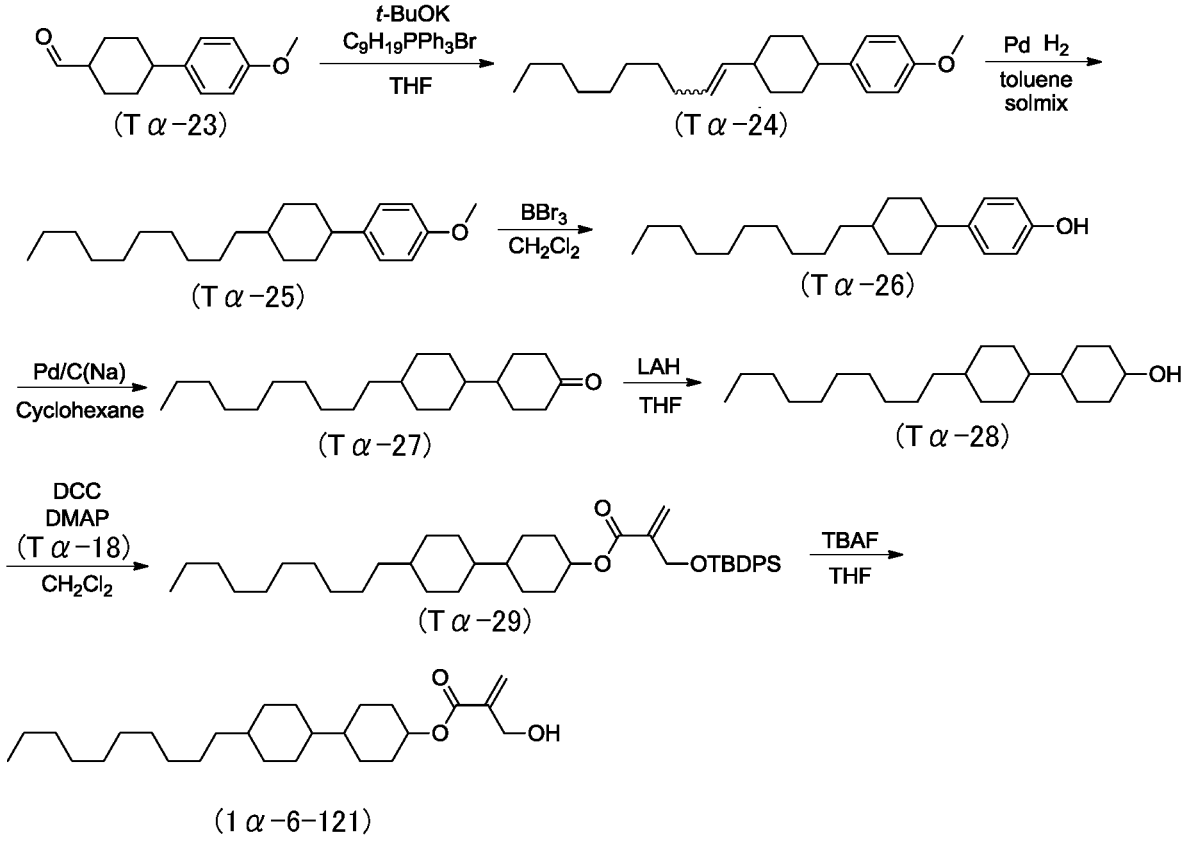
【０３１３】

化合物（１α－４－４１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６６．７　Ｓ$_{A}$　１３５．１　Ｉ．

【０３１４】

合成例８α：化合物（１α－６－１２１）の合成



【０３１５】

第１工程

デシルトリフェニルホスホニウムブロミド（５０．０ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れて、－３０℃に冷却した。カリウムｔ－ブトキシド（１１．９ｇ）をゆっ

くろと加え、－３０℃で１時間撹拌した。国際公開第２０１２／０５８１８７号パンフレットに記載された手法に従い合成した化合物（Ｔα－２３）（１９．３ｇ）のＴＨＦ（５０ｍｌ）溶液を加えた。室温に戻しつつ５時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、ヘプタン：トルエン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔα－２４）（２３．９ｇ；８２％）を得た。

【０３１６】

第２工程

化合物（Ｔα－２４）（２３．９ｇ）およびトルエン（４００ｍｌ）、ＩＰＡ（４００ｍｌ）を反応器に入れて、Ｐｄ／Ｃ（０．３８ｇ）を加える、水素雰囲気で室温で１２時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、ヘプタン：トルエン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔα－２５）（２２．８ｇ；９５％）を得た。

【０３１７】

第３工程

化合物（Ｔα－２５）（２２．８ｇ）、およびジクロロメタン（３００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。そこへ三臭化ホウ素（１．００Ｍ；ジクロロメタン溶液；７６ｍｌ）を加え、室温に戻しつつ５時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーでトルエンにて精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔα－２６）（１８．８ｇ；８６％）を得た。

【０３１８】

第４工程

化合物（Ｔα－２６）（１８．８ｇ）およびシクロヘキサン（４００ｍｌ）をオートクレーブに入れて、７０℃で６時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製し、化合物（Ｔα－２７）（１７．１ｇ；９０％）を得た。

【０３１９】

第５工程

水素化アルミニウムリチウム（１．２１ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔα－２７）（１７．１ｇ）のＴＨＦ（２００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ２時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔα－２８）（１４．２ｇ；８３％）を得た。

【０３２０】

第６工程

化合物（Ｔα－２８）（６．０ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－２９）（１０．１ｇ；８４％）を得た。

【０３２１】

第７工程

化合物（Ｔα－２９）（１０．１ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２１）（５．４８ｇ；８６％）を得た。

【０３２２】

得られた化合物（１α－６－１２１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：６．２３（ｓ，１Ｈ）、５．７９（ｄ，Ｊ＝０．８Ｈｚ，１Ｈ）、４．７７－４．７１（ｍ，１Ｈ）、４．３２（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．３１（ｔ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，１Ｈ）、２．０４－２．０２（ｍ，２Ｈ）、１．８０－１．６８（ｍ，６Ｈ）、１．３９－１．２５（ｍ，１８Ｈ）、１．１３－０．８０（ｍ，１４Ｈ）．

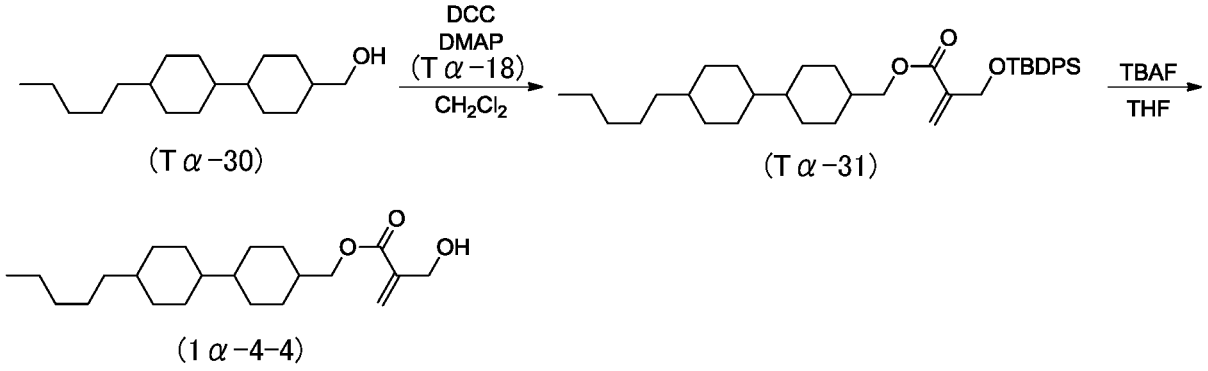
【０３２３】

化合物（１α－６－１２１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　７９．８　Ｓ$_A$　１２２．０　Ｉ．

【０３２４】

合成例９α：化合物（１α－４－４）の合成



(Tα-30)　(Tα-31)

(1α-4-4)

【０３２５】

第１工程

化合物（Ｔα－３０）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－３１）（８．８４ｇ；８０％）を得た。

【０３２６】

第２工程

化合物（Ｔα－３１）（８．８４ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－４－４）（４．２６ｇ；８１％）を得た。

【０３２７】

得られた化合物（１α－４－４）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_3$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ）、３．９９（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．３３（ｔ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，１Ｈ）、１．８０－１．６２（ｍ，９Ｈ）、１．３２－０．８０（ｍ，２２Ｈ）．

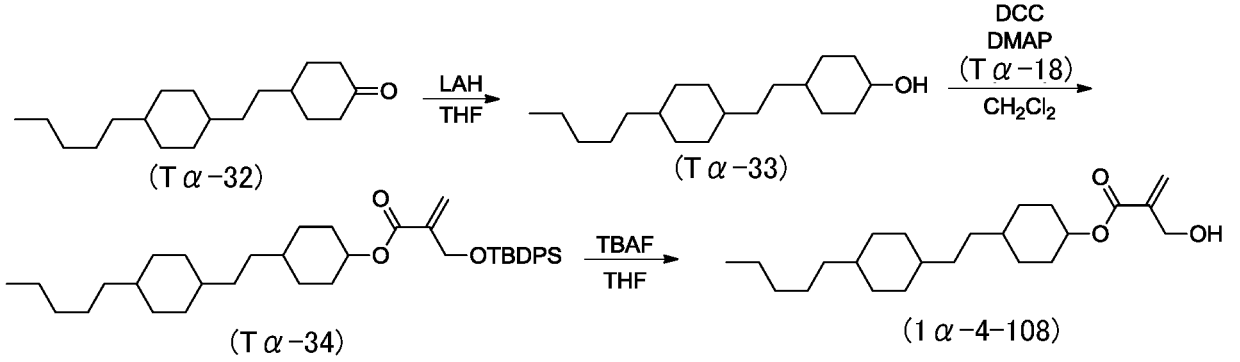
【０３２８】

化合物（１α－４－４）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５１．９　Ｓ$_A$　７２．５　Ｉ．

【０３２９】

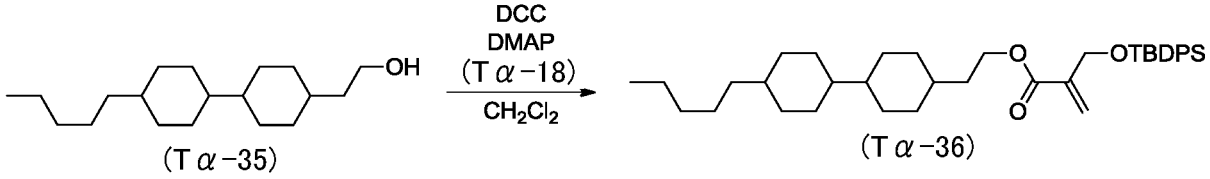
合成例１０α：化合物（１α－４－１０８）の合成



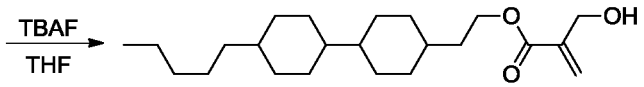
(Tα-32)　(Tα-33)　(Tα-34)　(1α-4-108)

【０３３０】

第１工程
化合物（Ｔα－３２）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例８αの第５工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－３３）（４．１３ｇ；８２％）を得た。
【０３３１】
第２工程
化合物（Ｔα－３３）（４．１３ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－３４）（７．１０ｇ；８０％）を得た。
【０３３２】
第３工程
化合物（Ｔα－３４）（７．１０ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－４－１０８）（３．６５ｇ；８５％）を得た。
【０３３３】
得られた化合物（１α－４－１０８）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２２（ｓ，１Ｈ）、５．７９（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．７９－４．７３（ｍ，１Ｈ）、４．３１（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、２．３２（ｔ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，１Ｈ）、２．０２－１．９９（ｍ，２Ｈ）、１．８２－１．７９（ｍ，２Ｈ）、１．７２－１．７０（ｍ，４Ｈ）、１．４２－０．９８（ｍ，１９Ｈ）、０．８９－０．８０（ｍ，７Ｈ）．
【０３３４】
化合物（１α－４－１０８）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　４６．１　Ｓ$_{A}$　１２２　Ｉ．
【０３３５】
合成例１１α：化合物（１α－４－５）の合成



(Tα-35)　(Tα-36)



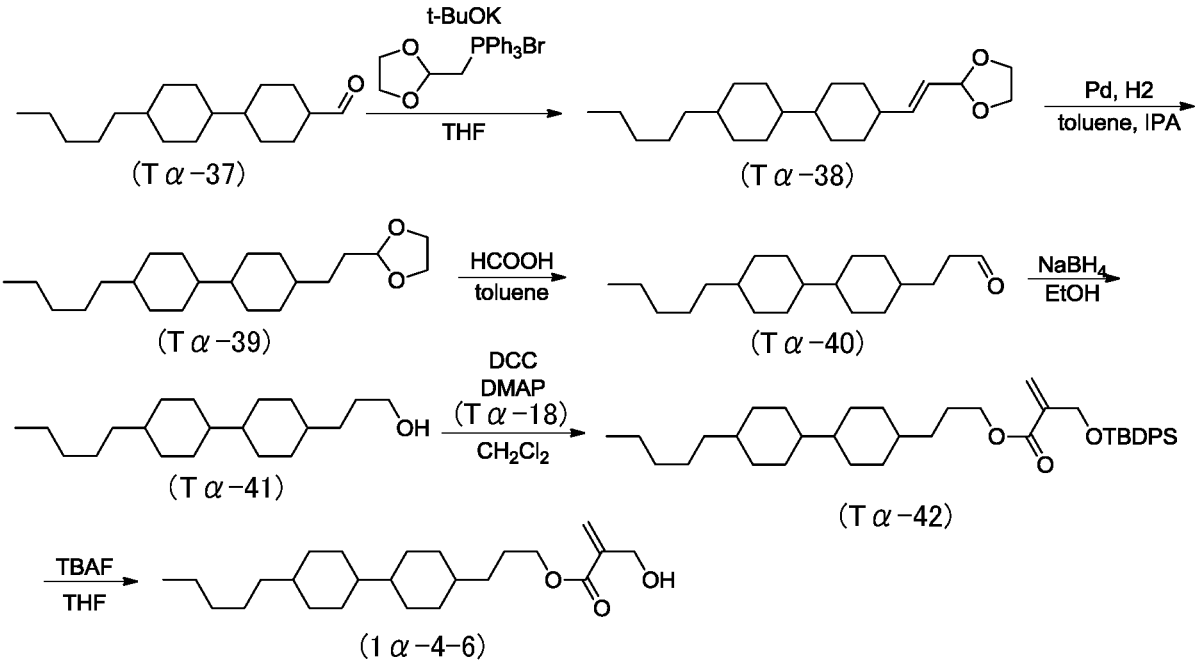
(1α-4-5)

【０３３６】
第１工程
化合物（Ｔα－３５）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－３６）（８．６０ｇ；８０％）を得た。
【０３３７】
第２工程
化合物（Ｔα－３６）（８．６０ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－４－５）（４．２１ｇ；８１％）を得た。
【０３３８】
得られた化合物（１α－４－５）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２４（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ）、４．２１（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，２Ｈ）、２．２９－２．２６（ｍ，１Ｈ）、１．７８－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．６０－１．５５（ｍ，２Ｈ）、１．３１－１．０７（ｍ，１０Ｈ）、１．００－０．７９（ｍ，１３Ｈ）．
【０３３９】
化合物（１α－４－５）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６９．４　S_A　１２４．６　Ｉ．

【０３４０】

合成例１２α：化合物（１α－４－６）の合成



【０３４１】

第１工程

（１，３－ジオキソラン－２－イル）メチルトリフェニルホスホニウムブロミド（１９．５ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れて－３０℃まで冷却する。カリウムｔ－ブトキシド（５．０９ｇ）を加え、－３０℃で１時間撹拌した。化合物（Ｔα－３７）（１０．０ｇ）を加え、室温に戻しつつ５時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－３８）（１１．４ｇ；９０％）を得た。

【０３４２】

第２工程

化合物（Ｔα－３８）（１１．４ｇ）、Ｐｄ／Ｃ（０．１８ｇ）、ＩＰＡ（２００ｍｌ）、およびトルエン（２００ｍｌ）を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で１２時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－３９）（１０．６ｇ；９２％）を得た。

【０３４３】

第３工程

化合物（Ｔα－３９）（１０．６ｇ）、ギ酸（１４．５ｇ）、およびトルエン（２００ｍｌ）を反応器に入れて、１００℃にて４時間撹拌した。不溶物を炉別した後、炭酸水素ナトリウム水溶液で中和し、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－４０）（８．１１ｇ；８８％）を得た。

【０３４４】

第４工程

水素化ホウ素ナトリウム（０．６２ｇ）、およびエタノール（１００ｍｌ）を反応容器

に入れて、０℃まで冷却した。そこへ化合物（Ｔα－４０）（８．１１ｇ）のエタノール（１００ｍｌ）溶液を滴下した。室温に戻しつつ４時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔα－４１）（６．３７ｇ；７８％）を得た。

【０３４５】

第５工程

化合物（Ｔα－４１）（６．３７ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－４２）（８．６７ｇ；６５％）を得た。

【０３４６】

第６工程

化合物（Ｔα－４２）（８．６７ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－４－６）（４．５２ｇ；８５％）を得た。

【０３４７】

得られた化合物（１α－４－６）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝０．９Ｈｚ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、４．１５（ｔ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、２．２７（ｔ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，１Ｈ）、１．７６－１．６２（ｍ，１０Ｈ）、１．３２－１．０６（ｍ，１２Ｈ）、１．０２－０．７９（ｍ，１３Ｈ）．

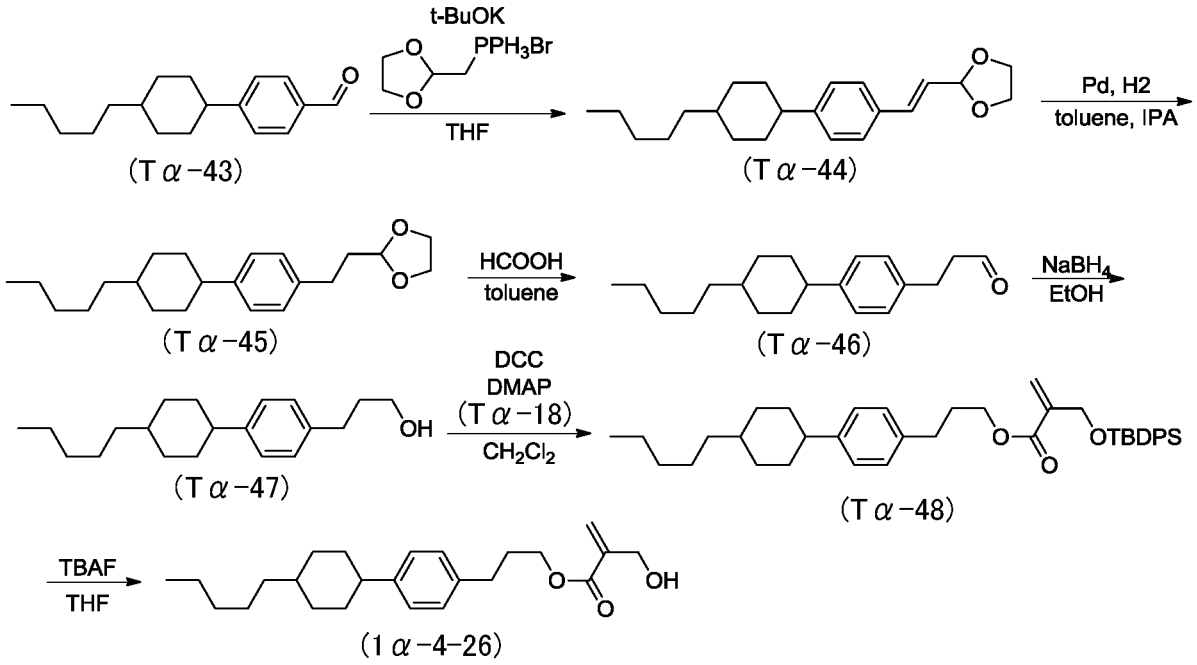
【０３４８】

化合物（１α－４－６）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５３．６　Ｓ$_{A}$　１１３　Ｉ．

【０３４９】

合成例１３α：化合物（１α－４－２６）の合成



【０３５０】

第１工程

化合物（Ｔα－４３）（１０．０ｇ）を原料として用い、合成例１２αの第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－４４）（１１．２ｇ；８８％）を得た。

【０３５１】

第２工程

化合物（Ｔα－４４）（１１．２ｇ）を原料として用い、合成例１２αの第２工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－４５）（１０．１ｇ；９０％）を得た。

【０３５２】

第３工程

化合物（Ｔα－４５）（１０．１ｇ）を原料として用い、合成例１２αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－４６）（７．４４ｇ；８５％）を得た。

【０３５３】

第４工程

化合物（Ｔα－４６）（７．４４ｇ）を原料として用い、合成例１２αの第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－４７）（６．０７ｇ；８１％）を得た。

【０３５４】

第５工程

化合物（Ｔα－４７）（６．０７ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－４８）（９．３８ｇ；７３％）を得た。

【０３５５】

第６工程

化合物（Ｔα－４８）（９．３８ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－４－２６）（３．３２ｇ；５８％）を得た。

【０３５６】

得られた化合物（１α－４－２６）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１３（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、７．１０（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、６．２３（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．３２（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、４．２０（ｔ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，２Ｈ）、２．６８（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，２Ｈ）、２．４３（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，１Ｈ）、２．２１（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，１Ｈ）、２．０４－１．９８（ｍ，２Ｈ）、１．８８－１．８４（ｍ，４Ｈ）、１．４６－１．３８（ｍ，２Ｈ）、１．３５－１．１９（ｍ，９Ｈ）、１．０７－０．９９（ｍ，２Ｈ）、０．８９（ｔ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，３Ｈ）．

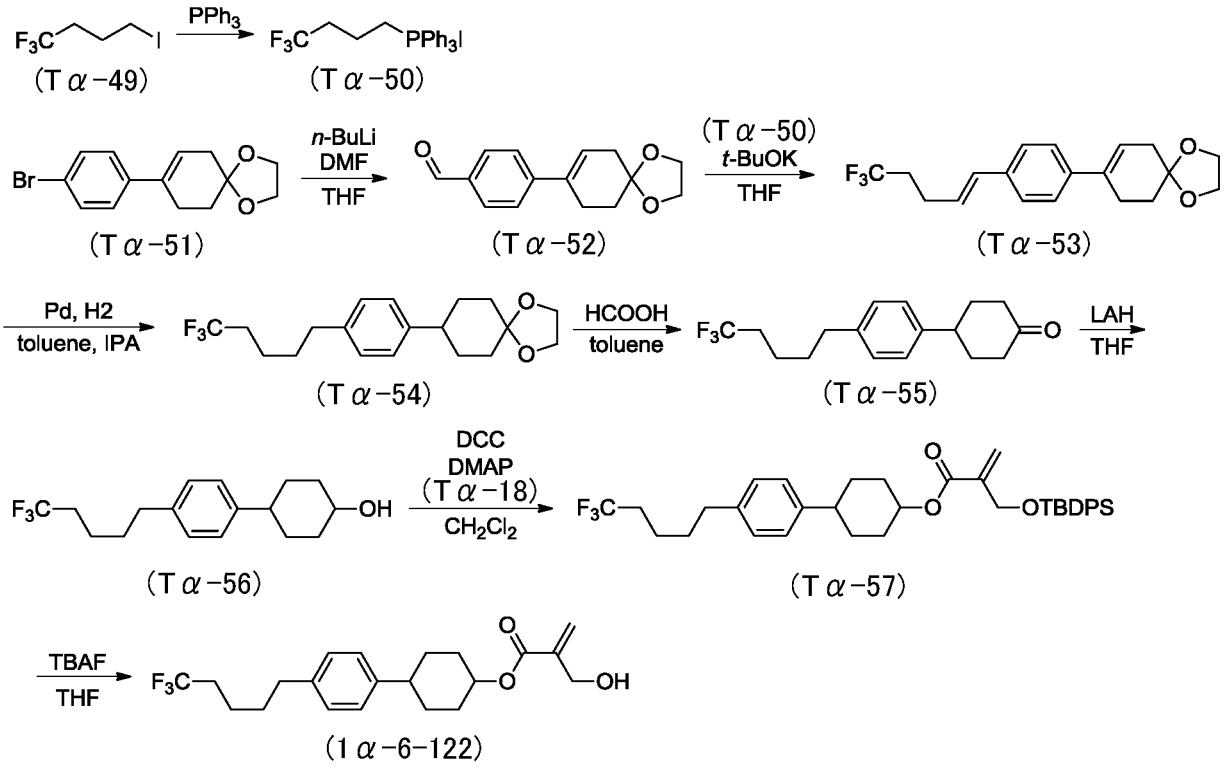
【０３５７】

化合物（１α－４－２６）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　４１．４　Ｉ．

【０３５８】

合成例１４α：化合物（１α－６－１２２）の合成



【０３５９】

第１工程

化合物（Ｔα－４９）（１５．０ｇ）トリフェニルホスフィン（２４．８ｇ）を反応器に入れて、１００℃にて６時間撹拌した。氷冷したヘプタンで濾過洗浄し、化合物（Ｔα－５０）（１６．４ｇ；５２％）を得た。

【０３６０】

第２工程

化合物（Ｔα－５１）（１０．０ｇ）、およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、－７０℃まで冷却した。ｎ－ブチルリチウム（１．６３Ｍ；ヘキサン溶液；２５ｍｌ）をゆっくりと加え、１時間撹拌した。ＤＭＦ（４．０ｍｌ）をゆっくり加え、室温に戻しつつ１２時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（Ｔα－５２）（６．３７ｇ；７７％）を得た。

【０３６１】

第３工程

化合物（Ｔα－５０）（１４．３ｇ）、およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、－３０まで冷却した。そこへカリウムｔ－ブトキシド（３．２１ｇ）をゆっくりと加え、－３０℃で１時間撹拌した。化合物（Ｔα－５２）（６．３７ｇ）のＴＨＦ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ４時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーでトルエンにて精製して、化合物（Ｔα－５３）（７．５０ｇ；８５％）を得た。

【０３６２】

第４工程

化合物（Ｔα－５３）（７．５０ｇ）、Ｐｄ／Ｃ（０．１１ｇ）、ＩＰＡ（２００ｍｌ）、およびトルエン（２００ｍｌ）を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で１２時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下

で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－５４）（７．２１ｇ；９５％）を得た。

【０３６３】

第５工程

化合物（Ｔα－５４）（７．２１ｇ）、ギ酸（９．７０ｇ）、およびトルエン（２００ｍｌ）を反応器に入れて、１００℃にて４時間撹拌した。不溶物を炉別した後、炭酸水素ナトリウム水溶液で中和し、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－５５）（５．６５ｇ；９０％）を得た。

【０３６４】

第６工程

水素化アルミニウムリチウム（０．４３ｇ）およびＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔα－５５）（５．６５ｇ）のＴＨＦ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ２時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔα－５６）（４．８３ｇ；８５％）を得た。

【０３６５】

第７工程

化合物（Ｔα－５６）（４．８３ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－５７）（８．４１ｇ；８４％）を得た。

【０３６６】

第８工程

化合物（Ｔα－５７）（８．４１ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２２）（３．２２ｇ；６２％）を得た。

【０３６７】

得られた化合物（１α－６－１２２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１３（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、７．１０（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ）、６．２６（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．９２－４．８７（ｍ，１Ｈ）、４．３４（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、２．６０（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，２Ｈ）、２．５４－２．４９（ｍ，１Ｈ）、２．３１（ｔ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，１Ｈ）、２．１５－２．０４（ｍ，４Ｈ）、１．９８－１．９６（ｍ，２Ｈ）、１．６６－１．５２（ｍ，８Ｈ）．

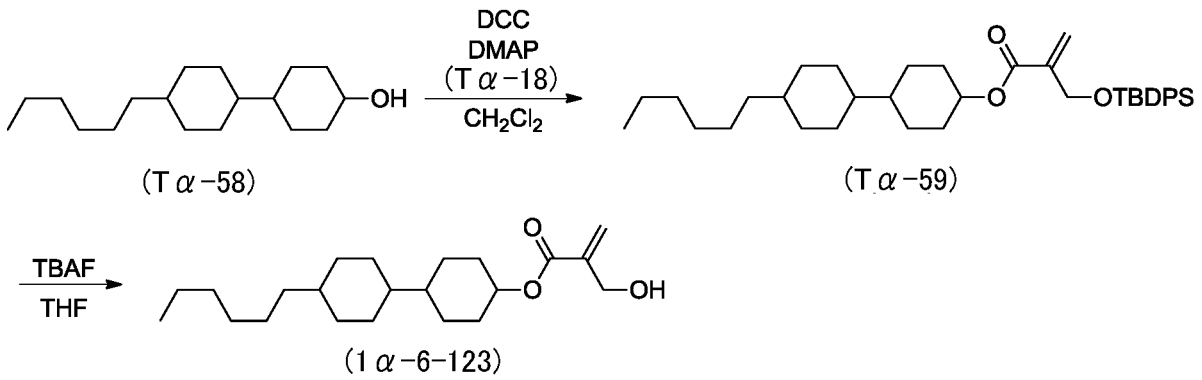
【０３６８】

化合物（１α－６－１２２）の物性は、次のとおりであった。

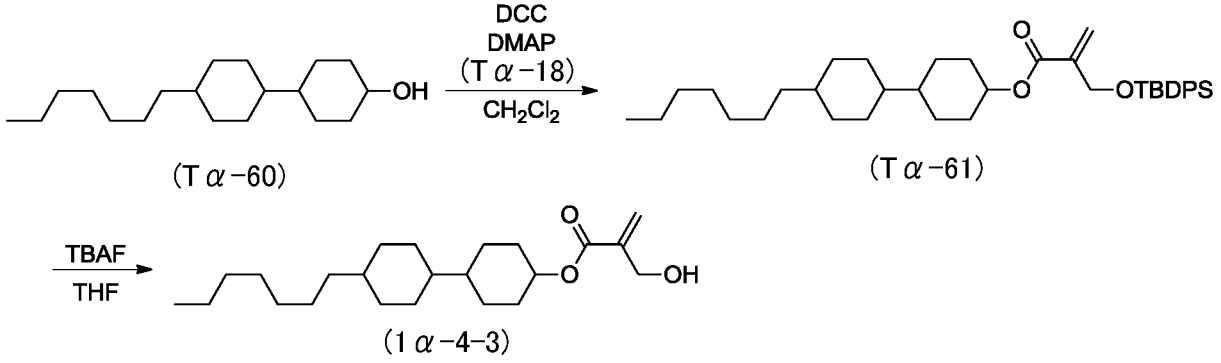
転移温度：Ｃ　６２．０　Ｉ．

【０３６９】

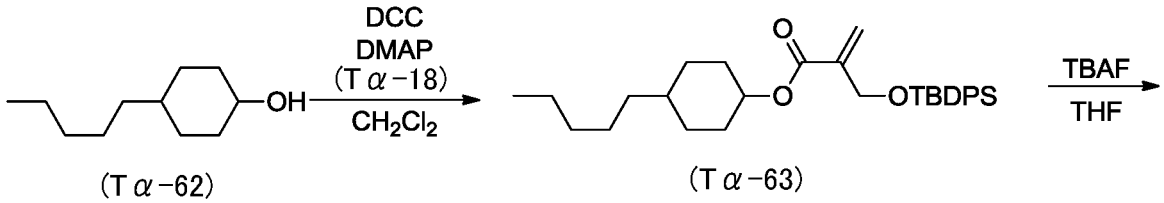
合成例１５α：化合物（１α－６－１２３）の合成



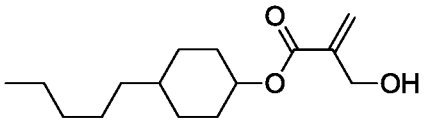
【０３７０】
第１工程
化合物（Ｔα－５８）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－５９）（７．７４ｇ；７０％）を得た。
【０３７１】
第２工程
化合物（Ｔα－５９）（７．７４ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２３）（３．８２ｇ；８３％）を得た。
【０３７２】
得られた化合物（１α－６－１２３）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２２（ｓ，１Ｈ）、５．７９（ｓ，１Ｈ）、４．７７－４．７１（ｍ，１Ｈ）、４．３１（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．２９－２．２６（ｍ，１Ｈ）、２．０４－２．０１（ｍ，２Ｈ）、１．８０－１．６８（ｍ，６Ｈ）、１．３９－１．２４（ｍ，１０Ｈ）、１．１３－０．８０（ｍ，１４Ｈ）．
【０３７３】
化合物（１α－６－１２３）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ５９．１　Ｓ$_{A}$　１１４　Ｉ．
【０３７４】
合成例１６α：化合物（１α－４－３）の合成



【０３７５】
第１工程
化合物（Ｔα－６０）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－６１）（８．４９ｇ；７９％）を得た。
【０３７６】
第２工程
化合物（Ｔα－６１）（８．４９ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－４－３）（３．５４ｇ；６９％）を得た。
【０３７７】
得られた化合物（１α－４－３）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２２（ｓ，１Ｈ）、５．７９（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．７６－４．７２（ｍ，１Ｈ）、４．３１（ｄ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，２Ｈ）、２．２９－２．２６（ｍ，１Ｈ）、２．０４－２．０１（ｍ，２Ｈ）、１．８０－１．６８（ｍ，６Ｈ）、１．４０－１．２５（ｍ，１２Ｈ）、１．１６－０．８０（ｍ，１４Ｈ）．
【０３７８】
化合物（１α－４－３）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ６０．９　Ｓ$_{A}$　１０９　Ｉ．
【０３７９】
合成例１７α：化合物（１α－６－１２４）の合成



(Tα-62) (Tα-63)



(1α-6-124)

【０３８０】

第１工程

化合物（Ｔα－６２）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例α６の第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－６３）（８．３９ｇ；５８％）を得た。

【０３８１】

第２工程

化合物（Ｔα－６３）（８．３９ｇ）を原料として用い、合成例α６の第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２４）（３．８５ｇ；８９％）を得た。

【０３８２】

得られた化合物（１α－６－１２４）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２２（ｓ，１Ｈ）、５．８０（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．７８－４．７２（ｍ，１Ｈ）、４．３１（ｓ，２Ｈ）、２．７４（ｓ，１Ｈ）、２．０２－１．９８（ｍ，２Ｈ）、１．８２－１．７９（ｍ，２Ｈ）、１．４２－１．１６（ｍ，１１Ｈ）、１．０７－０．９７（ｍ，２Ｈ）、０．８８（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

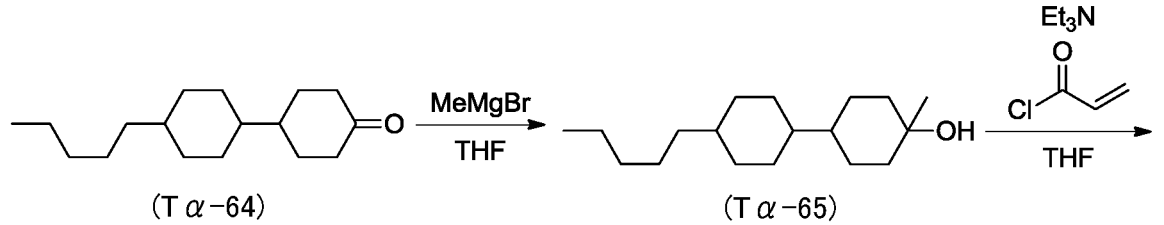
【０３８３】

化合物（１α－６－１２４）の物性は、次のとおりであった。

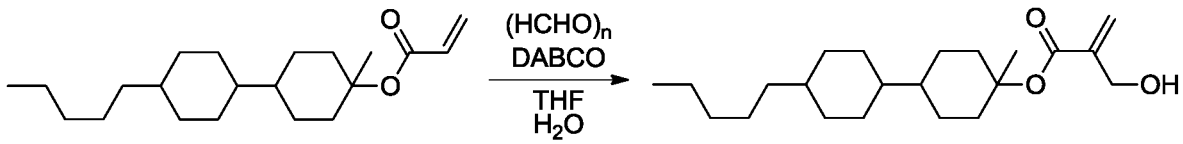
転移温度：＜－５０．０　Ｉ．

【０３８４】

合成例１８α：化合物（１α－６－１２５）の合成



(Tα-64) (Tα-65)



(Tα-66) (1α-6-125)

【０３８５】

第１工程

化合物（Ｔα－６４）（１０．０ｇ）、およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで冷却した。メチルマグネシウムブロミド（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；４８ｍｌ）をゆっくりと加え、、室温に戻しつつ６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラ

フィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（Ｔα－６５）（４．５８ｇ；４３％）を得た。

【０３８６】

第２工程

化合物（Ｔα－６５）（４．５８ｇ）、トリエチルアミン（２．８７ｍｌ）、およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで冷却した。アクリロイルクロリド（１．６８ｍｌ）をゆっくりと加え、、室温に戻しつつ５時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：ヘプタン＝３：２）で精製して、化合物（Ｔα－６６）（３．２０ｇ；５８％））を得た。

【０３８７】

第３工程

化合物（Ｔα－６６）（３．２０ｇ）を原料として用い、合成例１αの第２工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２５）（１．１２ｇ；３２％）を得た。

【０３８８】

得られた化合物（１α－６－１２５）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．１５（ｓ，１Ｈ）、５．７３（ｄ，Ｊ＝１．２Ｈｚ，１Ｈ）、４．２８（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．３４－２．３２（ｍ，１Ｈ）、２．１３－２．１１（ｍ，２Ｈ）、１．７６－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．５４（ｓ，３Ｈ）、１．３２－１．０３（ｍ，１３Ｈ）、０．９７－０．８０（ｍ，７Ｈ）．

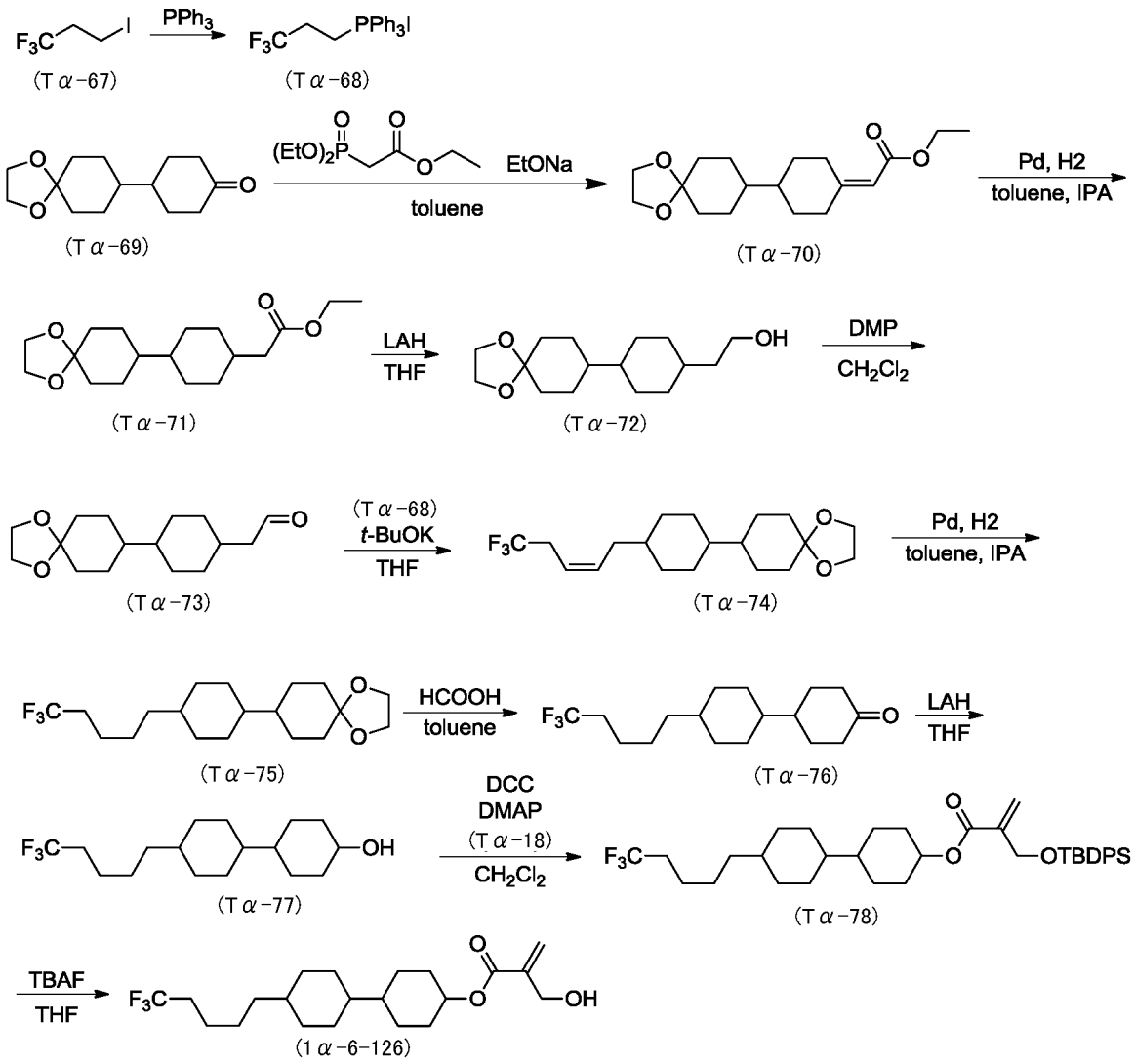
【０３８９】

化合物（１α－６－１２５）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６６．５　Ｓ$_{A}$　８１．１　Ｉ．

【０３９０】

合成例１９α：化合物（１α－６－１２６）の合成



【０３９１】

第１工程

化合物（Ｔα－６７）（２５．０ｇ）トリフェニルホスフィン（４３．９ｇ）を反応器に入れて、９０℃にて６時間撹拌した。ヘプタンで濾過洗浄し、化合物（Ｔα－６８）（２２．８ｇ；４２％）を得た。

【０３９２】

第２工程

化合物（Ｔα－６９）（２０．０ｇ）、ホスホノ酢酸トリエチル（２２．５ｇ）、およびトルエン（３００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで冷却した。そこへナトリウムエトキシド（２０％エタノール溶液）（３４．２ｇ）ををゆっくりと加え、、室温に戻しつつ６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーでトルエンにて精製して、化合物（Ｔα－７０）（２３．３ｇ；９０％）を得た。

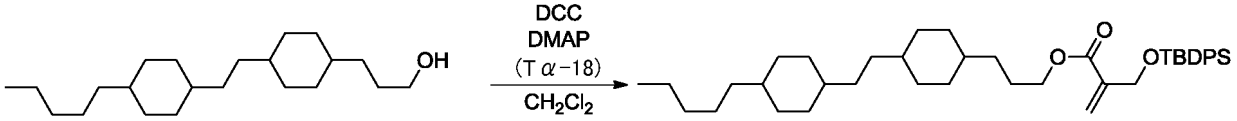
【０３９３】

第３工程

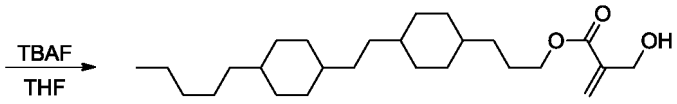
化合物（Ｔα－７０）（２３．３ｇ）およびトルエン（４００ｍｌ）、ＩＰＡ（４００ｍｌ）を反応器に入れて、Ｐｄ／Ｃ（０．４０ｇ）を加える、水素雰囲気で室温で１２時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーでトルエンにて精製して、化合物（Ｔ

α－７１）（２１．５ｇ；９２％）を得た。
【０３９４】
第４工程
水素化アルミニウムリチウム（１．５７ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔα－７１）（２１．５ｇ）のＴＨＦ（２００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ５時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝４：１）で精製して、化合物（Ｔα－７２）（１４．３ｇ；７７％）を得た。
【０３９５】
第５工程
化合物（Ｔα－７２）（１４．３ｇ）、およびジクロロメタン（３００ｍｌ）を反応器に入れて、氷冷した。デス－マーチンペルヨージナン（２７．１ｇ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ５時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（Ｔα－７３）（９．．９３ｇ；７０％）を得た。
【０３９６】
第６工程
化合物（Ｔα－６８）（２１．７ｇ）、およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、－３０まで冷却した。そこへカリウムｔ－ブトキシド（５．０１ｇ）をゆっくりと加え、－３０℃で１時間撹拌した。化合物（Ｔα－７３）（９．９３ｇ）のＴＨＦ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ５時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーでトルエンにて精製して、化合物（Ｔα－７４）（６．９７ｇ；５４％）を得た。
【０３９７】
第７工程
化合物（Ｔα－７４）（６．９７ｇ）、Ｐｄ／Ｃ（０．１０ｇ）、ＩＰＡ（１００ｍｌ）、およびトルエン（１００ｍｌ）を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で１２時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－７５）（６．３１ｇ；９０％）を得た。
【０３９８】
第８工程
化合物（Ｔα－７５）（６．３１ｇ）を原料として用い、合成例１４αの第５工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－７６）（４．９６ｇ；９０％）を得た。
【０３９９】
第９工程
化合物（Ｔα－７６）（４．９６ｇ）原料として用い、合成例１４αの第６工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－７７）（４．２４ｇ；８５％）を得た。
【０４００】
第１０工程
化合物（Ｔα－７７）（４．２４ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－７８）（５．４０ｇ；６２％）を得た。
【０４０１】

第１１工程
化合物（Ｔα－７８）（４．２４ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２６）（２．３７ｇ；９０％）を得た。
【０４０２】
得られた化合物（１α－６－１２６）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、５．８１（ｄ，Ｊ＝０．８Ｈｚ，１Ｈ）、４．７９－４．７３（ｍ，１Ｈ）、４．３４（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、２．３２－２．２９（ｍ，１Ｈ）、２．１２－２．０３（ｍ，４Ｈ）、１．８２－１．７２（ｍ，６Ｈ）、１．５７－１．４９（ｍ，２Ｈ）、１．４４－１．３５（ｍ，４Ｈ）、１．２２－０．８４（ｍ，１１Ｈ）．
【０４０３】
化合物（１α－６－１２６）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　７２．０　Ｓ$_{A}$　８１．１　Ｉ．
【０４０４】
合成例２０α：化合物（１α－６－１２７）の合成

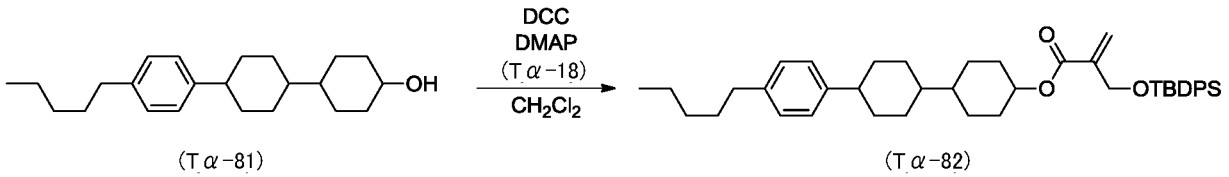


(Tα-79)　　(Tα-80)

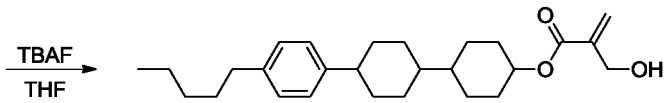


(1α-6-127)

【０４０５】
第１工程
化合物（Ｔα－７９）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－８０）（６．４０ｇ；６４％）を得た。
【０４０６】
第２工程
化合物（Ｔα－８０）（６．４０ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２７）（２．０２ｇ；５０％）を得た。
【０４０７】
得られた化合物（１α－６－１２７）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２４（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．３Ｈｚ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝５．５Ｈｚ，２Ｈ）、４．１５（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，２Ｈ）、２．３９－２．３７（ｍ，１Ｈ）、１．７３－１．６６（ｍ，１０Ｈ）、１．３２－１．０９（ｍ，１８Ｈ）、０．９１－０．８０（ｍ，１１Ｈ）．
【０４０８】
化合物（１α－６－１２７）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　１１０　Ｉ．
【０４０９】
合成例２１α：化合物（１α－６－１２８）の合成



(Tα-81) (Tα-82)



(1α-6-128)

【０４１０】

第１工程

化合物（Ｔα－８１）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－８２）（５．９４ｇ；６０％）を得た。

【０４１１】

第２工程

化合物（Ｔα－８２）（５．９４ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２８）（２．６４ｇ；７０％）を得た。

【０４１２】

得られた化合物（１α－６－１２８）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１２－７．０８（ｍ，４Ｈ）、６．２３（ｓ，１Ｈ）、５．８０（ｄ，Ｊ＝１．０Ｈｚ，１Ｈ）、４．７８－４．７４（ｍ，１Ｈ）、４．３２（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．５５（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．４１（ｔｔ，Ｊ＝１２．１Ｈｚ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，１Ｈ）、２．２８（ｔ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，１Ｈ）、２．０７－２．０４（ｍ，２Ｈ）、１．９３－１．９０（ｍ，２Ｈ）、１．８５－１．８２（ｍ，４Ｈ）、１．６１－１．５７（ｍ，２Ｈ）、１．４４－１．３０（ｍ，８Ｈ）、１．２０－１．１３（ｍ，６Ｈ）、０．８８（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

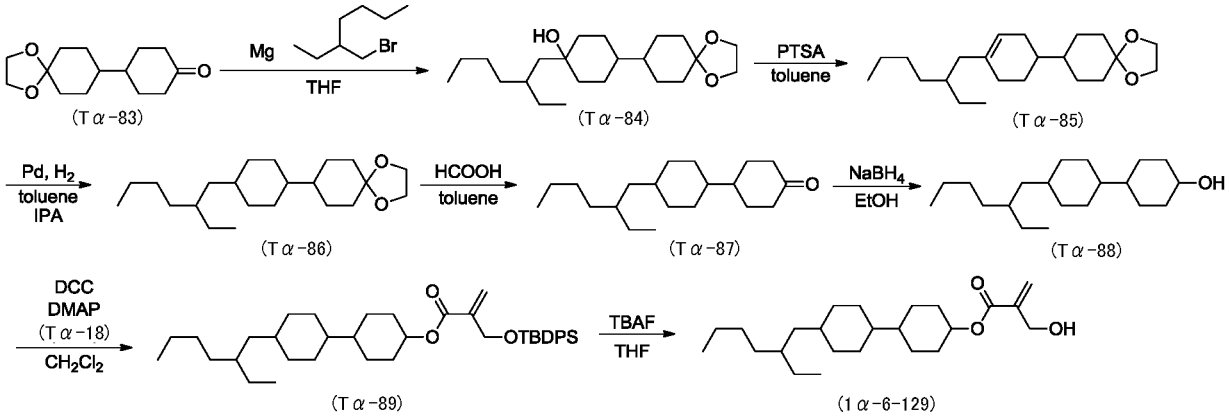
【０４１３】

化合物（１α－６－１２８）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　８５．０　Ｉ．

【０４１４】

合成例２２α：化合物（１α－６－１２９）の合成



(Tα-83) (Tα-84) (Tα-85) (Tα-86) (Tα-87) (Tα-88) (Tα-89) (1α-6-129)

【０４１５】

第１工程

マグネシウム（削状）（３．６７ｇ）、およびＴＨＦ（５０ｍｌ）を反応器に入れた、１－ブロモ－２－ヘキサエチレン（２９．１ｇ）のＴＨＦ（５０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、３０℃で１時間攪拌した。そこへ、化合物（Ｔα－８３）（３０．０ｇ）のＴＨ

Ｆ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温で６時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝４：１）で精製して、化合物（Ｔα－８４）（８．８８ｇ；２０％）を得た。

【０４１６】

第２工程

化合物（Ｔα－８４）（８．８８ｇ）、ｐ－トルエンスルホン酸一水和物（０．４７ｇ）、エチレングリコール（１．８７ｇ）、およびトルエン（２００ｍｌ）を反応器に入れ、９０℃で５時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－８５）（８．００ｇ；９５％）を得た。

【０４１７】

第３工程

化合物（Ｔα－８５）（８．００ｇ）、Ｐｄ／Ｃ（０．１２ｇ）、ＩＰＡ（２００ｍｌ）、およびトルエン（２００ｍｌ）を反応器に入れて、室温にて水素雰囲気下で１４時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－８６）（７．４８ｇ；９３％）を得た。

【０４１８】

第４工程

化合物（Ｔα－８６）（７．４８ｇ）を原料として用い、合成例１４αの第５工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－８７）（５．７２ｇ；８８％）を得た。

【０４１９】

第５工程

水素化ホウ素ナトリウム（０．４５ｇ）、およびエタノール（５０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで冷却した。そこへ、化合物（Ｔα－８７）（５．７２ｇ）のエタノール（５０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（Ｔα－８８）（２．６５ｇ；４６％）を得た。

【０４２０】

第６工程

化合物（Ｔα－８８）（２．６５ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－８９）（３．７２ｇ；６７％）を得た。

【０４２１】

第７工程

化合物（Ｔα－８９）（３．７２ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－６－１２９）（１．６０ｇ；７０％）を得た。

【０４２２】

得られた化合物（１α－６－１２９）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

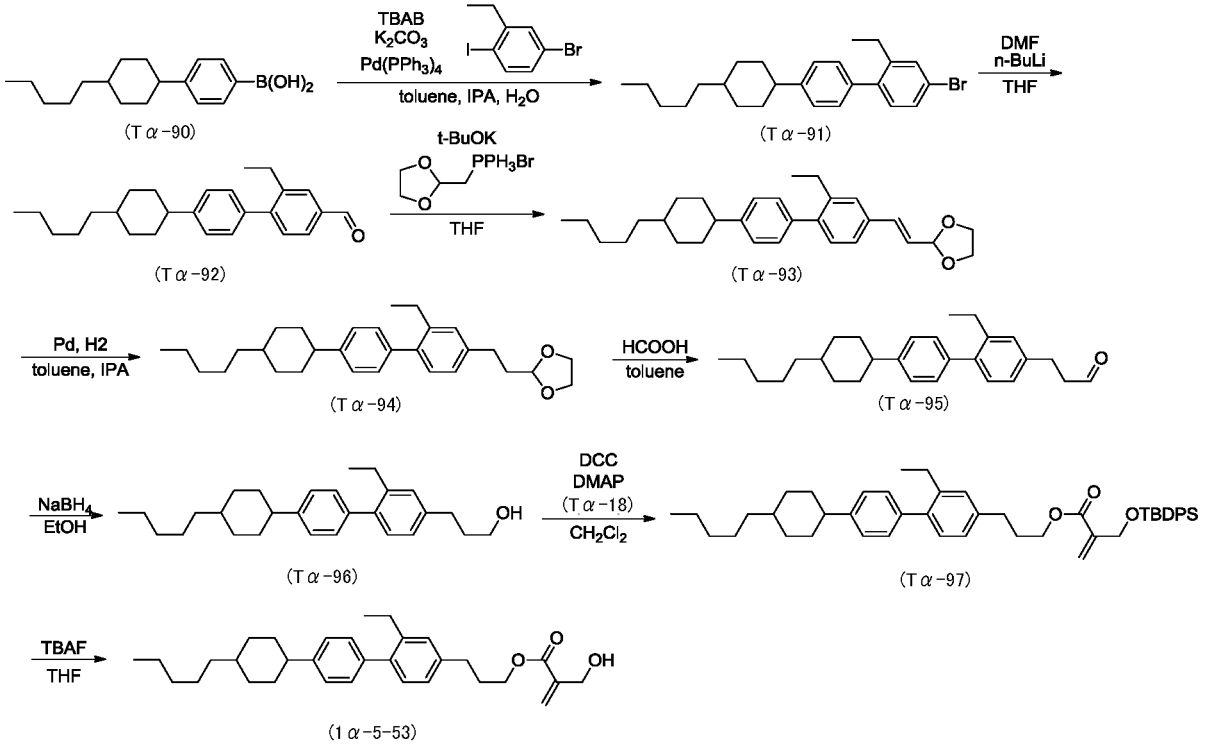
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２２（ｓ，１Ｈ）、５．７９（ｄ，Ｊ＝１．０Ｈｚ，１Ｈ）、４．７７－４．７１（ｍ，１Ｈ）、４．３１（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．３１（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，１Ｈ）、２．０４－２．０１（ｍ，２Ｈ）、１．８０－１．６８（ｍ，６Ｈ）、１．３９－０．９２（ｍ，２０Ｈ）、０．９０－０．８０（ｍ，８Ｈ）．

【０４２３】

化合物（１α－６－１２９）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ＜－５０．０　Ｉ．

【０４２４】

合成例２３α：化合物（１α－５－５３）の合成



【０４２５】

第１工程

化合物（Ｔα－９０）（２１．１ｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０．７４ｇ）、炭酸カリウム（１７．７ｇ）、テトラブチルアンモニウムブロミド（８．３ｇ）、４－ブロモ－２－エチル－１－ヨードベンゼン（２０．０ｇ）、トルエン（２００ｍｌ）、ＩＰＡ（１５０ｍｌ）、およびＨ２Ｏ（５０ｍｌ）を反応器に入れ、８０℃で６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、ヘプタン：トルエン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔα－９１）（２２．６ｇ；８５％）を得た。

【０４２６】

第２工程

化合物（Ｔα－９１）（２２．６ｇ）、ＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、－７０℃まで冷却し、ブチルリチウム（１．６０Ｍ；ヘキサン溶液；４１ｍｌ）をゆっくりと滴下し、－７０℃で１時間撹拌した。そこへＤＭＦ（６．３５ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－９２）（１６．１ｇ；８１％）を得た。

【０４２７】

第３工程

（１，３－ジオキソラン－２－イル）メチルトリフェニルホスホニウムブロミド（２２．８ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れて－３０℃まで冷却する。カリウムｔ－ブトキシド（５．９０ｇ）を加え、－３０℃で１時間撹拌した。化合物（Ｔα－９２）（１６．１ｇ）を加え、室温に戻しつつ６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水

硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔα－９３）（１６．５ｇ；８６％）を得た。

【０４２８】

第４工程

化合物（Ｔα－９３）（１６．５ｇ）を原料として用い、合成例１２αの第２工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－９４）（１４．９ｇ；９０％）を得た。

【０４２９】

第５工程

化合物（Ｔα－９４）（１４．９ｇ）を原料として用い、合成例１２αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－９５）（１１．７ｇ；８８％）を得た。

【０４３０】

第６工程

化合物（Ｔα－９５）（１１．７ｇ）を原料として用い、合成例１２αの第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－９６）（９．４１ｇ；８０％）を得た。

【０４３１】

第７工程

化合物（Ｔα－９６）（５．００ｇ）を原料として用い、合成例６αの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔα－９７）（６．３７ｇ；７０％）を得た。

【０４３２】

第８工程

化合物（Ｔα－９７）（６．３７ｇ）を原料として用い、合成例６αの第４工程と同様の手法により、化合物（１α－５－５３）（３．４０ｇ；８０％）を得た。

【０４３３】

得られた化合物（１α－５－５３）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．２３－７．１９（ｍ，４Ｈ）、７．１３－７．１０（ｍ，２Ｈ）、７．０５－７．０３（ｍ，１Ｈ）、６．２５（ｓ，１Ｈ）、５．８４（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、４．２５（ｔ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．７４（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，２Ｈ）、２．５８（ｑ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，２Ｈ）、２．５０（ｔｔ，Ｊ＝１２．１Ｈｚ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，１Ｈ）、２．２２（ｔ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，１Ｈ）、２．１０－２．０４（ｍ，２Ｈ）、１．９６－１．８７（ｍ，４Ｈ）、１．５２－１．４４（ｍ，２Ｈ）、１．３３－１．２１（ｍ，９Ｈ）、１．１１－１．０２（ｍ，５Ｈ）、０．９０（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）．

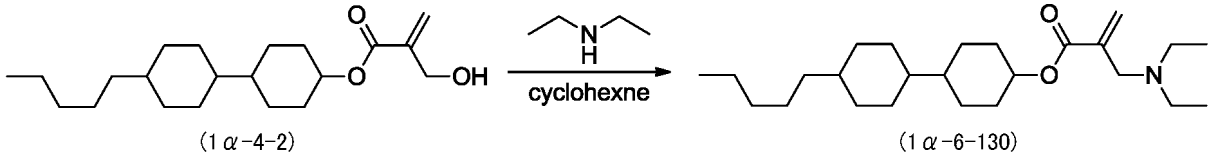
【０４３４】

化合物（１α－５－５３）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　４０．０　Ｉ．

【０４３５】

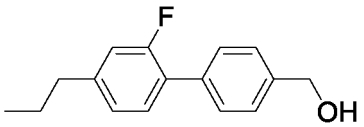
合成例２４α：化合物（１α－６－１３０）の合成



(1α-4-2) (1α-6-130)

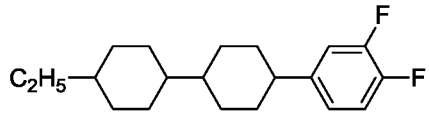
化合物（１α－４－２）（３．００ｇ）、ジエチルアミン（１．３０ｇ）、およびシクロヘキサン（１００ｍｌ）を反応器に入れ、７５℃で１２時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（体積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製して、化合物（１α－６－１３０）（０．５２ｇ；１５％）を得た。

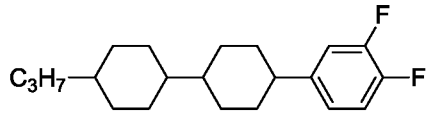
【０４３６】
得られた化合物（１α－６－１３０）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．１８（ｓ，１Ｈ）、５．７４（ｓ，１Ｈ）、４．７４－４．６７（ｍ，１Ｈ）、３．２３（ｓ，２Ｈ）、２．５０（ｑ，Ｊ＝７．１Ｈｚ，４Ｈ）、２．０３－２．０１（ｍ，２Ｈ）、１．７８－１．６８（ｍ，６Ｈ）、１．３７－０．８０（ｍ，２８Ｈ）．
【０４３７】
化合物（１α－６－１３０）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　１４．１　Ｓ$_{A}$　５８．９　Ｉ．
【０４３８】
合成例：比較化合物（Ｓ－１）の合成
比較化合物として、化合物（Ｓ－１）を合成し、特性を測定した。この化合物は、国際公開第２０１４／０９０３６２号パンフレットに記載されており、本発明の化合物に類似しているからである。
【０４３９】

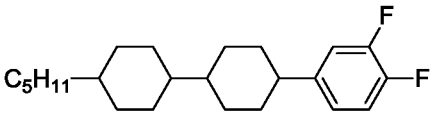


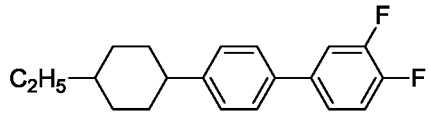
(S-1)

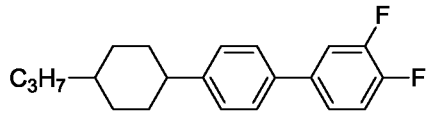
【０４４０】
得られた比較化合物（Ｓ－１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．５７－７．５２（ｍ，２Ｈ）、７．４５－７．４２（ｍ，２Ｈ）、７．３６－７．３０（ｍ，１Ｈ）、７．０４－６．９５（ｍ，２Ｈ）、４．７５（ｄ，６．０Ｈｚ，２Ｈ）、２．６２（ｔ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，２Ｈ）、１．７５－１．６４（ｍ，３Ｈ）、０．９８（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，３Ｈ）．
【０４４１】
［３．実施例１、比較例１］
化合物（１α－４－２２）と比較化合物（Ｓ－１）の垂直配向性および電圧保持率（ＶＨＲ）を比較した。なお、評価には組成物（ｉ）および重合性化合物（Ｍ－１－１）を用いた。
【０４４２】
組成物（ｉ）の成分の割合を重量％で示す。

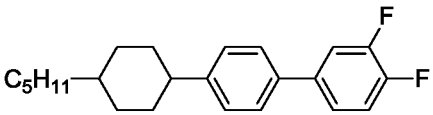

16.67%

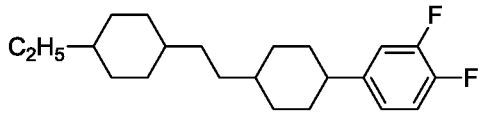

16.67%

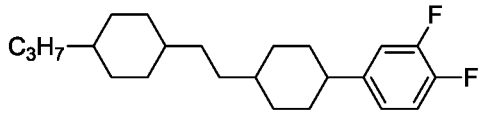

16.67%

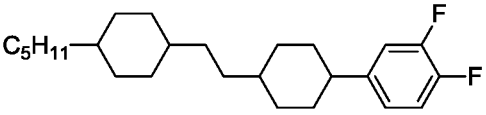

6.25%


6.25%


12.50%

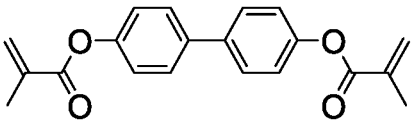

12.50%


6.25%


6.25%

【０４４３】

重合性化合物（Ｍ－１－１）を以下に示す。


(M-1-1)

【０４４４】

・垂直配向性

組成物（ｉ）に重合性化合物（Ｍ－１－１）を０．４重量％の割合で添加した。ここに化合物（１α－４－２２）または比較化合物（Ｓ－１）を３．５重量％の割合で添加した。これらの混合物を２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．５μｍである配向膜を有しない素子に注入し、実施例１、比較例１とした。この素子を偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。液晶分子が充分に配向し、光が素子を通過しない場合は、垂直配向性が「良好」と判断した。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

【０４４５】

・電圧保持率（ＶＨＲ）
上記で作製した素子にアイグラフィックス株式会社製ブラックライト、Ｆ４０Ｔ１０／ＢＬ（ピーク波長３６９ｎｍ）を用いて紫外線を照射（３０Ｊ）することによって、重合性化合物を重合させた。この素子に６０℃でパルス電圧（１Ｖで６０マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で１．６７秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Ａを求めた。面積Ｂは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Ｂに対する面積Ａの百分率で表した。
【０４４６】
【表２】

表2:化合物(1α－4－22)と比較化合物(S－1)の物性

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

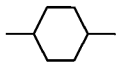
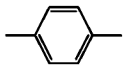
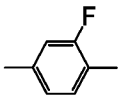
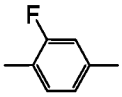
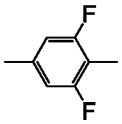
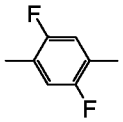
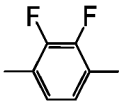
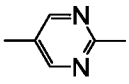
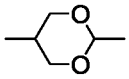
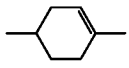
【０４４７】
合成例２αの化合物（１α－４－２２）と比較化合物（Ｓ－１）の物性を表２にまとめた。両方の化合物は共に、配向膜を有しない素子において良好な垂直配向性を示した。一方、化合物（１α－４－２２）を用いた場合、比較化合物（Ｓ－１）を用いた場合よりも電圧保持率が高い。これは比較化合物（Ｓ－１）の様な－ＯＨ基を有する極性化合物は素子の電圧保持率を大きく低下させるが、化合物（１α－４－２２）の様に重合性を付与する事によって、重合性化合物によって生成する重合体に極性化合物が取り込まれる事により、電圧保持率の低下が抑制された為である。したがって化合物（１α－４－２２）の方が、素子の電圧保持率を低下させる事無く良好な垂直配向性を示す、優れた化合物であると言える。
【０４４８】
［４．実施例２、実施例３、比較例２］
化合物（１α－４－２）と比較化合物（Ｓ－１）の電圧保持率（ＶＨＲ）を比較した。なお、評価には組成物（ｉｉ）および重合性化合物（Ｍ－１－３）を用いた。
【０４４９】
組成物中の化合物は、下記の表３の定義に基づいて記号により表した。表３において、１，４－シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。記号の後にあるかっこ内の番号は化合物の番号に対応する。（－）の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合（百分率）は、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）である。最後に、液晶組成物の特性値をまとめた。特性は、先に記載した方法にしたがって測定し、測定値を（外挿することなく）そのまま記載した。
【０４５０】

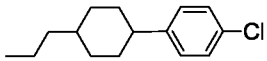
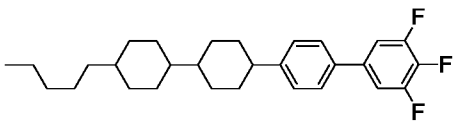
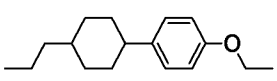
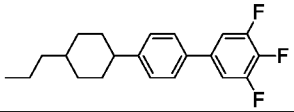
【表３】

表3．記号を用いた化合物の表記法

R-(A$_1$)-Z$_1$-・・・・・-Z$_n$-(A$_n$)-R'

1）左末端基 R-	記号
C_nH_{2n+1}-	n-
$C_nH_{2n+1}O$-	nO-
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}$-	mOn-
CH_2=CH-	V-
C_nH_{2n+1}-CH=CH-	nV-
CH_2=CH-C_nH_{2n}-	Vn-
C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-	mVn-
CF_2=CH-	VFF-
CF_2=CH-C_nH_{2n}-	VFFn-
2）右末端基 -R'	記号
-C_nH_{2n+1}	-n
-OC_nH_{2n+1}	-On
-$COOCH_3$	-EMe
-CH=CH_2	-V
-CH=CH-C_nH_{2n+1}	-Vn
-C_nH_{2n}-CH=CH_2	-nV
-C_mH_{2m}-CH=CH-C_nH_{2n+1}	-mVn
-CH=CF_2	-VFF
-F	-F
-Cl	-CL
-OCF_3	-OCF3
-OCF_2H	-OCF2H
-CF_3	-CF3
-OCH=CH-CF_3	-OVCF3
-C≡N	-C
3）結合基 -Z$_n$-	記号
-C_nH_{2n}-	n
-COO-	E
-CH=CH-	V
-CH_2O-	1O
-OCH_2-	O1
-CF_2O-	X
-C≡C-	T

4）環構造 -A$_n$-	記号
	H
	B
	B(F)
	B(2F)
	B(F,F)
	B(2F,5F)
	B(2F,3F)
	Py
	G
	ch

5）表記例	
例1 3-HB-CL	例2 5-HHBB(F,F)-F
	
例3 3-HB-O2	例4 3-HBB(F,F)-F
	

【０４５１】

組成物（ｉｉ）の成分の割合を重量％で示す。

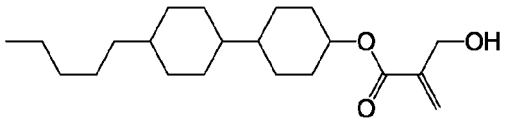
３－ＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１）	１８％
３－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－６）	９％
２－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	６％
３－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	１０％
４－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	８％
２－ＨＨ－３	（３－１）	２５％
３－ＨＨ－４	（３－１）	１０％
１－ＢＢ－３	（３－３）	５％
３－ＨＢＢ－２	（３－６）	９％

ＮＩ＝７６．１℃；η＝１６．１ｍＰａ・ｓ；Δｎ＝０．１００；Δε＝－２．５；Ｖｔｈ＝２．４Ｖ．

【０４５２】

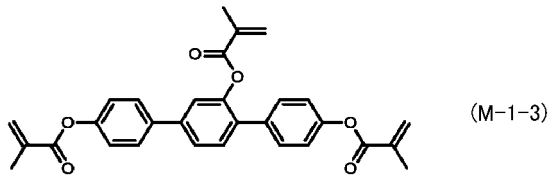
・実施例２

上記の組成物（ｉｉ）に下記の化合物（１α－４－２）を３重量％の割合で添加した。



(1α-4-2)

さらに加えて、下記の化合物（Ｍ－１－３）を０．３重量％の割合で添加した。この組成物を２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．５μｍである配向膜を有しない素子に注入して作製した素子に、アイグラフィックス株式会社製ブラックライト、Ｆ４０Ｔ１０／ＢＬ（ピーク波長３６９ｎｍ）を用いて紫外線を照射（４０Ｊ）することによって、重合性化合物を重合させて、実施例２とした。

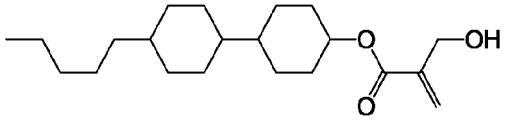


(M-1-3)

【０４５３】

・実施例３

上記の組成物（ｉｉ）に下記の化合物（１α－４－２）を３重量％の割合で添加した。この組成物を２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．５μｍである配向膜を有しない素子に注入して作製した素子に、アイグラフィックス株式会社製ブラックライト、Ｆ４０Ｔ１０／ＢＬ（ピーク波長３６９ｎｍ）を用いて紫外線を照射（６０Ｊ）することによって、重合性化合物を重合させて、実施例３とした。



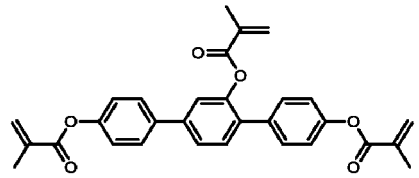
(1α-4-2)

【０４５４】

・比較例２

上記の組成物（ｉｉ）に比較例１で用いた比較化合物（Ｓ－１）を３．５重量％の割合で添加した。

さらに加えて、下記の化合物（Ｍ－１－３）を０．４重量％の割合で添加した。この組成物を２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．５μｍである配向膜を有しない素子に注入して作製した素子に、アイグラフィックス株式会社製ブラックライト、Ｆ４０Ｔ１０／ＢＬ（ピーク波長３６９ｎｍ）を用いて紫外線を照射（４０Ｊ）することによって、重合性化合物を重合させて、比較例２とした。



(M-1-3)

【０４５５】

実施例２～３、比較例２の素子について、電圧保持率（ＶＨＲ）を測定した。

【表４】

表4:電圧保持率(VHR)

	液晶組成物	極性化合物		重合性化合物		VHR/1V,0.3Hz 60℃(%)		
		化合物	添加量	化合物	添加量	0h	250h	500hr
実施例２	組成物(ii)	1α-4-2	3wt%	M-1-3	0.3wt%	96.3	95.8	94.9
実施例３	組成物(ii)	1α-4-2	3wt%	-	-	93.7	92.4	90.2
比較例２	組成物(ii)	S-1	3.5wt%	M-1-3	0.4wt%	72.9	-	-

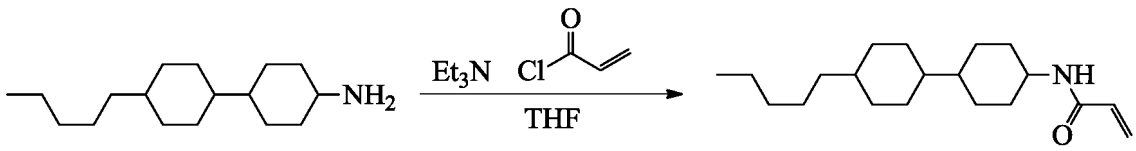
化合物（１α－４－２）を用いた場合、比較例２の比較化合物（Ｓ－１）を用いた場合よりも電圧保持率が高い。これは、比較化合物（Ｓ－１）の様な－ＯＨ基を有する極性化合物は素子の電圧保持率を大きく低下させるが、化合物（１α－４－２）の様な重合性の極性化合物は生成する重合体に極性化合物が取り込まれる事により、電圧保持率の低下が抑制された為である。したがって化合物（１α－４－２）の方が、素子の電圧保持率を低下させる事の無い、優れた化合物であると言える。

また、実施例２および実施例３の素子については、バックライト上に所定の時間放置した後の電圧保持率を測定したところ、表４に示すとおり高い値を維持した。

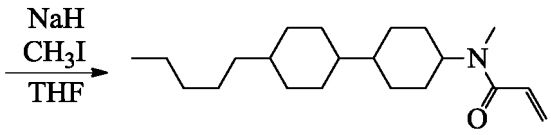
【０４５６】

［５．化合物（１β）の合成例］

合成例１β：化合物（１β－４－３）の合成



(Tβ-1) (Tβ-2)



(1β-4-3)

【０４５７】

第１工程

化合物（Ｔβ－１）（２５．０ｇ）、トリエチルアミン（１６．６５ｍｌ）、およびＴＨＦ（３００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへアクリルクロライド（９．７ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ６時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、化合物（Ｔβ－２）（１６．４ｇ；５４％）を得た。

【０４５８】

第２工程

水素化ナトリウム（２．５７ｇ）とＴＨＦ（３００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ化合物（Ｔβ－２）（１６．４ｇ）のＴＨＦ溶液（１００ｍｌ）溶液をゆっくり滴下し、１時間撹拌した。そこへヨウ化メチル（３．７ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ３時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝４：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（１β－４－３）（１４．２ｇ；８３％）を得た。

【０４５９】

得られた化合物（１β－４－３）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．５６（ｍ，１Ｈ）、６．２７（ｔ，１Ｈ）、５．６５（ｔ，１Ｈ）、４．４５（ｍ，１Ｈ）、２．９０（ｓ，３Ｈ）、１．８３－１．５２（ｍ，８Ｈ）、１．４３－１．２０（ｍ，８Ｈ）、１．１８－０．９２（ｍ，９Ｈ）、０．８９－０．８０（ｍ，５Ｈ）．

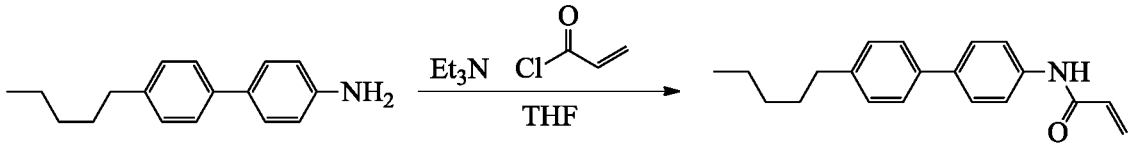
【０４６０】

化合物（１β－４－３）の物性は、次のとおりであった。

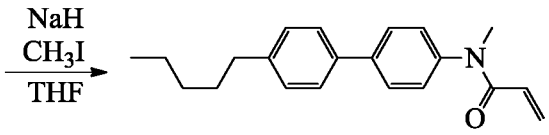
転移温度：Ｃ　５６．９　Ｉ．

【０４６１】

合成例２β：化合物（１β－４－４５）の合成



(Tβ-3)　　(Tβ-4)



(1β-4-45)

【０４６２】

第１工程

化合物（Ｔβ－３）（２５．０ｇ）、トリエチルアミン（１６．０ｍｌ）、およびＴＨＦ（３００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへアクリルクロライド（９．２８ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ６時間撹拌した。不溶物をろ別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、化合物（Ｔβ－４）（１５．６ｇ；５１％）を得た。

【０４６３】

第２工程

水素化ナトリウム（２．５５ｇ）とＴＨＦ（３００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ化合物（Ｔβ－４）（１５．６ｇ）のＴＨＦ溶液（１００ｍｌ）溶液をゆっくり滴下し、１時間撹拌した。そこへヨウ化メチル（３．６ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ３時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝４：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化

合物（１β－４－４５）（１３．０ｇ；８０％）を得た。

【０４６４】

得られた化合物（１β－４－４５）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．５１（ｍ，４Ｈ）、７．２３（ｍ，４Ｈ）、６．５４（ｍ，１Ｈ）、６．２５（ｔ，１Ｈ）、５．６３（ｔ，１Ｈ）、２．９５（ｓ，３Ｈ）、２．６２（ｔ，２Ｈ）、１．６７－１．６２（ｍ，２Ｈ）、１．３７－１．３３（ｍ，４Ｈ）、０．９０（ｓ，３Ｈ）．

【０４６５】

化合物（１β－４－４５）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５８．０　Ｉ．

【０４６６】

［６．実施例１１、比較例１１］

化合物（１β－４－３）と比較化合物（Ｓ－１）の垂直配向性および電圧保持率（ＶＨＲ）を比較した。評価には組成物（ｉ）および重合性化合物（Ｍ－１－１）を用いた。なお、比較化合物（Ｓ－１）、組成物（ｉ）、重合性化合物（Ｍ－１－１）は、実施例１で用いたものと同一である。

【０４６７】

・垂直配向性

組成物（ｉ）に重合性化合物（Ｍ－１－１）を０．４重量％の割合で添加した。ここに化合物（１β－４－３）または比較化合物（Ｓ－１）を３．０重量％の割合で添加した。これらの混合物を２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．５μｍである配向膜を有しない素子に注入し、実施例１１、比較例１１とした。この素子を偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。液晶分子が充分に配向し、光が素子を通過しない場合は、垂直配向性が「良好」と判断した。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

【０４６８】

・電圧保持率（ＶＨＲ）

上記で作成した素子に６０℃でパルス電圧（１Ｖで６０マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で０．０１６７秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Ａを求めた。面積Ｂは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Ｂに対する面積Ａの百分率で表した。

【０４６９】

【表５】

表５:化合物(1β－4－3)と比較化合物(S－1)の物性

	実施例11 化合物(1β－4－3)	比較例11 比較化合物(S－1)
垂直配向性	良好	良好
電圧保持率(VHR)	95.2%	47.7%

【０４７０】

合成例１βの化合物（１β－４－３）と比較化合物（Ｓ－１）の物性を表５にまとめた。両方の化合物は共に、配向膜を有しない素子において良好な垂直配向性を示した。一方、化合物（１β－４－３）を用いた場合、比較化合物（Ｓ－１）を用いた場合よりも電圧保持率が高い。これは比較化合物（Ｓ－１）の様な－ＯＨ基を有する極性化合物は素子の電圧保持率を大きく低下させるが、アクリルアミド基が電圧保持率の低下を起こさないためである。したがって化合物（１β－４－３）の方が、素子の電圧保持率を低下させる事無く良好な垂直配向性を示す、優れた化合物であると言える。

【０４７１】

［７．実施例１２～１３、比較例１２］

素子としての実施例を以下に示す。

原料

配向膜を有しない素子に、式（１β）で表される（メタ）アクリルアミド基を有する極性化合物を添加した組成物を注入した。紫外線を照射したあと、この素子における液晶分子の垂直配向を検討した。最初に原料を説明する。原料は、組成物（ｉｉｉ）、（ｉｖ）、（メタ）アクリルアミド基を有する極性化合物（１β－４－３）、重合性化合物（Ｍ－１－１）を用いた。

【０４７２】

組成物（ｉｉｉ）の成分の割合を重量％で示す。

３－ＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１）	１０％
５－ＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１）	７％
２－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－４）	７％
３－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－４）	７％
３－Ｂ（２Ｆ，３Ｆ）Ｂ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－５）	３％
２－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－６）	５％
３－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－６）	１０％
２－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	８％
３－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	１０％
２－ＨＨ－３	（３－１）	１４％
３－ＨＢ－Ｏ１	（３－２）	５％
３－ＨＨＢ－１	（３－５）	３％
３－ＨＨＢ－Ｏ１	（３－５）	３％
３－ＨＨＢ－３	（３－５）	４％
２－ＢＢ（Ｆ）Ｂ－３	（３－８）	４％

ＮＩ＝７３．２℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１１３；Δε＝－４．０；Ｖｔｈ＝２．１８Ｖ；η＝２２．６ｍＰａ・ｓ．

【０４７３】

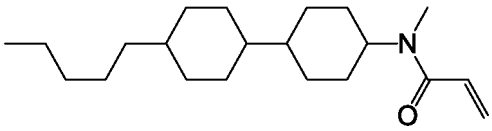
組成物（ｉｖ）の成分の割合を重量％で示す。

Ｖ－ＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１）	１０％
Ｖ２－ＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１）	１０％
２－Ｈ１ＯＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－３）	３％
３－Ｈ１ＯＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－３）	３％
２Ｏ－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－４）	３％
Ｖ２－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－４）	８％
Ｖ２－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－６）	５％
２－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	３％
３－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	３％
Ｖ－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）	６％
Ｖ－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ４	（２－１０）	８％
Ｖ－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｃｌ）－Ｏ２	（２－１２）	７％
３－ＨＨ－４	（３－１）	１４％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（３－５）	１０％
３－ＨＢＢ－２	（３－６）	７％

ＮＩ＝７５．９℃；Ｔｃ＜－２０℃；Δｎ＝０．１１４；Δε＝－３．９；Ｖｔｈ＝２．２０Ｖ；η＝２４．７ｍＰａ・ｓ．

【０４７４】

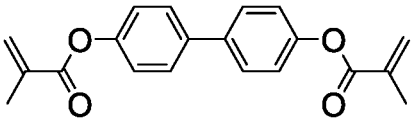
配向性モノマーは、（メタ）アクリルアミド基を有する極性化合物（１β－４－３）である。なお、窒素と直接結合する水素がある場合、即ち式（１β）におけるM^1が水素のときのみ、（メタ）アクリルアミド基の構造を明確にするために、構造式においてＮＨの表記を行った。



(1β-4-3)

【０４７５】

重合性化合物は、重合性化合物（Ｍ－１－１）である。



(M-1-1)

【０４７６】

液晶分子の垂直配向

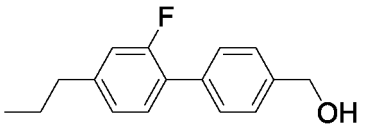
・実施例１２

組成物（ｉｉｉ）に（メタ）アクリルアミド基を有する極性化合物（１β－４－３）を５重量％の割合で添加した。この混合物を１００℃のホットステージ上で２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が４．０μｍである、配向膜を有しない素子に注入した。この素子に超高圧水銀ランプＵＳＨ－２５０－ＢＹ（ウシオ電機株式会社製）を用いて紫外線を照射（２８Ｊ）することによって、（メタ）アクリルアミド基を有する極性化合物（１β－４－３）を重合させた。この素子を偏光子と検光子が直行して配置された偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。液晶分子が充分に配向し、光が素子を通過しない場合は、垂直配向が「良好」と判断した。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

【０４７７】

・実施例１３、比較例１２

実施例１３では、組成物に（メタ）アクリルアミド基を有する極性化合物を添加して調製した混合物を用いて配向膜を有しない素子を作製した。実施例１２と同様な方法で光漏れの有無を観察した。結果を表にまとめた。実施例１３では、０．５重量％の割合で重合性化合物（Ｍ－１－１）も添加した。比較例１２では、比較するために、下記の極性化合物（Ｓ－１）を選んだ。この化合物は、重合性基を有していないので、化合物（１β）とは異なるからである。



(S-1)

【０４７８】

【表６】

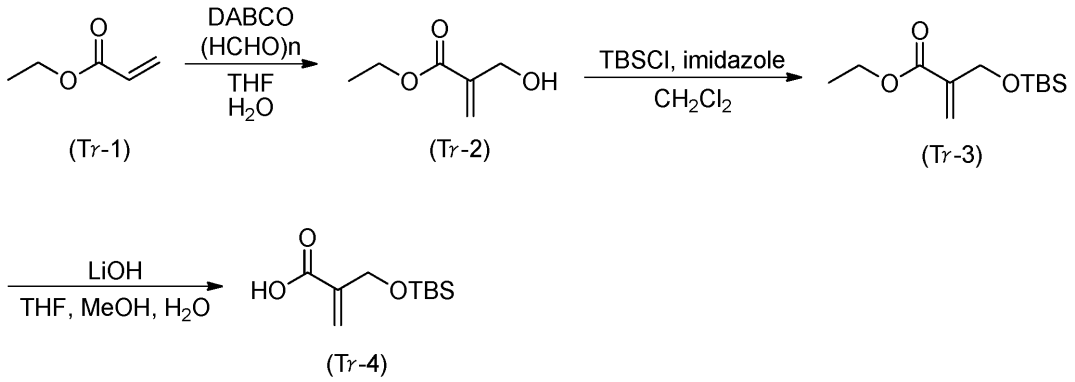
表６:分子の垂直配向性

	液晶組成物	極性化合物（5 重量%）	重合性化合物（0.5 重量%）	垂直配向
実施例12	組成物(iii)	1β-4-3	―	良好
実施例13	組成物(iv)	1β-4-3	M-1-1	良好
比較例12	組成物(iii)	S-1	―	不良

【０４７９】

［８．化合物（１γ）の合成例］

合成例１γ：化合物（１γ－２－７）の合成



(Tγ-1) (Tγ-2) (Tγ-3) (Tγ-4)

【０４８０】

第１工程

パラホルムアルデヒド（６０．０ｇ）、ＤＡＢＣＯ（５６．０ｇ）、および、水（２００ｍｌ）を反応器に入れ、室温で１５分間撹拌した。化合物（Ｔγ－１）（５０．０ｇ）のＴＨＦ（４００ｍｌ）溶液を滴下し、室温で７２時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝２：１）で精製し、化合物（Ｔγ－２）（４４．１ｇ；６８％）を得た。

【０４８１】

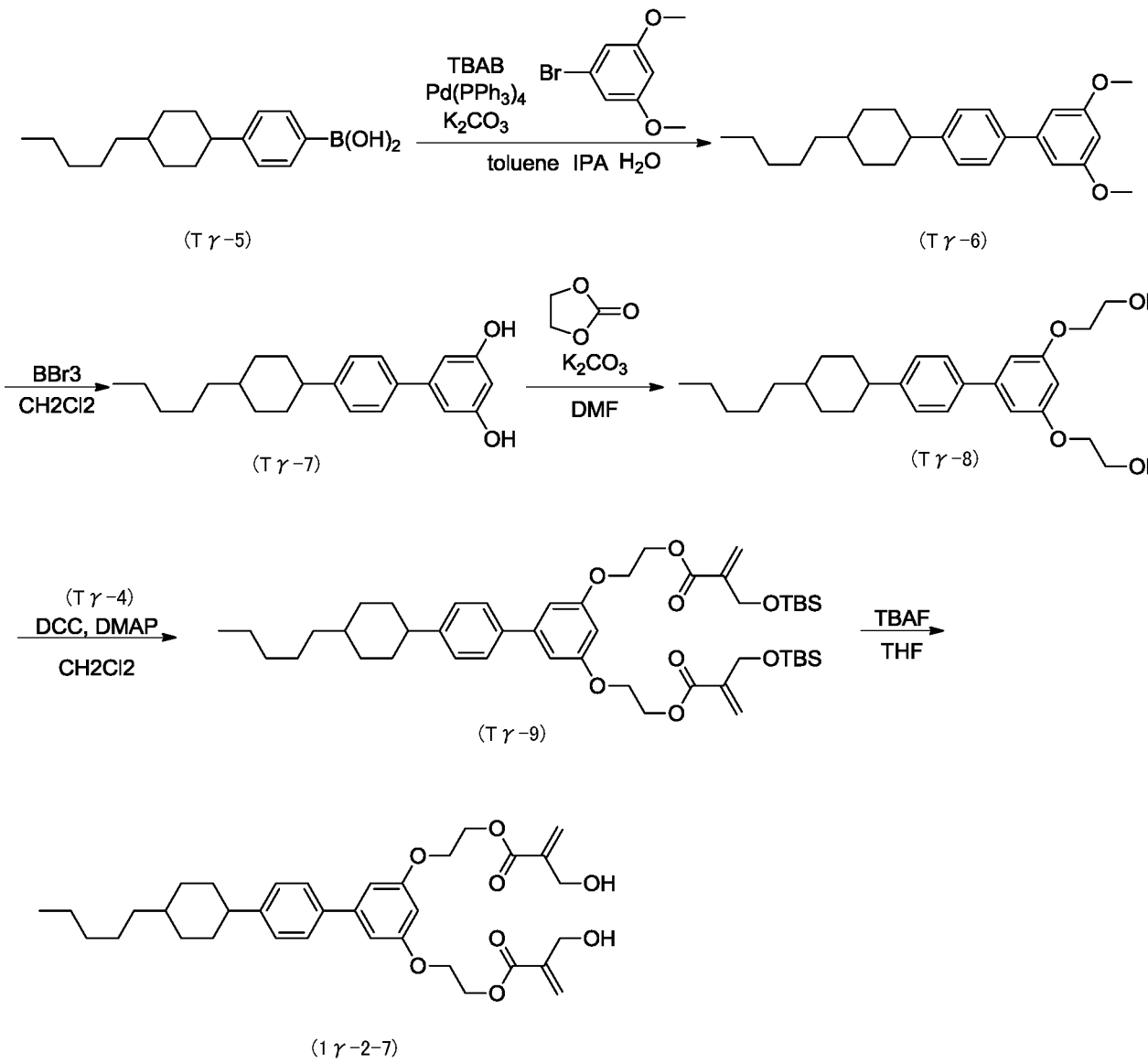
第２工程

化合物（Ｔγ－２）（４４．１ｇ）、イミダゾール（２５．０ｇ）をジクロロメタン（４００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで冷却する。ｔｅｒｔ－ブチルジメチルクロロシラン（５３ｇ）のジクロロメタン溶液（２００ｍｌ）を滴下し、室温まで昇温しながら４時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、化合物（Ｔγ－３）（１０５ｇ；８４％）を得た。

【０４８２】

第３工程

化合物（Ｔγ－３）（１０５ｇ）、ＴＨＦ（６００ｍｌ）、メタノール（１５０ｍｌ）、および水（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ水酸化リチウム一水和物（１７．４ｇ）を加え、室温に戻しつつ１２時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、６Ｎ塩酸（２０ｍｌ）をゆっくりと加え酸性にした後、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮して、化合物（Ｔγ－４）（３４．０ｇ；３５％）を得た。



【０４８３】

第４工程

化合物（Ｔγ－５）（７．５ｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム１．３ｇ）、ＴＢＡＢ（テトラブチルアンモニウムブロミド）（１．５ｇ）、炭酸カリウム（６．４ｇ）、１－ブロモ－３，５－ジメトキシベンゼン（５ｇ）、トルエン（２００ｍｌ）、ＩＰＡ（２－プロパノール）（８０ｍｌ）、純水（２０ｍｌ）を反応器に入れ、９０℃で撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（Ｔγ－６）（７．１８ｇ；８５％）を得た。

【０４８４】

第５工程

化合物（Ｔγ－６）（７．１８ｇ）、ジクロロメタン（２００ｍｌ）を反応器に入れ、撹拌しながら－５０まで冷却する。三臭化ホウ素（２．１ｍｌ）を滴下した。室温まで昇温しながら、５時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製し、化合物（Ｔγ－７）（５．３ｇ；８０％）を得た。

【０４８５】

第６工程

化合物（Ｔγ－７）（５．３ｇ）、エチレンカルボナート（３．０ｇ）、炭酸カリウム（６．５ｇ）、及びＤＭＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、１００℃で撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製し、化合物（Ｔγ－８）（５．５ｇ；８３％）を得た。

【０４８６】

第７工程

化合物（Ｔγ－８）（５．３ｇ）、化合物（Ｔγ－４）（５．９ｇ）、ＤＭＡＰ（１．５２ｇ）及び、ジクロロメタン（１５０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで撹拌しながら冷却した。ＤＣＣ（７．７ｇ）のジクロロメタン溶液（５０ｍｌ）を滴下した。室温まで昇温しながら、５時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝１：１）で精製し、化合物（Ｔγ－９）（８．３ｇ；８１％）を得た。

【０４８７】

第８工程

化合物（Ｔγ－９）（８．３ｇ）、ＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れ、撹拌しながら０℃まで冷却した。ＴＢＡＦ（２．９ｇ）を滴下し、室温まで昇温しながら３時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製し、さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（１γ－２－７）（４．５ｇ；７５％）を得た。

【０４８８】

得られた化合物（１γ－２－７）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．４８－７．４６（ｍ，２Ｈ）、７．２７－７．２６（ｍ，２Ｈ）、６．７５（ｄ，Ｊ＝２．３Ｈｚ，２Ｈ）、６．４７－６．４６（ｍ，１Ｈ）、６．３０（ｓ，２Ｈ）、５．８６（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，２Ｈ）、４．５４（ｔ，Ｊ＝４．４Ｈｚ，４Ｈ）、４．３３（ｓ，４Ｈ）、４．２７－４．２５（ｍ，４Ｈ）、２．５２－２．４７（ｍ，１Ｈ）、２．３４（ｓ，２Ｈ）、１．９０（ｔ，Ｊ＝１４Ｈｚ，４Ｈ）、１．５１－１．４４（ｍ，２Ｈ）、１．３５－１．２０（ｍ，９Ｈ）、１．０９－１．０２（ｍ，２Ｈ）、０．９０（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）．

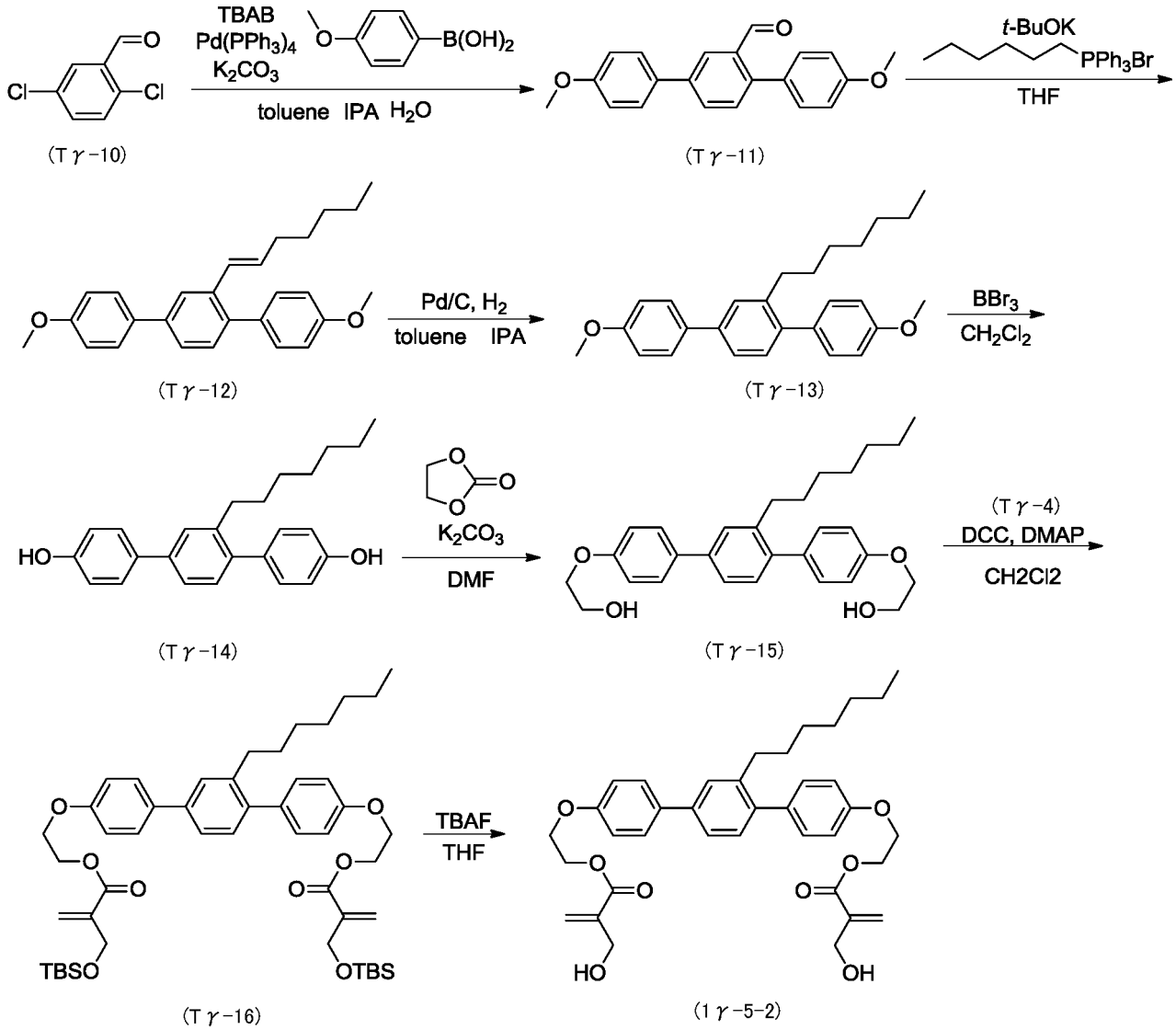
【０４８９】

化合物（１γ－２－７）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５８．８

【０４９０】

合成例２γ：化合物（１γ－５－２）の合成



【０４９１】

第１工程

化合物（Ｔγ－１０）（１０．０ｇ）、４－メトキシフェニルボロン酸（１９．１ｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（１．９ｇ）、炭酸カリウム（１５．８ｇ）、ＴＢＡＢ（３．７ｇ）、トルエン（２００ｍｌ）、ＩＰＡ（８０ｍｌ）、純水（２０ｍｌ）を反応器に入れ、９０℃で撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、さらにヘプタンとトルエンとの混合溶媒（容積比、１：１）からの再結晶により精製して、化合物（Ｔγ－１１）（１４．９ｇ；８２％）を得た。

【０４９２】

第２工程

ヘキシルトリフェニルホスホニウムブロミド（２２．０ｇ）、ＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れ、－３０℃まで冷却しながら撹拌した。ｔｅｒｔ－ブトキシドカリウム（５．７ｇ）を入れ、－３０℃で１時間撹拌した。化合物（Ｔγ－１１）（１４．９ｇ）のＴＨＦ溶液（１００ｍｌ）を滴下し、室温まで昇温しながら４時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（トルエン）で精製し、化合物（Ｔγ－１２）（１６．２ｇ；９０％）を得た。

【０４９３】

第３工程

化合物（Ｔγ－１２）（１６．２ｇ）、Ｐｄ／Ｃ（０．２ｇ）、トルエン（１００ｍｌ）、ＩＰＡ（１００ｍｌ）を反応器に入れ、水素雰囲気下で１０時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（トルエン）で精製し、化合物（Ｔγ－１３）（１５．５ｇ；９５％）を得た。

【０４９４】

第４工程

化合物（Ｔγ－１３）（１５．５ｇ）、ジクロロメタン（２００ｍｌ）を反応器に入れ、－５０℃まで冷却しながら撹拌した。三臭化ホウ素（２２．０ｇ）を滴下し、室温まで昇温しながら５時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝８：２）で精製し、化合物（Ｔγ－１４）（１３．０ｇ；９０％）を得た。

【０４９５】

第５工程

化合物（Ｔγ－１４）（１３．０ｇ）、エチレンカルボナート（９．５ｇ）、炭酸カリウム（１５．０ｇ）、及びＤＭＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、１００℃で撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝８：２）で精製し、化合物（Ｔγ－１５）（１３．６ｇ；８４％）を得た。

【０４９６】

第６工程

化合物（Ｔγ－１５）（１３．６ｇ）、化合物（Ｔγ－４）（１４．４ｇ）、ＤＭＡＰ（１．８５ｇ）及び、ジクロロメタン（３５０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで撹拌しながら冷却した。ＤＣＣ（１８．８ｇ）のジクロロメタン溶液（１５０ｍｌ）を滴下した。室温まで昇温しながら、５時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、化合物（Ｔγ－１６）（１９．２ｇ；７５％）を得た。

【０４９７】

第７工程

化合物（Ｔγ－１６）（１９．２ｇ）、ＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、撹拌しながら０℃まで冷却した。ＴＢＡＦ（６．５ｇ）を滴下し、室温まで昇温しながら３時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製し、さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（１γ－５－２）（９．８；７０％）を得た。

【０４９８】

得られた化合物（１γ－５－２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．６５－７．５５（ｍ，２Ｈ）、７．４５（ｄ，Ｊ＝１．６Ｈｚ，１Ｈ）、７．３９（ｄｄ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ）、７．２５－７．２２（ｍ，３Ｈ）、７．１３（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，２Ｈ）、６．９８－６．９３（ｍ，４Ｈ）、６．８４（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ）、６．２９（ｓ，１Ｈ）、５．８５（ｄ，Ｊ＝１．２Ｈｚ，１Ｈ）、４．５２（ｔ，Ｊ＝４．８Ｈｚ，２Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，２Ｈ）、４．２１（ｔ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ）、６．２７（ｄ，Ｊ＝３．５Ｈｚ，２Ｈ）、５．８５（ｓ，１Ｈ）、４．３５－４．２８（ｍ，８Ｈ）、４．０６－４．０４（ｍ，４Ｈ）、２．６２（

ｔ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，２Ｈ）、２．３０（ｓ，２Ｈ）、１．９３－１．９２（ｍ，８Ｈ）、１．５８－１．４８（ｍ，２Ｈ）、１．２６－１．１７（ｍ，８Ｈ）、０．８４（ｔ，６．９Ｈｚ，３Ｈ）．

【０４９９】

化合物（１γ－５－２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　４４．０　Ｉ．

【０５００】

［９．実施例２１、比較例２１］

化合物（１γ－２－７）と比較化合物（Ｓ－１）の垂直配向性を比較した。評価には組成物（ｉ）および重合性化合物（Ｍ－１－１）を用いた。なお、比較化合物（Ｓ－１）、組成物（ｉ）、重合性化合物（Ｍ－１－１）は、実施例１で用いたものと同一である。

【０５０１】

・垂直配向性

組成物（ｉ）に重合性化合物（Ｍ－１－１）を０．４重量％の割合で添加した。ここに化合物（１γ－２－７）または比較化合物（Ｓ－１）を０．５％から３．０％の割合で添加した。これらの混合物を２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が３．５μｍである配向膜を有しない素子に注入し、実施例２１、比較例２１とした。この素子を偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。液晶分子が充分に配向し、光が素子を通過しない場合は、垂直配向性が「良好」と判断した。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

【０５０２】

【表７】

表６:化合物(１γ－２－７)と比較化合物(Ｓ－１)の配向性

添加濃度(％)	実施例21 化合物(１γ－２－７)	比較例21 比較化合物(Ｓ－１)
0.5	良好	不良
1.0	良好	不良
2.0	良好	不良
3.0	良好	良好

【０５０３】

化合物（１γ－２－７）と比較化合物（Ｓ－１）の垂直配向性を表７にまとめた。比較化合物（Ｓ－１）では、３．０％で垂直配向性が確認された。一方、化合物（１γ－２－７）を用いた場合では０．５％の添加で垂直配向性が確認され、比較化合物（Ｓ－１）に比べ低濃度で良好な垂直配向性を示した。これは、化合物（１γ－２－７）が垂直配向を誘起する－ＯＨ基を複数有する事で、垂直配向性が強くなった為である。したがって、化合物（１γ－２－７）の方が、低濃度で良好な垂直配向性を示す、優れた化合物であると言える。

【０５０４】

［１０．実施例２２～２３、比較例２２］

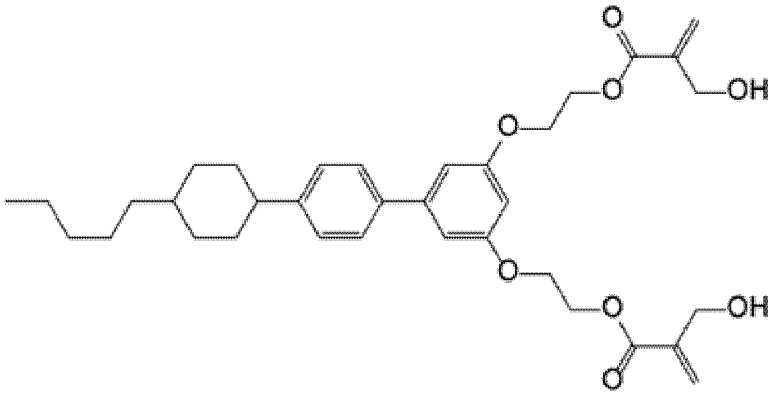
素子としての実施例を以下に示す。

原料

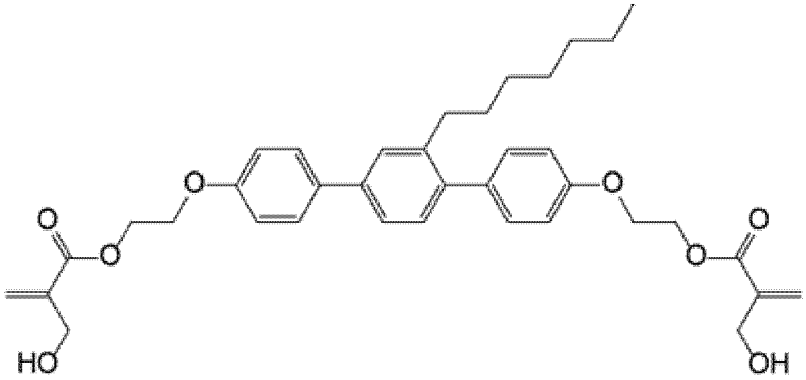
配向膜を有しない素子に、極性化合物を添加した組成物を注入した。紫外線を照射したあと、この素子における液晶分子の垂直配向を検討した。最初に原料を説明する。原料は、組成物（ｉｉｉ）、（ｉｖ）、極性化合物（１γ－２－７）、（１γ－５－２）、重合性化合物（Ｍ－１－１）を用いた。なお、組成物（ｉｉｉ）、（ｉｖ）、重合性化合物（Ｍ－１－１）は、実施例１２で用いたものと同一である。

【０５０５】

配向性モノマーは、極性化合物（１γ－２－７）、（１γ－５－２）である。



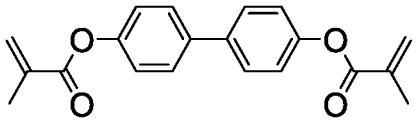
(1γ-2-7)



(1γ-5-2)

【０５０６】

重合性化合物は、重合性化合物（Ｍ－１－１）である。



(M-1-1)

【０５０７】

液晶分子の垂直配向

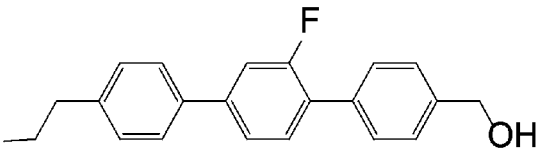
・実施例２２

組成物（ｉｉｉ）に極性化合物（１γ－２－７）を５重量％の割合で添加した。この混合物を１００℃のホットステージ上で２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が４．０μｍである、配向膜を有しない素子に注入した。この素子に超高圧水銀ランプＵＳＨ－２５０－ＢＹ（ウシオ電機株式会社製）を用いて紫外線を照射（２８Ｊ）することによって、極性化合物（１γ－２－７）を重合させた。この素子を偏光子と検光子が直行して配置された偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。光が素子を通過しない場合は、垂直配向が「良好」であると判断した。液晶分子が充分に配向したと推定されるからである。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

【０５０８】

・実施例２３、比較例２２

組成物に重合性基を有する極性化合物を添加して調製した混合物を用いて配向膜を有しない素子を作製した。実施例２２と同様な方法で光漏れの有無を観察した。結果を表８にまとめた。実施例２３では、０．５重量％の割合で重合性化合物（Ｍ－１－１）も添加した。比較例２２では、比較するために、下記の極性化合物（Ｓ－２）を選んだ。この化合物は、重合性基を有していないので、化合物（１γ）とは異なるからである。



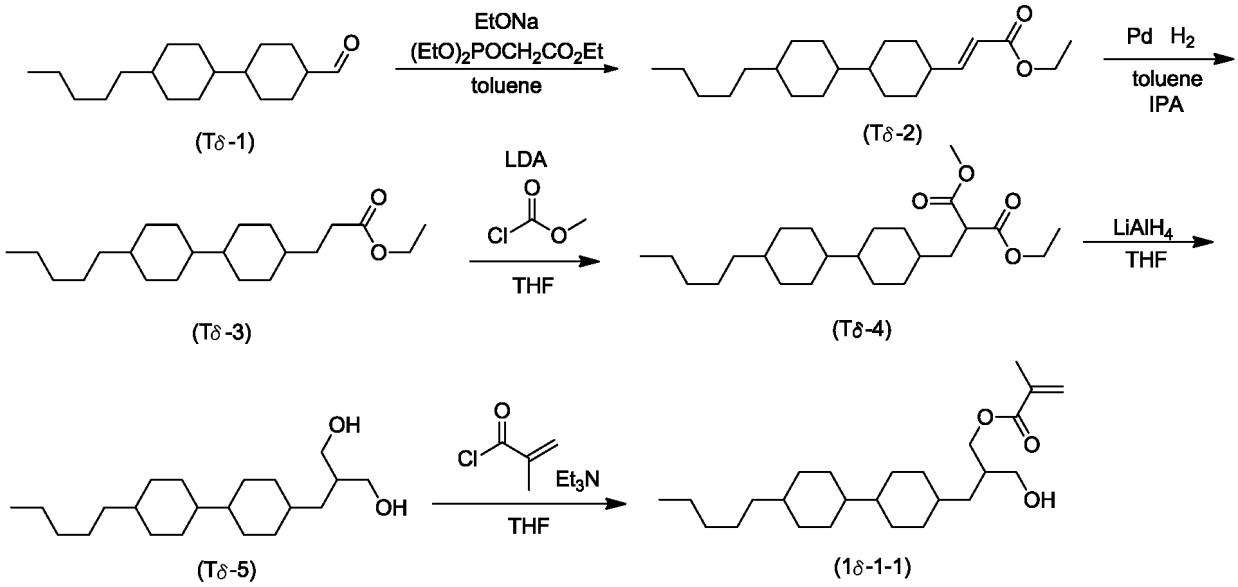
(S-2)

【０５０９】
【表８】

表８:分子の垂直配向性

	液晶組成物	極性化合物（5重量%）	重合性化合物（0.5重量%）	垂直配向
実施例22	組成物(iii)	1γ-2-7	―	良好
実施例23	組成物(iv)	1γ-5-2	M-1-1	良好
比較例22	組成物(iii)	S-2	―	不良

【０５１０】
［１１．化合物（１δ）の合成例］
合成例１δ：化合物（１δ－１－１）の合成
なお、化合物（１δ－１－１）は、化合物（１ε－６－１）と同一である。



【０５１１】
第１工程
化合物（Ｔδ－１）（４０．０ｇ）、ホスホノ酢酸トリエチル（４０．７ｇ）およびトルエン（８００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへナトリウムエトキシド（２０％エタノール溶液）（６１．８ｇ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔδ－２）（４２．０ｇ；８３％）を得た。
【０５１２】
第２工程
化合物（Ｔδ－２）（４２．０ｇ）およびトルエン（４００ｍｌ）、イソプロピルアルコール（４００ｍｌ）を反応器に入れて、Ｐｄ／Ｃ（０．７ｇ）を加える、水素雰囲気で室温で２４時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）

で精製して、化合物（Ｔδ－３）（４０．１ｇ；９５％）を得た。

【０５１３】

第３工程

化合物（Ｔδ－３）（４０．１ｇ）、およびＴＨＦ（４００ｍｌ）を反応器に入れ、－６０℃に冷却した。リチウムジイソプロピルアミド（ＬＤＡ）（１．１３Ｍ；ＴＨＦ溶液；１４２ｍｌ）をゆっくりと滴下し、１時間撹拌した。そこへ、クロロギ酸メチル（１１．０ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ５時間撹拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔδ－４）（３０．５ｇ；６５％）を得た。

【０５１４】

第４工程

水素化アルミニウムリチウム（１．７ｇ）およびＴＨＦ（３００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔδ－４）（３０．５ｇ）のＴＨＦ（６００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔδ－５）（２０．１ｇ；８０％）を得た。

【０５１５】

第５工程

化合物（Ｔδ－５）（２０．１ｇ）、トリエチルアミン（１０．３ｍｌ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへメタクリロイルクロリド（６．０ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ４時間撹拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（１δ－１－１）（７．７ｇ；３２％）を得た。

【０５１６】

得られた化合物（１δ－１－１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．１１（ｓ，１Ｈ）、５．５８（ｓ，１Ｈ）、４．２９－４．２６（ｍ，１Ｈ）、４．１４－４．１１（ｍ，１Ｈ）、３．６０－３．５７（ｍ，１Ｈ）、３．５０－３．４７（ｍ，１Ｈ）、１．９８－１．９５（ｍ，５Ｈ）、１．７８－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．３２－１．１１（ｍ，１２Ｈ）、０．９９－０．８１（ｍ，１３Ｈ）

【０５１７】

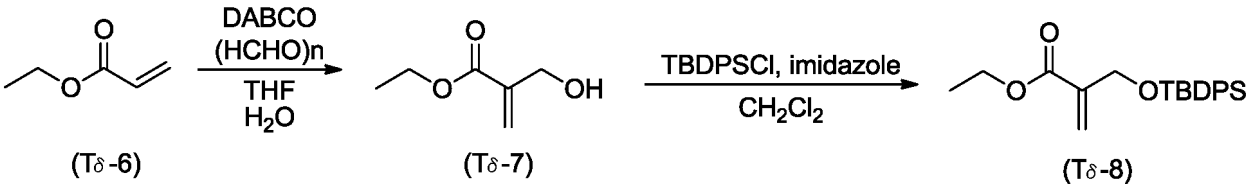
化合物（１δ－１－１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６５．０　Ｉ．

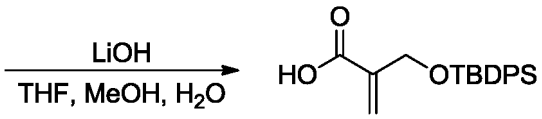
【０５１８】

合成例２δ：化合物（１δ－１－２）の合成

なお、化合物（１δ－１－２）は、化合物（１ε－２－１）と同一である。

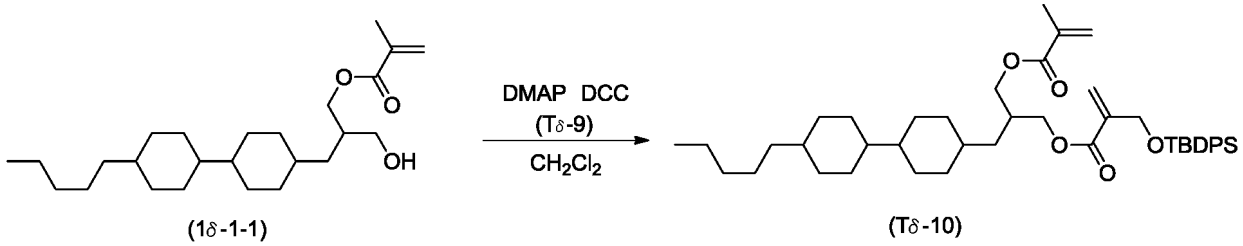


(Tδ-6) (Tδ-7) (Tδ-8)

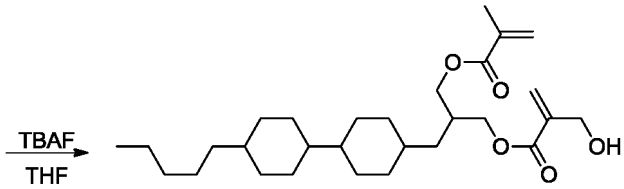


(Tδ-9)

【０５１９】



(1δ-1-1) (Tδ-10)



(1δ-1-2)

【０５２０】

第１工程

パラホルムアルデヒド（３０．０ｇ）、１，４ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン（ＤＡＢＣＯ）（５６．０ｇ）、および水（６００ｍｌ）を反応器に入れ、室温で１５分間撹拌した。そこへ化合物（Ｔδ－６）（５０．０ｇ）のＴＨＦ（１２００ｍｌ）溶液を滴下し、室温で７２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝４：１）で精製して、化合物（Ｔδ－７）（４３．２ｇ；６５％）を得た。

【０５２１】

第２工程

化合物（Ｔδ－７）（４２．２ｇ）を原料として用い、イミダゾール（２６．３ｇ）、およびジクロロメタン（８００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへｔ－ブチルジフェニルクロロシラン（ＴＢＤＰＳＣｌ）（１０６．４ｇ）のジクロロメタン（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝１０：１）で精製して、化合物（Ｔδ－８）（１０７．０ｇ；９０％）を得た。

【０５２２】

第３工程

化合物（Ｔδ－８）（１０７．０ｇ）、ＴＨＦ（８００ｍｌ）、メタノール（２００ｍｌ）、および水（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ水酸化リチウム一水和物（２４．３ｇ）を加え、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注

ぎ込み、６Ｎ塩酸（１００ｍｌ）をゆっくりと加え酸性にした後、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮して、ヘプタンからの再結晶により精製して化合物（Ｔδ－９）（４７．４ｇ；４８％）を得た。

【０５２３】

第４工程

化合物（１δ－１－１）（７．７ｇ）、化合物（Ｔδ－９）（８．０ｇ）、ＤＭＡＰ（１．０ｇ）、およびジクロロメタン（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＮ，Ｎ’－ジシクロヘキシルカルボジイミド（ＤＣＣ）（４．８ｇ）のジクロロメタン（６０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝１９：１）で精製して、化合物（Ｔδ－１０）（９．８ｇ；７０％）を得た。

【０５２４】

第５工程

化合物（Ｔδ－１０）（９．８ｇ）およびＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れて、０℃に冷却した。そこへフッ化テトラ－ｎ－ブチルアンモニウム（ＴＢＡＦ）（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；１６．５ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（１δ－１－２）（３．１ｇ；４７％）を得た。

【０５２５】

得られた化合物（１δ－１－２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、６．１０（ｓ，１Ｈ）、５．８５（ｓ，１Ｈ）、５．５７（ｓ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝４．５Ｈｚ，２Ｈ）、４．２７－４．１６（ｍ，２Ｈ）、４．１３－４．０８（ｍ，２Ｈ）、２．３１（ｓ，１Ｈ）、２．２６－２．２２（ｍ，１Ｈ）、１．９４（ｓ，３Ｈ）、１，８１－１．６１（ｍ，８Ｈ）、１．３２－１．０８（ｍ，１２Ｈ）、１．００－０．７９（ｍ，１３Ｈ）．

【０５２６】

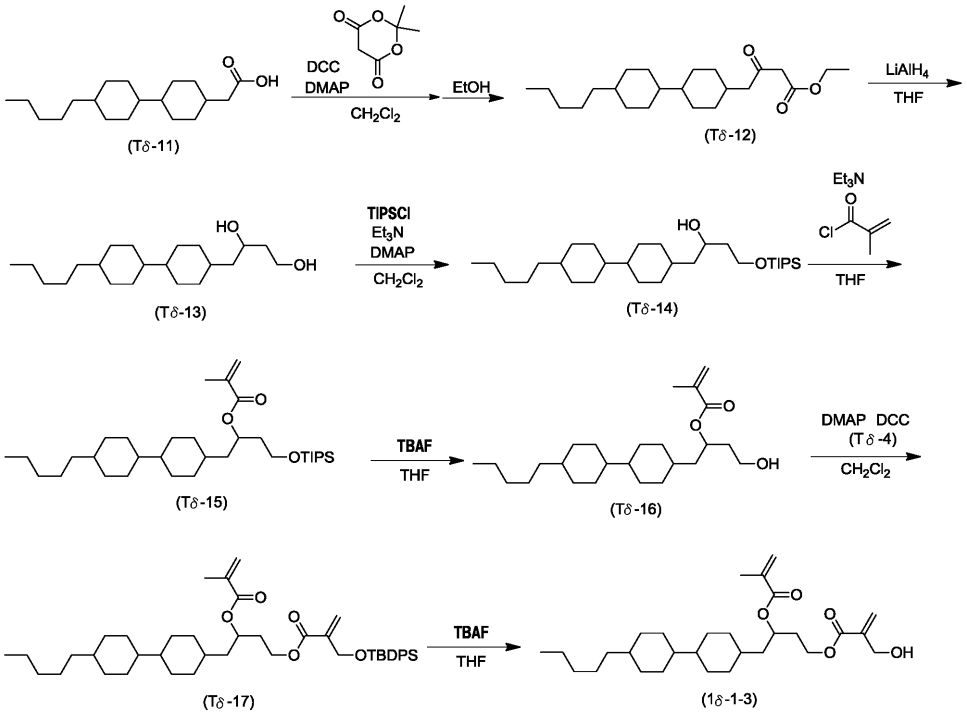
化合物（１δ－１－２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　４９．６　Ｉ．

【０５２７】

合成例３δ：化合物（１δ－１－３）の合成

なお、化合物（１δ－１－３）は、化合物（１ε－２－２）と同一である。



【０５２８】

第１工程

化合物（Ｔδ－１１）（１５．０ｇ）、Ｎ，Ｎ－ジメチル－４－アミノピリジン（ＤＭＡＰ）（９．３３ｇ）、メルドラム酸（９．５４ｇ）およびジクロロメタン（２５０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＮ，Ｎ’－ジシクロヘキシルカルボジイミド（ＤＣＣ）（１５．７ｇ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮した。残渣、エタノール（２５０ｍｌ）を反応器に入れ、７０℃で撹拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を食塩水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：トルエン＝１：１）で精製して、化合物（Ｔδ－１２）（１０．２ｇ；５５％）を得た。

【０５２９】

第２工程

水素化アルミニウムリチウム（０．６ｇ）およびＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔδ－１２）（１０．２ｇ）のＴＨＦ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製して、化合物（Ｔδ－１３）（７．３５ｇ；８１％）を得た。

【０５３０】

第３工程

化合物（Ｔδ－１３）（７．３５ｇ）、トリエチルアミン（３．７５ｍｌ）、Ｎ,Ｎ－ジメチル－４－アミノピリジン（ＤＭＡＰ）（０．２７ｇ）、ジクロロメタン（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。ＴＩＰＳＣｌ（トリイソプロピルシリルクロリド）（５．０５ｍｌ）をゆっくり滴下し、室温に戻しつつ２４時間撹拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１９：１）で精製して

、化合物（Ｔδ－１４）（６．５０ｇ；６０％）を得た。
【０５３１】
第４工程
化合物（Ｔδ－１４）（６．５０ｇ）、トリエチルアミン（３．７７ｍｌ）、ＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへメタクリロイルクロリド（２．００ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ４時間攪拌した。不溶物を濾別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝１：１）で精製して、化合物（Ｔδ－１５）（４．７０ｇ；６３％）を得た。
【０５３２】
第５工程
化合物（Ｔδ－１５）（４．７０ｇ）、ＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＴＢＡＦ（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；１０．３ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、化合物（Ｔδ－１６）（１．５０ｇ；４５％）を得た。
【０５３３】
第６工程
化合物（Ｔδ－１６）（１．５０ｇ）を原料として用い、合成例２δの第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔδ－１７）（１．５１ｇ；５５％）を得た。
【０５３４】
第７工程
化合物（Ｔδ－１７）（１．５１ｇ）を原料として用い、合成例２δの第５工程と同様の手法により、化合物（１δ－１－３）（０．４５ｇ；４５％）を得た。
【０５３５】
得られた化合物（１δ－１－３）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、６．０９（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、５．５５（ｓ，１Ｈ）、５．２２－５．１７（ｍ，１Ｈ）、４．３２－４．２６（ｍ，３Ｈ）、４．１７－４，１２（ｍ，３Ｈ）、２．５０（ｓ，１Ｈ）、２．０３－１．８９（ｍ，５Ｈ）、１．８３－１．５８（ｍ，９Ｈ）、１．４１－１．０８（ｍ，１１Ｈ）、０．９６－０．７８（ｍ，１３Ｈ）．
【０５３６】
化合物（１δ－１－３）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　６１．２　Ｉ．
【０５３７】
［１２．実施例３１～３３、比較例３１］
素子としての実施例を以下に示す。
原料
配向膜を有しない素子に、極性化合物を添加した組成物を注入した。紫外線を照射したあと、この素子における液晶分子の垂直配向を検討した。最初に原料を説明する。原料は、組成物（ｉｉｉ）～（ｖ）、極性化合物（１δ－１－１）、（１δ－１－５）、重合性化合物（Ｍ－１－１）を用いた。なお、組成物（ｉｉｉ）、（ｉｖ）、重合性化合物（Ｍ－１－１）は、実施例１２で用いたものと同一である。
【０５３８】
組成物（ｖ）の成分の割合を重量％で示す。

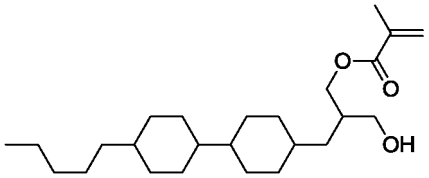
３－ＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１）	７％
３－ＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ４	（２－１）	８％

３－Ｈ２Ｂ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－２）　８％
３－ＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－４）　１０％
２－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－６）　４％
３－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－６）　７％
３－ＨＨＢ（２Ｆ，３Ｆ）－１	（２－６）　６％
２－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）　６％
３－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）　６％
４－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）　５％
５－ＨＢＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１０）　４％
３－ＨＥＢ（２Ｆ，３Ｆ）Ｂ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１１）　３％
３－Ｈ１ＯＣｒｏ（７Ｆ，８Ｆ）－５	（２－１４）　３％
３－ＨＤｈＢ（２Ｆ，３Ｆ）－Ｏ２	（２－１６）　５％
３－ＨＨ－Ｏ１	（３－１）　５％
１－ＢＢ－５	（３－３）　４％
Ｖ－ＨＨＢ－１	（３－５）　４％
５－ＨＢ（Ｆ）ＢＨ－３	（３－１２）　５％

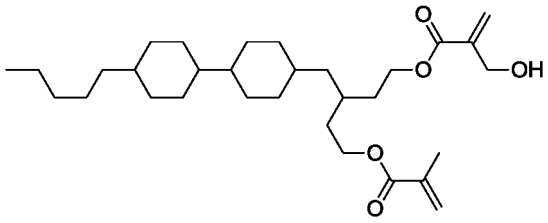
ＮＩ＝８１．１℃；Ｔｃ＜－３０℃；Δｎ＝０．１１９；Δε＝－４．５；Ｖｔｈ＝１．６９Ｖ；η＝３１．４ｍＰａ・ｓ．

【０５３９】

配向性モノマーは、極性化合物（１δ－１－１）、（１δ－１－５）である。



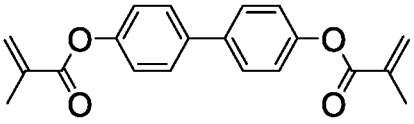
(1δ-1-1)



(1δ-1-5)

【０５４０】

重合性化合物は、重合性化合物（Ｍ－１－１）である。



(M-1-1)

【０５４１】

液晶分子の垂直配向

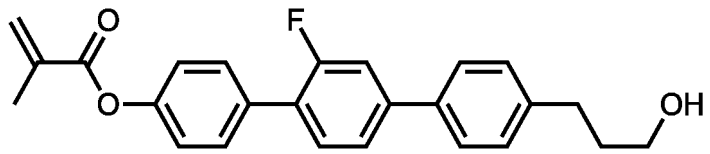
・実施例３１

組成物（ｉｉｉ）に極性化合物（１δ－１－１）を５重量部の割合で添加した。この混合物を１００℃のホットステージ上で２枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が４．０μｍである、配向膜を有しない素子に注入した。この素子に超高圧水銀ランプＵＳＨ－２５０－ＢＹ（ウシオ電機株式会社製）を用いて紫外線を照射（２８Ｊ）することによって、極性化合物（１δ－１－１）を重合させた。この素子を偏光子と検光子が直行して配置された偏光顕微鏡にセットし、下から素子に光を照射し、光漏れの有無を観察した。液晶分子が充分に配向し、光が素子を通過しない場合は、垂直配向が「良好」と判断した。素子を通過した光が観察された場合は、「不良」と表した。

【０５４２】

・実施例３２～３３、比較例３１

組成物および極性化合物を組み合わせた混合物を用いて配向膜を有しない素子を作製した。実施例３１と同様な方法で光漏れの有無を観察した。結果を表９にまとめた。実施例３３では、０．５重量部の割合で重合性化合物（Ｍ－１－１）も添加した。比較例３１では、比較するために、特許文献５に記載の下記のような極性化合物（Ｓ－３）を選んだ。この化合物は、分子末端からの分岐構造を有していないので、化合物（１δ－１）とは異なる。



(S-3)

【０５４３】

【表９】

表９:分子の垂直配向性

	液晶組成物	極性化合物（5 重量部）	重合性化合物（0.5 重量部）	垂直配向
実施例31	組成物(iii)	1δ-1-1	―	良好
実施例32	組成物(v)	1δ-1-5	―	良好
実施例33	組成物(iv)	1δ-1-5	M-1-1	良好
比較例31	組成物(iii)	S-3	―	不良

【０５４４】

表９から分かるように、実施例３１～３３では、組成物や極性化合物の種類および極性化合物の濃度を変えたが、光漏れは観察されなかった。この結果は、素子に配向膜がなくても垂直配向は良好であり、液晶分子が安定に配向していることを示している。実施例３３では、重合性化合物（Ｍ－１－１）をさらに添加したが、同様な結果が得られた。

一方、比較例３１では、光漏れが観察された。この結果は、垂直配向が良好ではなかったことを示している。

【０５４５】

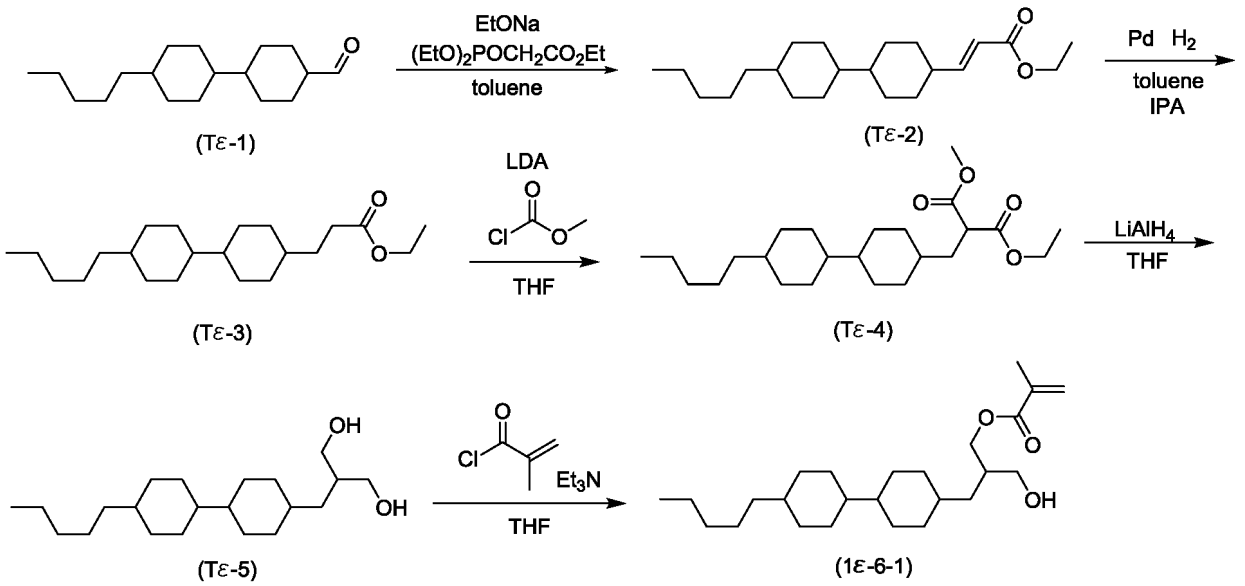
極性化合物の相溶性

上記実施例３１～３３で得られた液晶組成物と極性化合物の混合物の室温状態における安定性を評価した。混合後に１００℃で等方化し２５℃に放冷した。室温で半日経過後に析出の有無を確認したところ、実施例３１～３３の混合物は析出が確認されず、極性化合物の相溶性は良好であった。一方、比較例３１の混合物は析出が確認され、極性化合物の相溶性は不良であった。

【０５４６】

［１３．化合物（１ε）の合成例］

合成例１ε：化合物（１ε－６－１）の合成



【０５４７】

第１工程

化合物（Ｔε－１）（４０．０ｇ）、ホスホノ酢酸トリエチル（４０．７ｇ）およびトルエン（８００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへナトリウムエトキシド（２０％エタノール溶液）（６１．８ｇ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔε－２）（４２．０ｇ；８３％）を得た。

【０５４８】

第２工程

化合物（Ｔε－２）（４２．０ｇ）およびトルエン（４００ｍｌ）、イソプロパノール（４００ｍｌ）を反応器に入れて、Ｐｄ／Ｃ（０．７ｇ）を加える、水素雰囲気で室温で２４時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔε－３）（４０．１ｇ；９５％）を得た。

【０５４９】

第３工程

化合物（Ｔε－３）（４０．１ｇ）、およびＴＨＦ（４００ｍｌ）を反応器に入れ、－６０℃に冷却した。ＬＤＡ（リチウムジイソプロピルアミド）（１．１３Ｍ；ＴＨＦ溶液；１４２ｍｌ）をゆっくりと滴下し、１時間撹拌した。そこへ、クロロギ酸メチル（１１．０ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ５時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔε－４）（３０．５ｇ；６５％）を得た。

【０５５０】

第４工程

水素化アルミニウムリチウム（１．７ｇ）およびＴＨＦ（３００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔε－４）（３０．５ｇ）のＴＨＦ（６００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢

酸エチル＝１：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔε－５）（２０．１ｇ；８０％）を得た。

【０５５１】

第５工程

化合物（Ｔε－５）（２０．１ｇ）、トリエチルアミン（１０．３ｍｌ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへメタクリロイルクロリド（６．０ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ４時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（１ε－６－１）（７．７ｇ；３２％）を得た。

【０５５２】

得られた化合物（１ε－６－１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．１１（ｓ，１Ｈ）、５．５８（ｓ，１Ｈ）、４．２９－４．２６（ｍ，１Ｈ）、４．１４－４．１１（ｍ，１Ｈ）、３．６０－３．５７（ｍ，１Ｈ）、３．５０－３．４７（ｍ，１Ｈ）、１．９８－１．９５（ｍ，５Ｈ）、１．７８－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．３２－１．１１（ｍ，１２Ｈ）、０．９９－０．８１（ｍ，１３Ｈ）

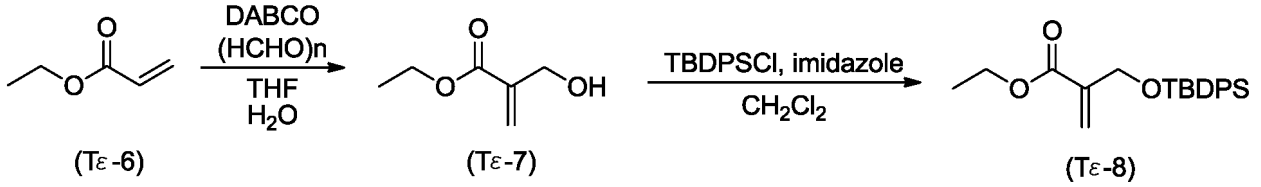
【０５５３】

化合物（１ε－６－１）の物性は、次のとおりであった。

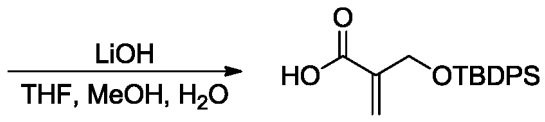
転移温度：Ｃ　６５．０　Ｉ．

【０５５４】

合成例２ε：化合物（１ε－２－１）の合成

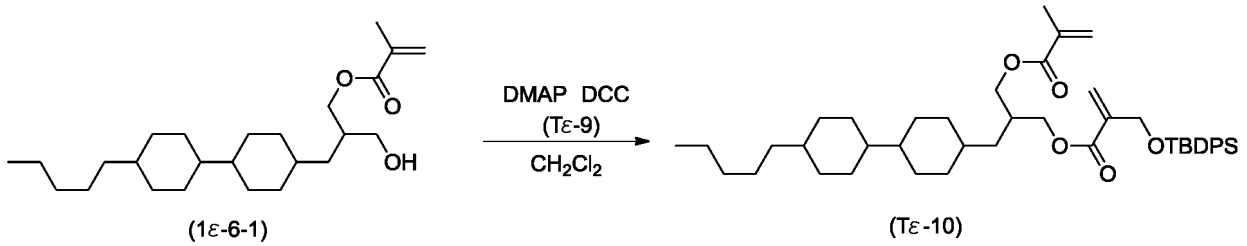


(Tε-6)　(Tε-7)　(Tε-8)

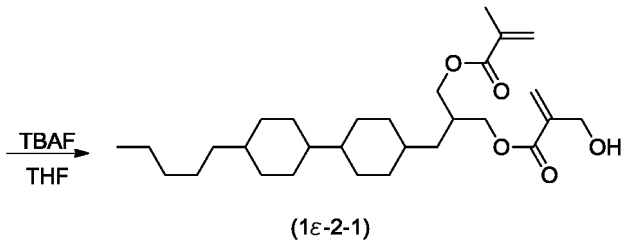


(Tε-9)

【０５５５】



(1ε-6-1)　(Tε-10)



(1ε-2-1)

【０５５６】

第１工程

パラホルムアルデヒド（３０．０ｇ）、ＤＡＢＣＯ（５６．０ｇ）、および水（６００ｍｌ）を反応器に入れ、室温で１５分間撹拌した。そこへ化合物（Ｔε－６）（５０．０ｇ）のＴＨＦ（１２００ｍｌ）溶液を滴下し、室温で７２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄して、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝４：１）で精製して、化合物（Ｔε－７）（４３．２ｇ；６５％）を得た。

【０５５７】

第２工程

化合物（Ｔε－７）（４２．２ｇ）を原料として用い、イミダゾール（２６．３ｇ）、およびジクロロメタン（８００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへｔ－ブチルジフェニルクロロシラン（１０６．４ｇ）のジクロロメタン（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝１０：１）で精製して、化合物（Ｔε－８）（１０７．０ｇ；９０％）を得た。

【０５５８】

第３工程

化合物（Ｔε－８）（１０７．０ｇ）、ＴＨＦ（８００ｍｌ）、メタノール（２００ｍｌ）、および水（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ水酸化リチウム一水和物（２４．３ｇ）を加え、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、６Ｎ塩酸（１００ｍｌ）をゆっくりと加え酸性にした後、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮して、ヘプタンからの再結晶により精製して化合物（Ｔε－９）（４７．４ｇ；４８％）を得た。

【０５５９】

第４工程

化合物（１ε－６－１）（７．７ｇ）、化合物（Ｔε－９）（８．０ｇ）、ＤＭＡＰ（１．０ｇ）、およびジクロロメタン（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（４．８ｇ）のジクロロメタン（６０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝１９：１）で精製して、化合物（Ｔε－１０）（９．８ｇ；７０％）を得た。

【０５６０】

第５工程

化合物（Ｔε－１０）（９．８ｇ）およびＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れて、０℃に冷却した。そこへＴＢＡＦ（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；１６．５ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（１ε－２－１）（３．１ｇ；４７％）を得た。

【０５６１】

得られた化合物（１ε－２－１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、６．１０（ｓ，１Ｈ）、５．８５（ｓ，１Ｈ）、５．５７（ｓ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝４

．５Ｈｚ，２Ｈ）、４．２７－４．１６（ｍ，２Ｈ）、４．１３－４．０８（ｍ，２Ｈ）、２．３１（ｓ，１Ｈ）、２．２６－２．２２（ｍ，１Ｈ）、１．９４（ｓ，３Ｈ）、１，８１－１．６１（ｍ，８Ｈ）、１．３２－１．０８（ｍ，１２Ｈ）、１．００－０．７９（ｍ，１３Ｈ）．

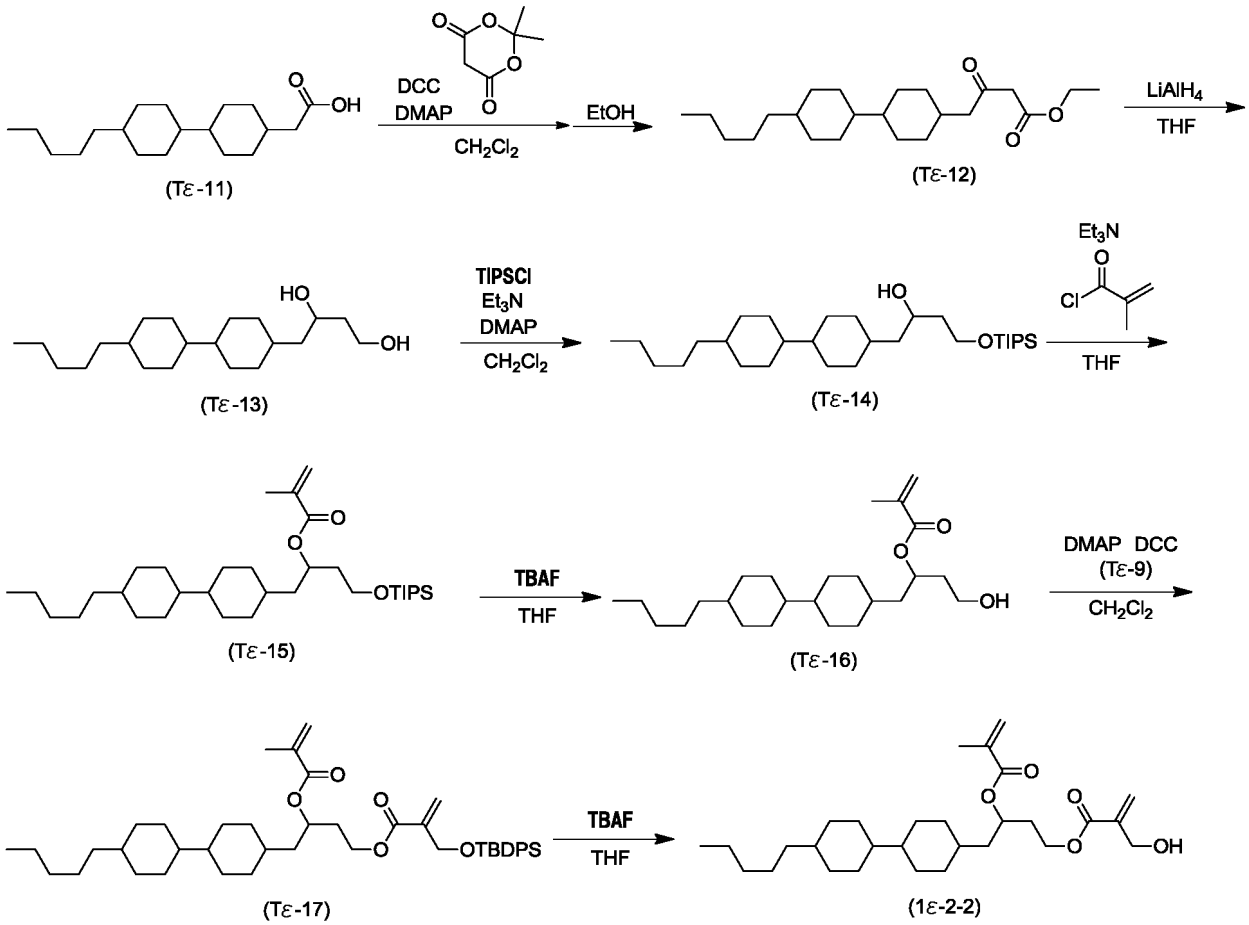
【０５６２】

化合物（（１ε－２－１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　４９．６　Ｉ．

【０５６３】

合成例３ε：化合物（１ε－２－２）の合成



【０５６４】

第１工程

化合物（Ｔε－１１）（１５．０ｇ）、ＤＭＡＰ（９．３３ｇ）、メルドラム酸（９．５４ｇ）およびジクロロメタン（２５０ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（１５．７ｇ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮した。残渣、エタノール（２５０ｍｌ）を反応器に入れ、７０℃で撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を食塩水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：トルエン＝１：１）で精製して、化合物（Ｔε－１２）（１０．２ｇ；５５％）を得た。

【０５６５】

第２工程

水素化アルミニウムリチウム（０．６ｇ）およびＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れて氷冷した。化合物（Ｔε－１２）（１０．２ｇ）のＴＨＦ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ

込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製して、化合物（Ｔε－１３）（７．３５ｇ；８１％）を得た。

【０５６６】

第３工程

化合物（Ｔε－１３）（７．３５ｇ）、トリエチルアミン（３．７５ｍｌ）、ＤＭＡＰ（Ｎ,Ｎ－ジメチル－４－アミノピリジン）（０．２７ｇ）、ジクロロメタン（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。ＴＩＰＳＣｌ（トリイソプロピルシリルクロリド）（５．０５ｍｌ）をゆっくり滴下し、室温に戻しつつ２４時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１９：１）で精製して、化合物（Ｔε－１４）（６．５０ｇ；６０％）を得た。

【０５６７】

第４工程

化合物（Ｔε－１４）（６．５０ｇ）、トリエチルアミン（３．７７ｍｌ）、ＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへメタクリロイルクロリド（２．００ｍｌ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ４時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝１：１）で精製して、化合物（Ｔε－１５）（４．７０ｇ；６３％）を得た。

【０５６８】

第５工程

化合物（Ｔε－１５）（４．７０ｇ）、ＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＴＢＡＦ（１．００Ｍ；ＴＨＦ溶液；１０．３ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ１時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製し、化合物（Ｔε－１６）（１．５０ｇ；４５％）を得た。

【０５６９】

第６工程

化合物（Ｔε－１６）（１．５０ｇ）を原料として用い、合成例２εの第４工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－１７）（１．５１ｇ；５５％）を得た。

【０５７０】

第７工程

化合物（Ｔε－１７）（１．５１ｇ）を原料として用い、合成例２εの第５工程と同様の手法により、化合物（１ε－２－２）（０．４５ｇ；４５％）を得た。

【０５７１】

得られた化合物（１ε－２－２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

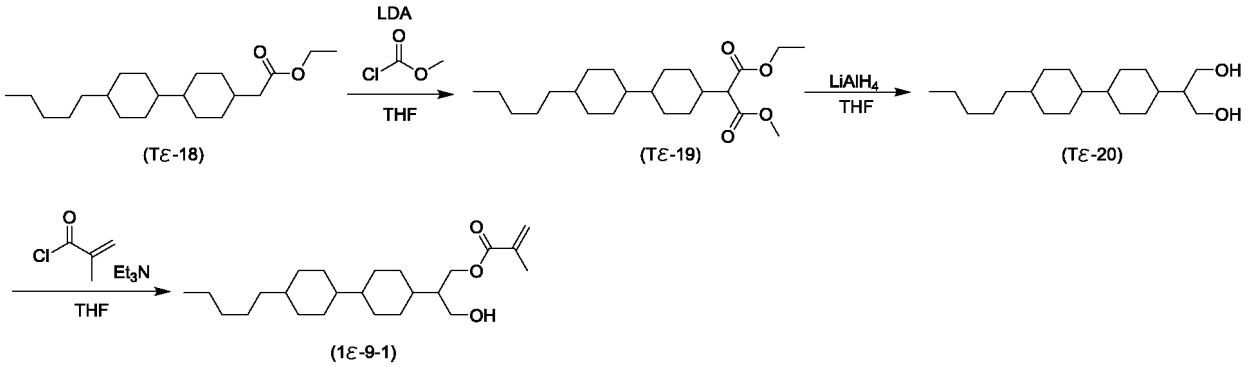
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、６．０９（ｓ，１Ｈ）、５．８２（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、５．５５（ｓ，１Ｈ）、５．２２－５．１７（ｍ，１Ｈ）、４．３２－４．２６（ｍ，３Ｈ）、４．１７－４，１２（ｍ，３Ｈ）、２．５０（ｓ，１Ｈ）、２．０３－１．８９（ｍ，５Ｈ）、１．８３－１．５８（ｍ，９Ｈ）、１．４１－１．０８（ｍ，１１Ｈ）、０．９６－０．７８（ｍ，１３Ｈ）．

【０５７２】

化合物（１ε－２－２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６１．２　Ｉ．

【０５７３】
合成例４ε：化合物（１ε－９－１）の合成

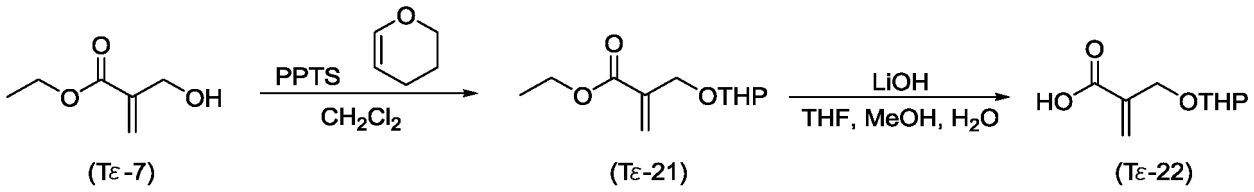


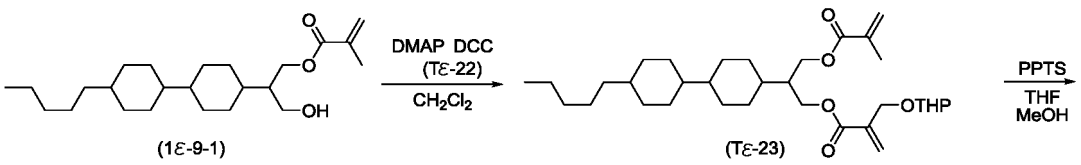
【０５７４】
第１工程
化合物（Ｔε－１８）（２０．０ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、－７０℃に冷却し、リチウムジイソプロピルアミド（ＬＤＡ）（１．１０Ｍ；ＴＨＦ溶液；６８．０ｍｌ）をゆっくりと滴下し、１時間撹拌した。そこへクロロギ酸メチル（７．００ｇ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ４時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝９：１）で精製して、化合物（Ｔε－１９）（１９．４ｇ；８２％）を得た。
【０５７５】
第２工程
水素化リチウムアルミニウム（１．９３ｇ）およびＴＨＦ（２００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ、化合物（Ｔε－１９）（１９．４ｇ）のＴＨＦ（１００ｍｌ）溶液をゆっくりと加え、室温に戻しつつ３時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製して、化合物（Ｔε－２０）（６．０ｇ；３８％）を得た。
【０５７６】
第３工程
化合物（Ｔε－２０）（６．０ｇ）、トリエチルアミン（３．２ｍｌ）およびＴＨＦ（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへメタクリロイルクロリド（１．８ｍｌ）をゆっくりと加え、室温に戻しつつ５時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（１ε－９－１）（２．５ｇ；３４％）を得た。
【０５７７】
得られた化合物（１ε－９－１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．１０（ｓ，１Ｈ）、５．５７（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、４．３８（ｄｄ，Ｊ＝１１．４Ｈｚ，Ｊ＝４．３Ｈｚ，１Ｈ）、４．２３（ｄｄ，Ｊ＝１１．３Ｈｚ，Ｊ＝６．７Ｈｚ，１Ｈ）、３．７１－３．６８（ｍ，１Ｈ）、３．６３－３．６０（ｍ，１Ｈ）、１．９７（ｓ，１Ｈ）、１．９４（ｓ，３Ｈ）、１．８２－１．６２（ｍ，９Ｈ）、１．４１－１．１８（ｍ，７Ｈ）、１．１４－０．７９（ｍ，１６Ｈ）．
【０５７８】
化合物（１ε－９－１）の物性は、次のとおりであった。

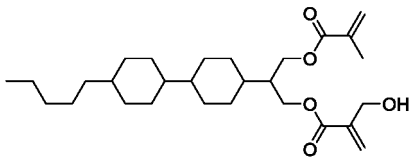
転移温度：Ｃ　６８．４　S_A　８９．３　Ｉ．

【０５７９】

合成例５ε：化合物（１ε－９－２）の合成







【０５８０】

第１工程

化合物（Ｔε－７）、３，４－ジヒドロ－２Ｈ－ピラン（２３．３ｇ）、ピリジニウムｐ－トルエンスルホナート（ＰＰＴＳ）（５．８０ｇ）を反応器に入れ５０℃で１０時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、ヘプタン：酢酸エチル＝２：１）で精製して、化合物（Ｔε－２１）（３９．５ｇ；８０％）を得た。

【０５８１】

第２工程

化合物（Ｔε－２１）（３９．５ｇ）、ＴＨＦ（４００ｍｌ）、および水（４００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへ水酸化リチウム一水和物（１５．４ｇ）を加え、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ込み、６Ｎ塩酸（６０ｍｌ）をゆっくりと加え酸性にした後、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮して化合物（Ｔε－２２）（３２．６ｇ；９５％）を得た。

【０５８２】

第３工程

化合物（１ε－９－１）（２．０ｇ）、化合物（Ｔε－２２）（１．１８ｇ）、ＤＭＡＰ（０．３２ｇ）、およびジクロロメタン（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（１．３０ｇ）のジクロロメタン（６０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１９：１）で精製して、化合物（Ｔε－２３）（２．３７ｇ；８２％）を得た。

【０５８３】

第４工程

化合物（Ｔε－２３）（２．３７ｇ）、ピリジニウムｐ－トルエンスルホナート（ＰＰＴＳ）（０．５４ｇ）、ＴＨＦ（５０ｍｌ）およびメタノール（５０ｍｌ）を反応器に入れ、５０℃で５時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を

酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（１ε－９－２）（１．５０ｇ；７５％）を得た。

【０５８４】

得られた化合物（１ε－９－２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２４（ｓ，１Ｈ）、６．０９（ｓ，１Ｈ）、５．８４（ｓ，１Ｈ）、５．５７（ｓ，１Ｈ）、４．３３－４．２７（ｍ，４Ｈ）、４．２０－４．１６（ｍ，２Ｈ）、２．３４－２．３１（ｍ，１Ｈ）、１．９７－１．９０（ｍ，４Ｈ）、１．８２－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．４３－１．３９（ｍ，１Ｈ）、１．３１－１．１８（ｍ，６Ｈ）、１．１５－０．７５（ｍ，１６Ｈ）．

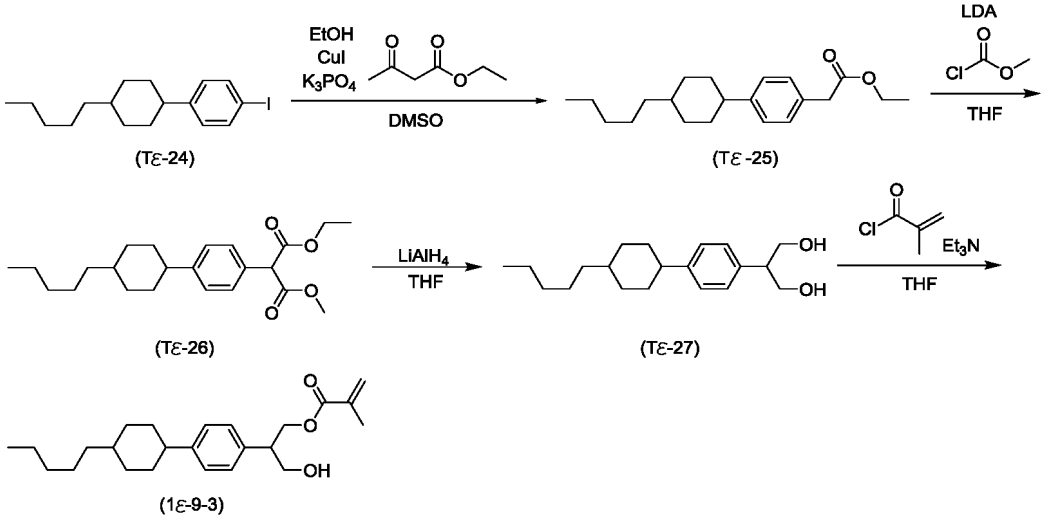
【０５８５】

化合物（１ε－９－２）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　６６．５　Ｉ．

【０５８６】

合成例６ε：化合物（１ε－９－３）の合成



【０５８７】

第１工程

化合物（Ｔε－２４）（３０．０ｇ）、エタノール（１４．４ｍｌ）、りん酸カリウム（５３．６ｇ）、ヨウ化銅（１．６０ｇ）、アセト酢酸エチル（３２．８ｇ）およびジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）（５００ｍｌ）を反応器に入れ、８０℃で６時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエン抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔε－２５）（１９．５ｇ；７３％）を得た。

【０５８８】

第２工程

化合物（Ｔε－２５）（１９．５ｇ）を原料として用い、合成例４εの第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－２６）（１６．２ｇ；７０％）を得た。

【０５８９】

第３工程

化合物（Ｔε－２６）（１６．２ｇ）を原料として用い、合成例４εの第２工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－２７）（６．０ｇ；４５％）を得た。

【０５９０】

第４工程

化合物（Ｔε－２７）（６．０ｇ）を原料として用い、合成例４εの第３工程と同様の

手法により、化合物（１ε－９－３）（２．３ｇ；３１％）を得た。

【０５９１】

得られた化合物（１ε－９－３）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１８－７．１７（ｍ，４Ｈ）、６．０９（ｓ，１Ｈ）、５．５７（ｓ，１Ｈ）、４．４７－４．３８（ｍ，２Ｈ）、３．９１－３．８５（ｍ，２Ｈ）、３．１９－３．１４（ｍ，１Ｈ）、２．４４（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝３．０Ｈｚ，１Ｈ）、１．９３－１．８６（ｍ，８Ｈ）、１．４８－１．３８（ｍ，２Ｈ）、１．３４－１．１９（ｍ，９Ｈ）、１．０７－０．９９（ｍ，２Ｈ）、０．８９（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

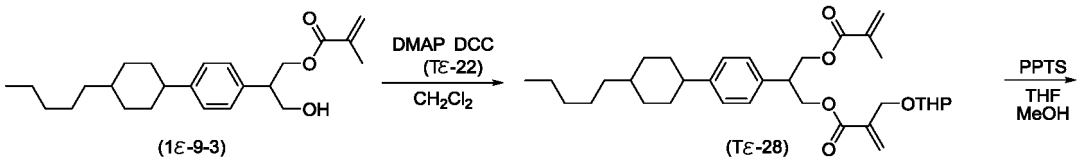
【０５９２】

化合物（１ε－９－３）の物性は、次のとおりであった。

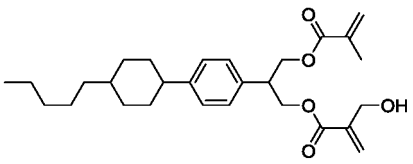
転移温度：Ｃ　３６．１　Ｉ．

【０５９３】

合成例７ε：化合物（１ε－９－４）の合成



(1ε-9-3)　(Tε-28)



(1ε-9-4)

【０５９４】

第１工程

化合物（１ε－９－３）（２．０ｇ）を原料として用い、合成例５εの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－２８）（２．２ｇ；７６％）を得た。

【０５９５】

第２工程

化合物（Ｔε－２８）（２．２ｇ）を原料として用い、合成例５εの第４工程と同様の手法により、化合物（１ε－９－４）（１．３ｇ；７０％）を得た。

【０５９６】

得られた化合物（１ε－９－４）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１７－７．１６（ｍ，４Ｈ）、６．２１（ｓ，１Ｈ）、６．０７（ｓ，１Ｈ）、５．８１（ｄ，Ｊ＝１．０Ｈｚ，１Ｈ）、５．５５（ｓ，１Ｈ）、４．４６－４．３９（ｍ，４Ｈ）、４．２７（ｄ，Ｊ＝６．２Ｈｚ，２Ｈ）、３．４２－３．３７（ｍ，１Ｈ）、２．４４（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝３．１Ｈｚ，１Ｈ）、２．２２－２．２１（ｍ，１Ｈ）、１．９５（ｓ，３Ｈ）、１．８７－１．８５（ｍ，４Ｈ）、１．４６－１．３８（ｍ，２Ｈ）、１．３４－１．１９（ｍ，９Ｈ）、１．０７－０．９９（ｍ，２Ｈ）、０．８９（ｔ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，３Ｈ）．

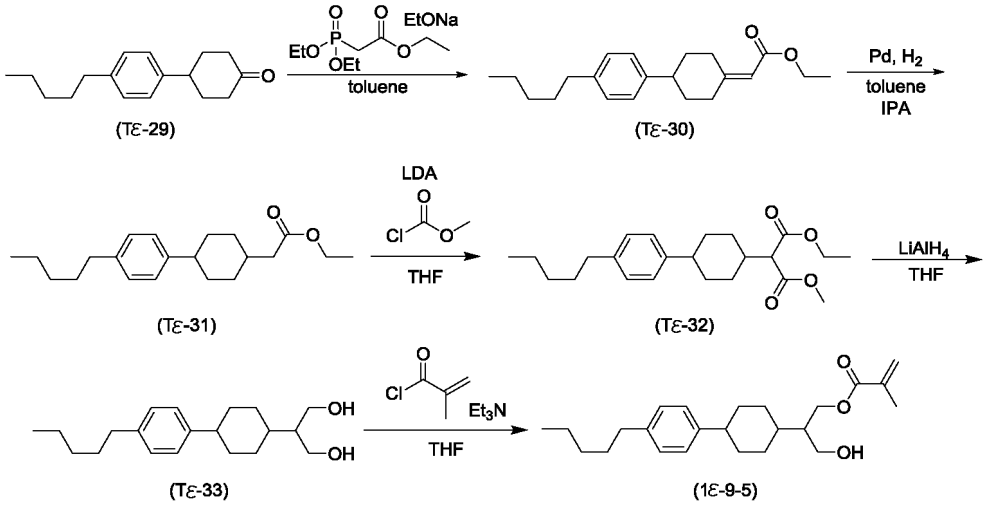
【０５９７】

化合物（１ε－９－４）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　５２．３　Ｉ．

【０５９８】

合成例８ε：化合物（１ε－９－５）の合成



(Tε-29) (Tε-30) (Tε-31) (Tε-32) (Tε-33) (1ε-9-5)

【０５９９】

第１工程

化合物（Ｔε－２９）（３０．０ｇ）、ホスホノ酢酸トリエチル（３３．０ｇ）およびトルエン（５００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃まで冷却した。そこへ、ナトリウムエトキシド（２０％エタノール溶液）（５０．１ｇ）をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ６時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製して、化合物（Ｔε－３０）（３２．８ｇ；８５％）を得た。

【０６００】

第２工程

化合物（Ｔε－３０）（３２．８ｇ）、トルエン（３００ｍｌ）、ＩＰＡ（３００ｍｌ）およびＰｄ／Ｃ（０．５５ｇ）を反応器に入れ、水素雰囲気下で１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエン抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝４：１）で精製した。さらにヘプタンからの再結晶により精製して、化合物（Ｔε－３１）（１６．８ｇ；５１％）を得た。

【０６０１】

第３工程

化合物（Ｔε－３１）（１６．８ｇ）を原料として用い、合成例４εの第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－３２）（１４．１ｇ；７１％）を得た。

【０６０２】

第４工程

化合物（Ｔε－３２）（１４．１ｇ）を原料として用い、合成例４εの第２工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－３３）（６．０ｇ；５２％）を得た。

【０６０３】

第５工程

化合物（Ｔε－３３）（６．０ｇ）を原料として用い、合成例４εの第３工程と同様の手法により、化合物（１ε－９－５）（２．３ｇ；３２％）を得た。

【０６０４】

得られた化合物（１ε－９－５）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１４－７．１０（ｍ，４Ｈ）、６．１２（ｓ，１Ｈ）、５．５９（ｓ，１Ｈ）、４．４３－４．４０（ｍ，１Ｈ）、４．２８－４．２５（ｍ，１Ｈ）、３．７５－３．６４（ｍ，２Ｈ）、２．５５（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．４７－２．４２（ｍ，１Ｈ）、２．１４（ｓ，１Ｈ）、１．

９６－１．９１（ｍ，７Ｈ）、１．７４－１．６９（ｍ，１Ｈ）、１．６２－１．２２（ｍ，１１Ｈ）、０．８８（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

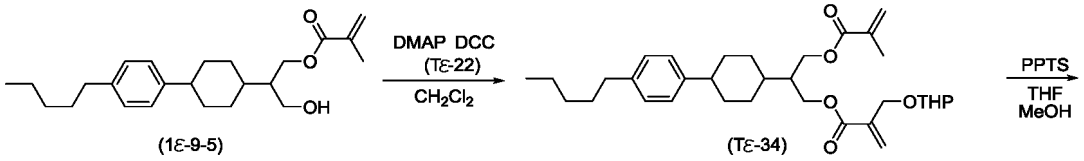
【０６０５】

化合物（１ε－９－５）の物性は、次のとおりであった。

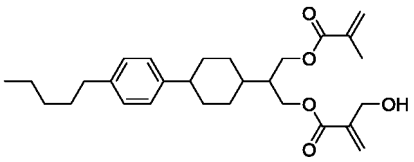
転移温度：Ｃ＜－５０．０　Ｉ．

【０６０６】

合成例９ε：化合物（１ε－９－６）の合成



(1ε-9-5)　(Tε-34)



(1ε-9-6)

【０６０７】

第１工程

化合物（１ε－９－５）（２．０ｇ）を原料として用い、合成例５εの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－３４）（１．９ｇ；６８％）を得た。

【０６０８】

第２工程

化合物（Ｔε－３４）（１．９ｇ）を原料として用い、合成例５εの第４工程と同様の手法により、化合物（１ε－９－６）（１．２ｇ；７５％）を得た。

【０６０９】

得られた化合物（１ε－９－６）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１３－７．１０（ｍ，４Ｈ）、６．２７（ｓ，１Ｈ）、６．１１（ｓ，１Ｈ）、５．８６（ｓ，１Ｈ）、５．５８（ｓ，１Ｈ）、４．４０－４．３２（ｍ，４Ｈ）、４．２５－４．２０（ｍ，２Ｈ）、２．５６（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，２Ｈ）、２．４５（ｔｔ，Ｊ＝１２．１Ｈｚ，Ｊ＝２．９Ｈｚ，１Ｈ）、２．３５－２．３２（ｍ，１Ｈ）、２．０４－１．９１（ｍ，７Ｈ）、１．６２－１．２６（ｍ，１２Ｈ）、０．８８（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

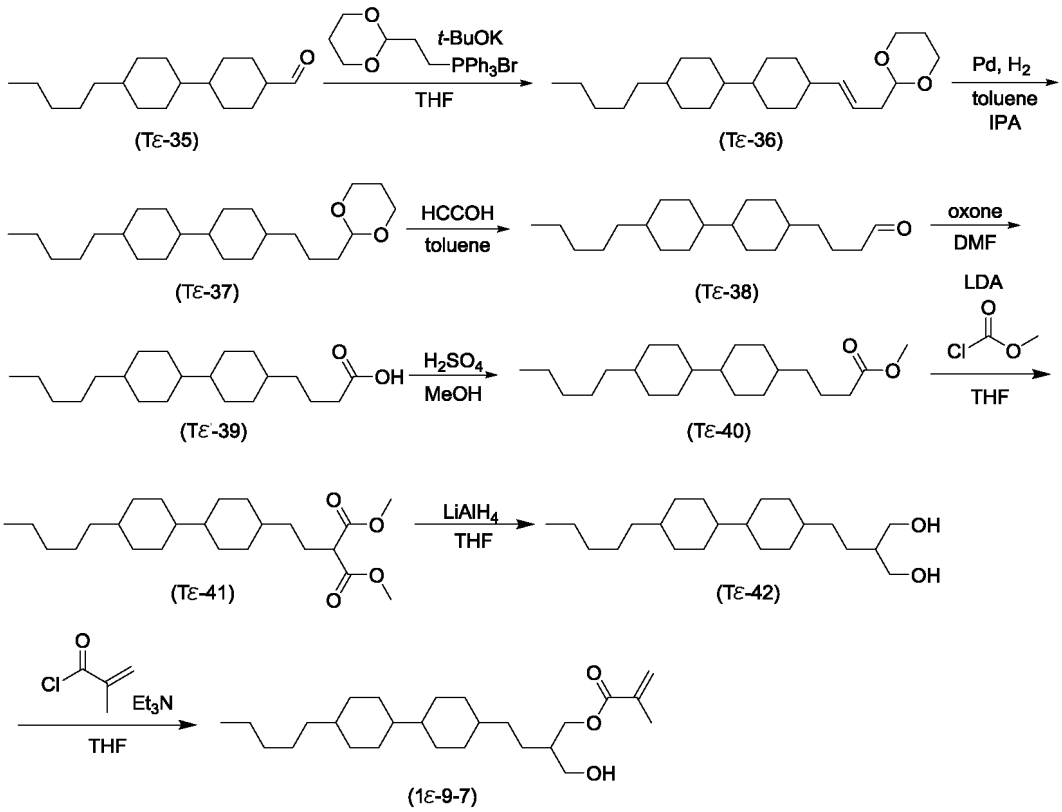
【０６１０】

化合物（１ε－９－６）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　３５．８　Ｉ．

【０６１１】

合成例１０ε：化合物（１ε－９－７）の合成



【０６１２】

第１工程

２－（１，３－ジオキサン－２－イル）エチルトリフェニルホスホニウムブロミド（１０３．７ｇ）およびＴＨＦ（５００ｍｌ）を反応器に入れ、－３０℃まで冷却し、カリウムｔ－ブトキシド（２５．４ｇ）を加え、１時間撹拌した。そこへ化合物（Ｔε－３５）（５０．０ｇ）のＴＨＦ（３００ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝１：１）で精製して、化合物（Ｔε－３６）（６３．０ｇ；９２％）を得た。

【０６１３】

第２工程

化合物（Ｔε－３６）（６３．０ｇ）、トルエン（５００ｍｌ）、ＩＰＡ（５００ｍｌ）およびＰｄ／Ｃ（０．５５ｇ）を反応器に入れ、水素雰囲気下で１６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をトルエン抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：ヘプタン＝１：１）で精製し、化合物（Ｔε－３７）（６０．１ｇ；９５％）を得た。

【０６１４】

第３工程

化合物（Ｔε－３７）（６０．１ｇ）、ギ酸（７５．８ｇ）、およびトルエン（１０００ｍｌ）を反応器に入れて、１００℃にて６時間撹拌した。不溶物を炉別した後、炭酸水素ナトリウム水溶液で中和し、水層をトルエンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔε－３８）（４５．０ｇ；８９％）を得た。

【０６１５】

第４工程

化合物（Ｔε－３８）（４５．０ｇ）、ペルオキシ一硫酸カリウム（ＯＸＯＮＥ）（１０８．３ｇ）およびＤＭＦ（１０００ｍｌ）を反応器に入れて、室温にて８時間撹拌した。
不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチル抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、化合物（Ｔε－３９）（２８．５ｇ；６０％）を得た。

【０６１６】

第５工程

化合物（Ｔε－３９）（２８．５ｇ）、硫酸（０．５ｍｌ）およびメタノール（５００ｍｌ）を反応器に入れて、６０℃にて５時間撹拌した。不溶物を炉別した後、濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにてトルエンで精製して、化合物（Ｔε－４０）（２２．３ｇ；７５％）を得た。

【０６１７】

第６工程

化合物（Ｔε－４０）（２２．３ｇ）を原料として用い、合成例４εの第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－４１）（１８．３ｇ；７０％）を得た。

【０６１８】

第７工程

化合物（Ｔε－４１）（１８．３ｇ）を原料として用い、合成例４εの第２工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－４２）（５．９ｇ；３８％）を得た。

【０６１９】

第８工程

化合物（Ｔε－４２）（５．９ｇ）を原料として用い、合成例４εの第３工程と同様の手法により、化合物（１ε－９－７）（２．４ｇ；３４％）を得た。

【０６２０】

得られた化合物（１ε－９－７）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．１１（ｓ，１Ｈ）、５．８１（ｓ，１Ｈ）、４．３１－４．２８（ｍ，１Ｈ）、４．１７－４．１４（ｍ，１Ｈ）、３．６３－３．５８（ｍ，１Ｈ）、３．５４－３．４９（ｍ，１Ｈ）、１．９８－１．９５（ｍ，４Ｈ）、１．８４－１．６９（ｍ，９Ｈ）、１．４１－１．１８（ｍ，１０Ｈ）、１．１５－１．０６（ｍ，４Ｈ）、１．０２－０．８０（ｍ，１３Ｈ）．

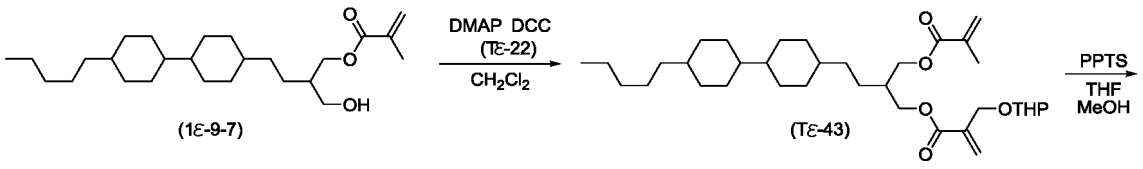
【０６２１】

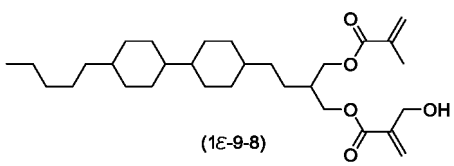
化合物（１ε－９－７）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　３３．６　Ｓ$_{A}$　１０１　Ｉ．

【０６２２】

合成例１１ε：化合物（１ε－９－８）の合成



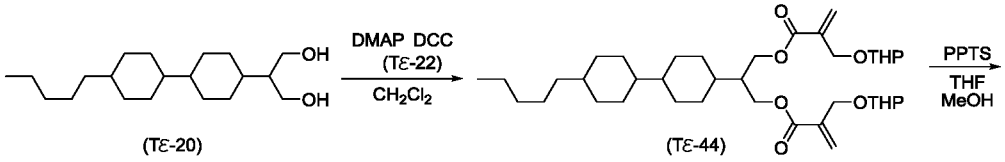


【０６２３】

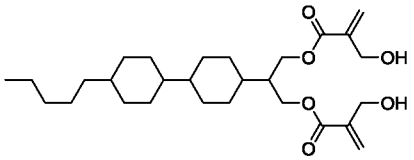
第１工程

化合物（１ε－９－７）（２．０ｇ）を原料として用い、合成例５εの第３工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－４３）（２．１ｇ；７４％）を得た。

【０６２４】
第２工程
化合物（Ｔε－４３）（２．１ｇ）を原料として用い、合成例５εの第４工程と同様の手法により、化合物（１ε－９－８）（１．３ｇ；７２％）を得た。
【０６２５】
得られた化合物（１ε－９－８）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，１Ｈ）、６．１０（ｓ，１Ｈ）、５．８５（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，１Ｈ）、５．５７（ｓ，１Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，２Ｈ）、４．２４－４．１１（ｍ，４Ｈ）、２．２８（ｔ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，１Ｈ）、２．０９－２．０３（ｍ，１Ｈ）、１．９４（ｓ，３Ｈ）、１．７５－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．４４－１．３９（ｍ，２Ｈ）、１．３２－１．１８（ｍ，８Ｈ）、１．１５－１．０６（ｍ，４Ｈ）、１．０２－０．７９（ｍ，１３Ｈ）．
【０６２６】
化合物（１ε－９－８）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　７１．４　Ｉ．
【０６２７】
合成例１２ε：化合物（１ε－１０－１）の合成



(Tε-20)　(Tε-44)



(1ε-10-1)

【０６２８】
第１工程
化合物（Ｔε－２０）（２．０ｇ）、化合物（Ｔε－２２）（２．６３ｇ）、ＤＭＡＰ（０．７８ｇ）、およびジクロロメタン（１００ｍｌ）を反応器に入れ、０℃に冷却した。そこへＤＣＣ（２．９２ｇ）のジクロロメタン（６０ｍｌ）溶液をゆっくりと滴下し、室温に戻しつつ１２時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層をジクロロメタンで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝９：１）で精製して、化合物（Ｔε－４４）（２．８３ｇ；６８％）を得た。
【０６２９】
第２工程
化合物（Ｔε－４４）（２．８３ｇ）、ピリジニウムｐ－トルエンスルホナート（ＰＰＴＳ）（１．０９ｇ）、ＴＨＦ（５０ｍｌ）およびメタノール（５０ｍｌ）を反応器に入れ、５０℃で８時間攪拌した。不溶物を炉別した後、反応混合物を水に注ぎ込み、水層を酢酸エチルで抽出した。一緒にした有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。この溶液を減圧下で濃縮し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（容積比、トルエン：酢酸エチル＝１：１）で精製して、化合物（１ε－１０－１）（１．４７ｇ；７０％）を得た。
【０６３０】
得られた化合物（１ε－１０－１）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２４（ｓ，２Ｈ）、５．８

２（ｓ，２Ｈ）、４．３５－４．３１（ｍ，６Ｈ）、４．２２－４．１９（ｍ，２Ｈ）、２．３６（ｓ，２Ｈ）、１．９７－１．９１（ｓ，１Ｈ）、１．８２－１．６３（ｍ，８Ｈ）、１．４３－１．１８（ｍ，７Ｈ）、１．１５－０．７９（ｍ，１６Ｈ）．

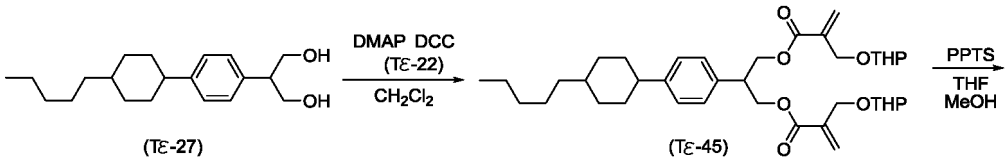
【０６３１】

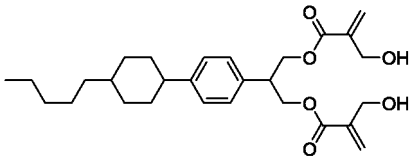
化合物（１ε－１０－１）の物性は、次のとおりであった。

転移温度：Ｃ　１０２　Ｉ．

【０６３２】

合成例１３ε：化合物（１ε－１０－２）の合成





【０６３３】

第１工程

化合物（Ｔε－２７）（２．０ｇ）を原料として用い、合成例１２εの第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－４５）（２．７ｇ；６４％）を得た。

【０６３４】

第２工程

化合物化合物（Ｔε－４５）（２．７ｇ）を原料として用い、合成例１２εの第２工程と同様の手法により、化合物（１ε－１０－２）（１．３ｇ；６５％）を得た。

【０６３５】

得られた化合物（１ε－１０－２）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．２０－７．１６（ｍ，４Ｈ）、６．２６（ｓ，２Ｈ）、５．８３（ｄ，Ｊ＝０．８Ｈｚ，２Ｈ）、４．４６（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，４Ｈ）、４．２８（ｄ，Ｊ＝６．３Ｈｚ，４Ｈ）、３．４４－３．３９（ｍ，１Ｈ）、２．４４（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝３．１Ｈｚ，１Ｈ）、２．１６－２．１３（ｍ，２Ｈ）、１．８７－１．８５（ｍ，４Ｈ）、１．４６－１．１９（ｍ，１１Ｈ）、１．０７－０．９９（ｍ，２Ｈ）、０．８９（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

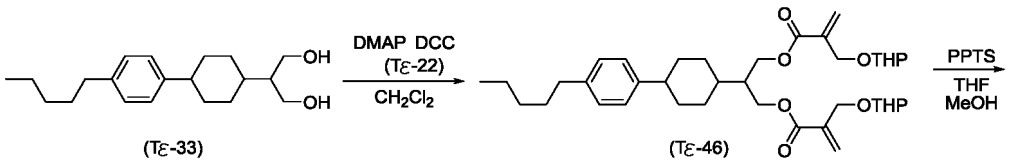
【０６３６】

化合物（１ε－１０－２）の物性は、次のとおりであった。

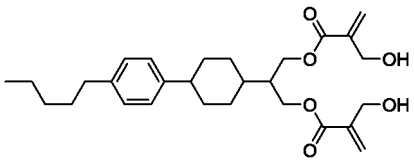
転移温度：Ｃ　６５．８　Ｉ．

【０６３７】

合成例１４ε：化合物（１ε－１０－３）の合成



(Tε-33) (Tε-46)



(1ε-10-3)

【０６３８】

第１工程

化合物（Ｔε－３３）（２．０ｇ）を原料として用い、合成例１２εの第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－４６）（２．５ｇ；５９％）を得た。

【０６３９】

第２工程

化合物化合物（Ｔε－４６）（２．７ｇ）を原料として用い、合成例１２εの第２工程と同様の手法により、化合物（１ε－１０－３）（１．１ｇ；６０％）を得た。

【０６４０】

得られた化合物（１ε－１０－３）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：７．１４－７．１０（ｍ，４Ｈ）、６．２７（ｓ，２Ｈ）、５．８７（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，２Ｈ）、４．３９－４．３３（ｍ，６Ｈ）、４．２７－４．２０（ｍ，２Ｈ）、２．５７－２．５４（ｍ，２Ｈ）、２．４５（ｔｔ，Ｊ＝１２．２Ｈｚ，Ｊ＝３．１Ｈｚ，１Ｈ）、２．３８－２．３５（ｍ，２Ｈ）、２．０５－１．９１（ｍ，５Ｈ）、１．６３－１．１．２６（ｍ，１１Ｈ）、０．８８（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）．

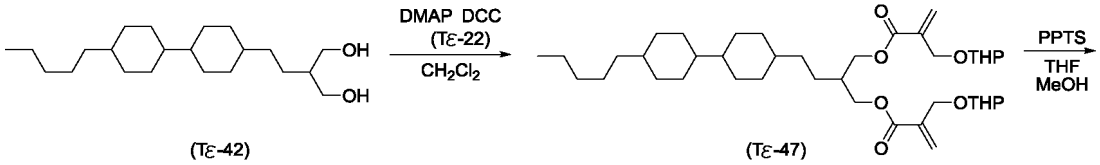
【０６４１】

化合物（１ε－１０－３）の物性は、次のとおりであった。

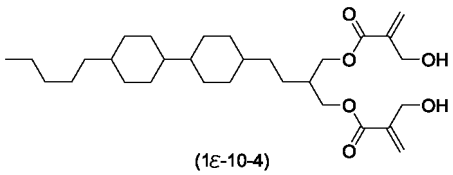
転移温度：Ｃ　６５．６　Ｉ．

【０６４２】

合成例１５ε：化合物（１ε－１０－４）の合成



(Tε-42) (Tε-47)



(1ε-10-4)

【０６４３】

第１工程

化合物（Ｔε－４２）（２．０ｇ）を原料として用い、合成例１２εの第１工程と同様の手法により、化合物（Ｔε－４７）（２．７ｇ；６７％）を得た。

【０６４４】

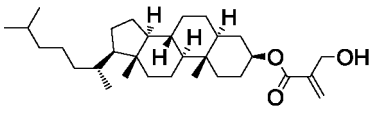
第２工程

化合物化合物（Ｔε－４７）（２．７ｇ）を原料として用い、合成例１２εの第２工程と同様の手法により、化合物（１ε－１０－４）（１．３ｇ；６４％）を得た。

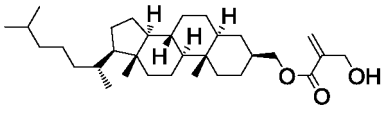
【０６４５】
得られた化合物（１ε－１０－４）のＮＭＲ分析値は以下の通りである。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ：化学シフトδ（ｐｐｍ；ＣＤＣｌ$_{3}$）：６．２５（ｓ，２Ｈ）、５．８５（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，２Ｈ）、４．３３（ｄ，Ｊ＝６．３Ｈｚ，４Ｈ）、４．２５－４．２２（ｍ，２Ｈ）、４．１８－４．１４（ｍ，２Ｈ）、２．３０－２．２８（ｍ，２Ｈ）、２．１１－２．０６（ｍ，１Ｈ）、１．７５－１．６７（ｍ，８Ｈ）、１．４４－１．３９（ｍ，２Ｈ）、１．３２－０．７９（ｍ，２５Ｈ）．
【０６４６】
化合物（１ε－１０－４）の物性は、次のとおりであった。
転移温度：Ｃ　８５．７　Ｓ$_{A}$　１２５　Ｉ．
【０６４７】
［１４．化合物（１α）の例示］
合成例に記載した合成法に準じて、以下の化合物（１α－３－１）から（１α－３－４０）、化合物（１α－４－１）～（１α－４－１２０）、化合物（１α－５－１）～（１α－５－１４０）、化合物（１α－６－１）～（１α－６－２６０）を合成することが可能である。

No.

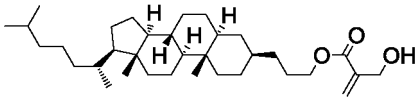
1α-3-1



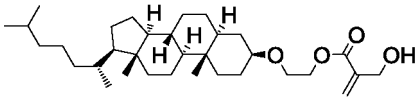
1α-3-2



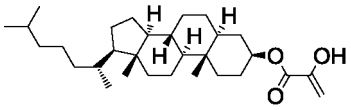
1α-3-3



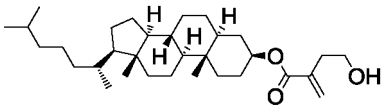
1α-3-4



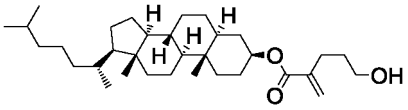
1α-3-5



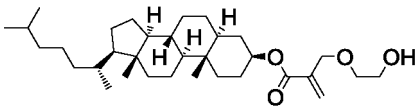
1α-3-6



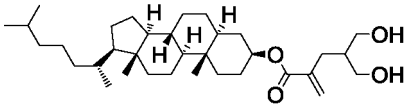
1α-3-7



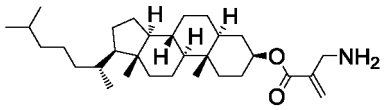
1α-3-8



1α-3-9

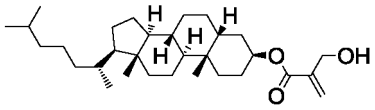


1α-3-10

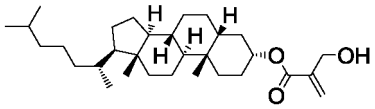


No.

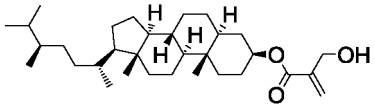
1α-3-11



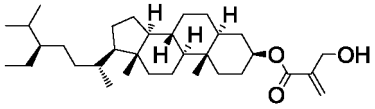
1α-3-12



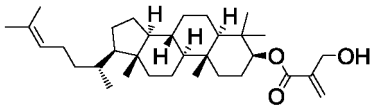
1α-3-13



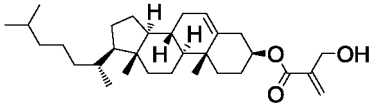
1α-3-14



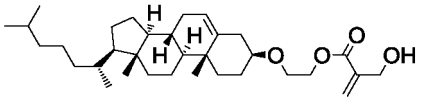
1α-3-15



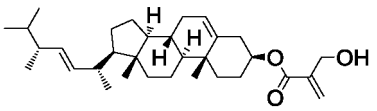
1α-3-16



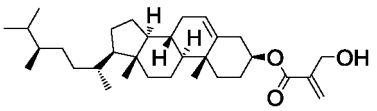
1α-3-17



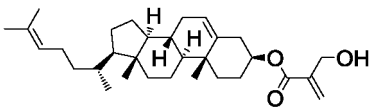
1α-3-18

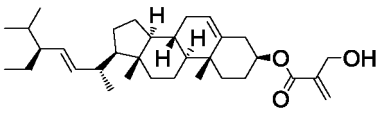
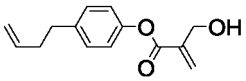
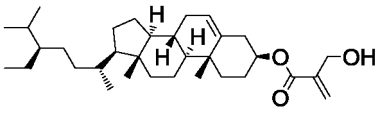
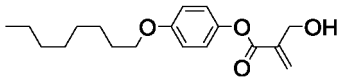
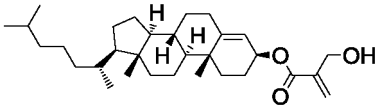
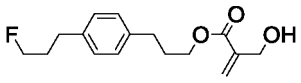
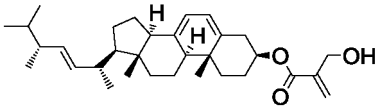
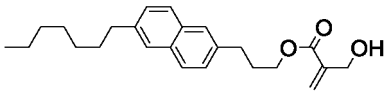
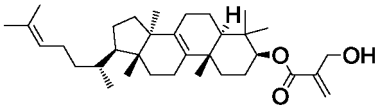
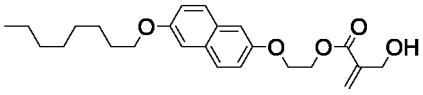
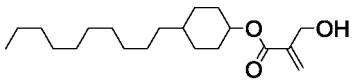
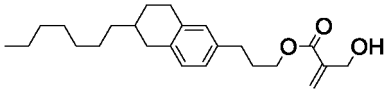
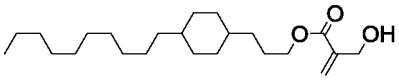
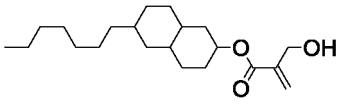
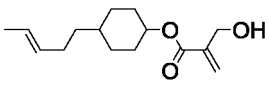
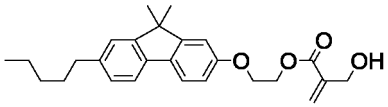
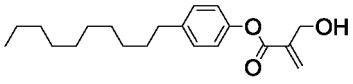
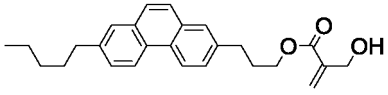
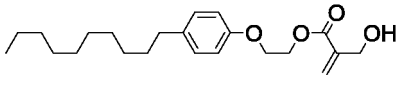
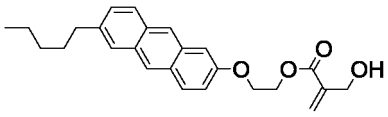


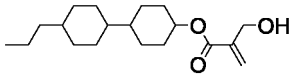
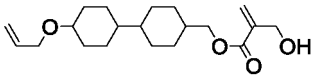
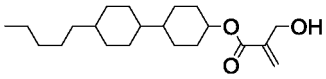
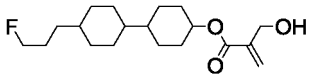
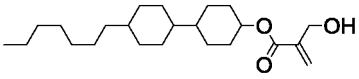
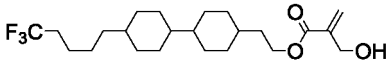
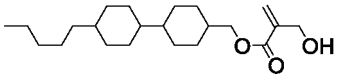
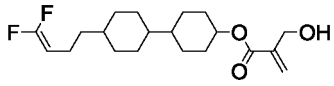
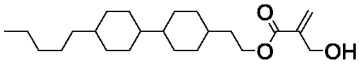
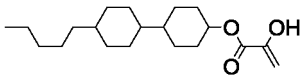
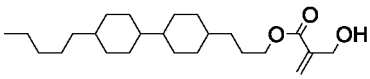
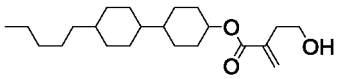
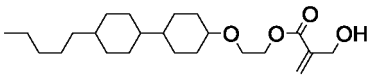
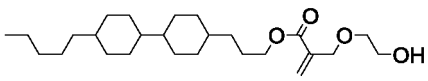
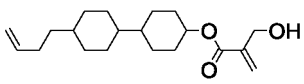
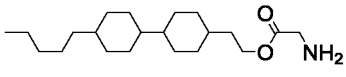
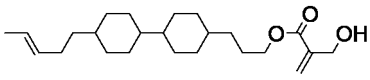
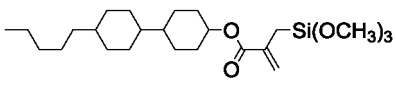
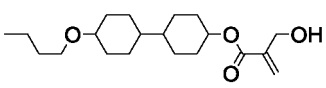
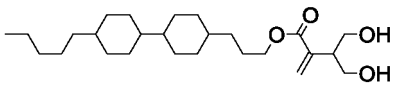
1α-3-19

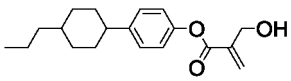
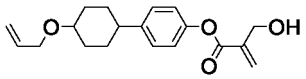
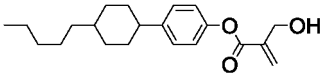
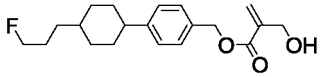
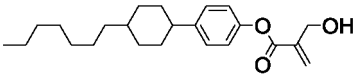
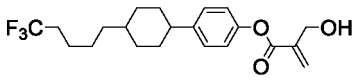
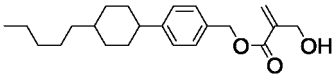
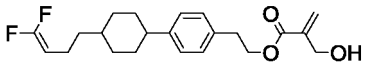
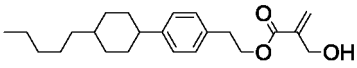
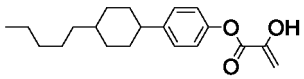
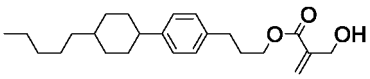
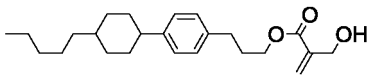
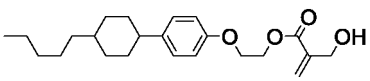
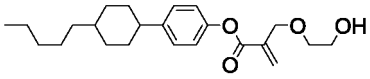
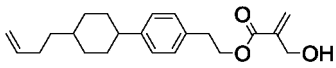
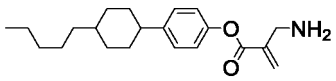
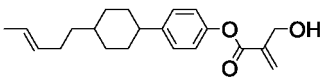
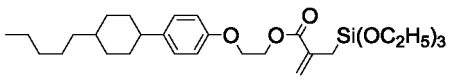
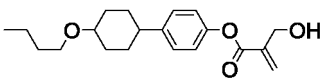
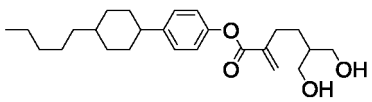


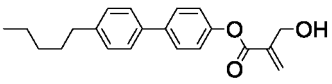
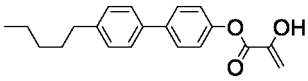
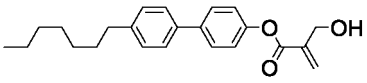
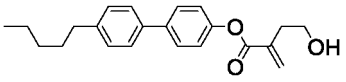
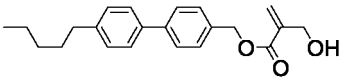
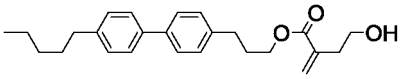
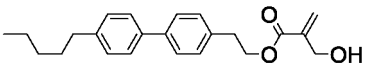
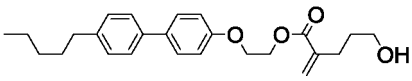
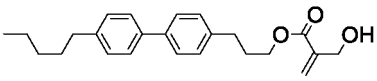
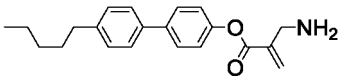
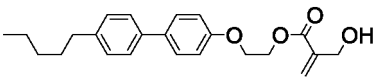
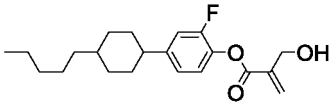
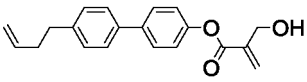
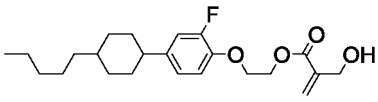
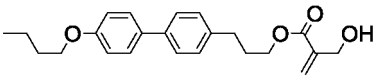
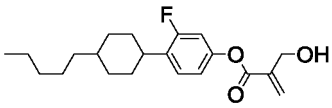
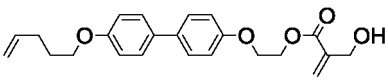
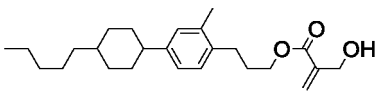
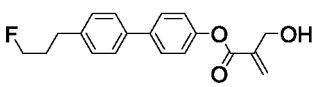
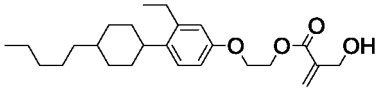
1α-3-20

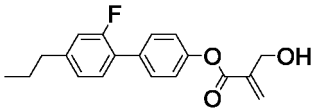
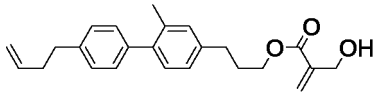
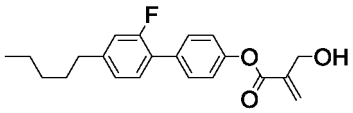
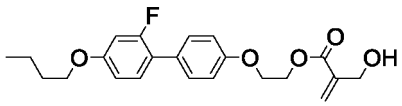
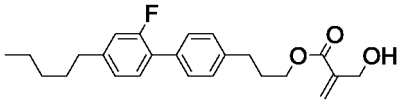
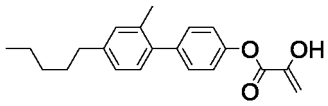
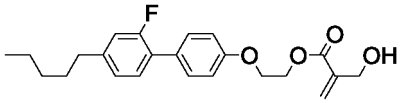
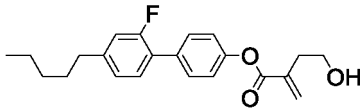
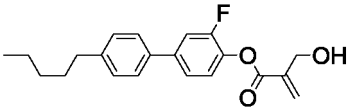
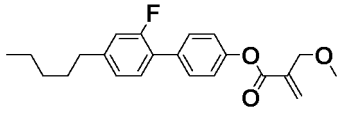
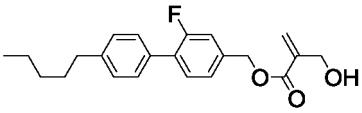
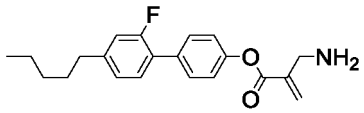
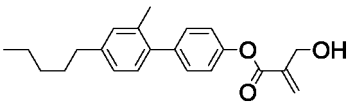
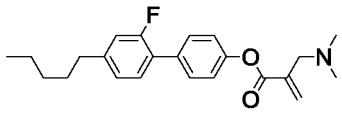
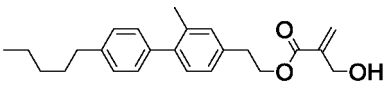
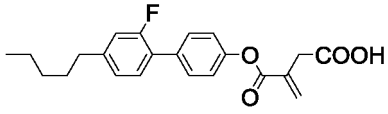
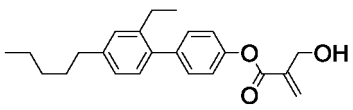
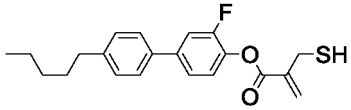
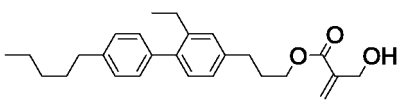
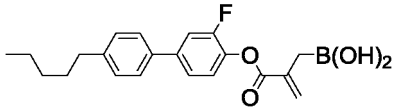


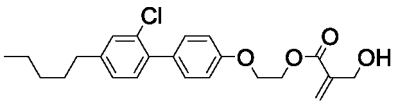
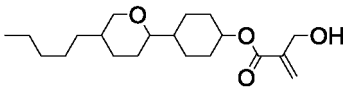
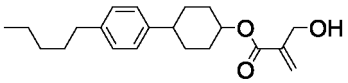
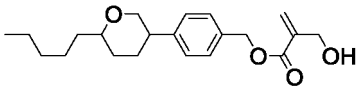
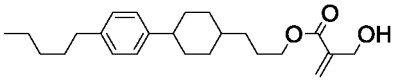
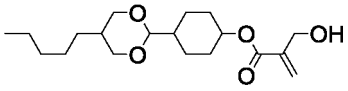
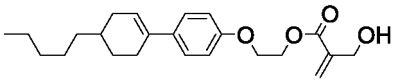
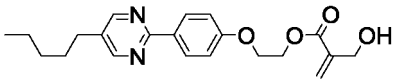
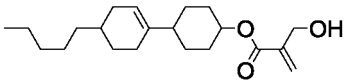
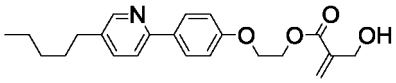
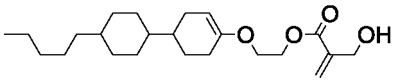
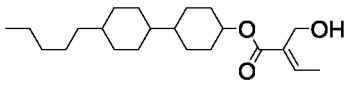
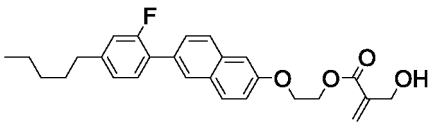
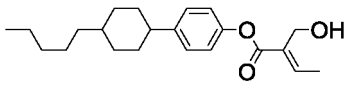
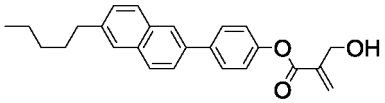
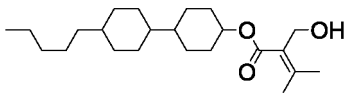
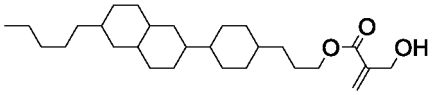
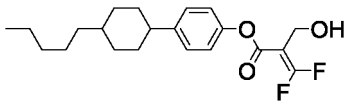
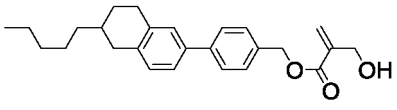
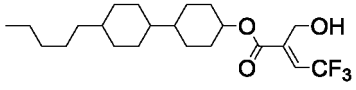
No.		No.	
1α-3-21		1α-3-31	
1α-3-22		1α-3-32	
1α-3-23		1α-3-33	
1α-3-24		1α-3-34	
1α-3-25		1α-3-35	
1α-3-26		1α-3-36	
1α-3-27		1α-3-37	
1α-3-28		1α-3-38	
1α-3-29		1α-3-39	
1α-3-30		1α-3-40	

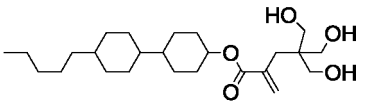
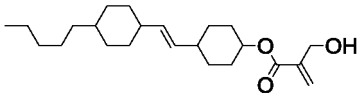
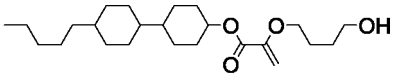
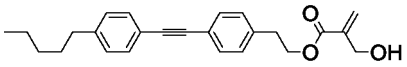
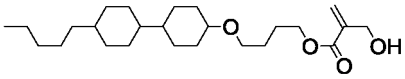
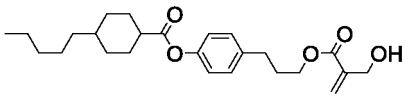
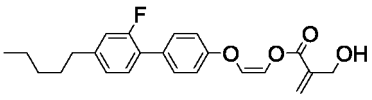
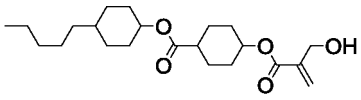
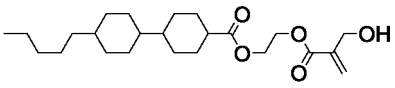
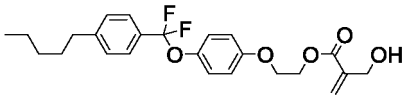
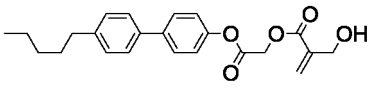
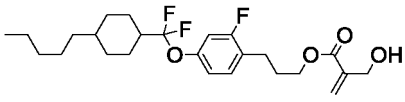
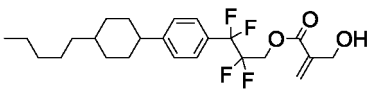
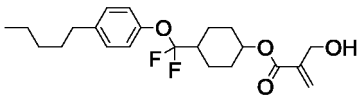
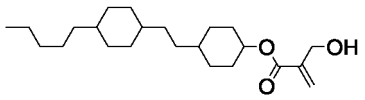
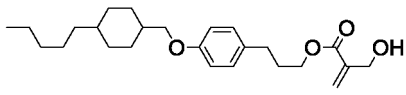
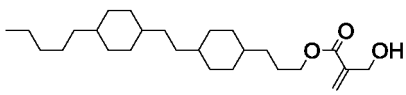
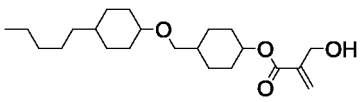
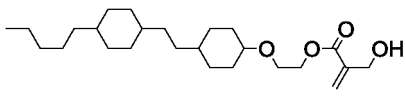
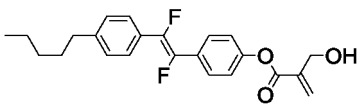
No.		No.	
1α-4-1		1α-4-11	
1α-4-2		1α-4-12	
1α-4-3		1α-4-13	
1α-4-4		1α-4-14	
1α-4-5		1α-4-15	
1α-4-6		1α-4-16	
1α-4-7		1α-4-17	
1α-4-8		1α-4-18	
1α-4-9		1α-4-19	
1α-4-10		1α-4-20	

No.		No.	
1α-4-21		1α-4-31	
1α-4-22		1α-4-32	
1α-4-23		1α-4-33	
1α-4-24		1α-4-34	
1α-4-25		1α-4-35	
1α-4-26		1α-4-36	
1α-4-27		1α-4-37	
1α-4-28		1α-4-38	
1α-4-29		1α-4-39	
1α-4-30		1α-4-40	

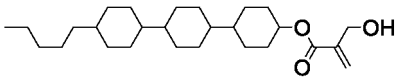
No.		No.	
1α-4-41		1α-4-51	
1α-4-42		1α-4-52	
1α-4-43		1α-4-53	
1α-4-44		1α-4-54	
1α-4-45		1α-4-55	
1α-4-46		1α-4-56	
1α-4-47		1α-4-57	
1α-4-48		1α-4-58	
1α-4-49		1α-4-59	
1α-4-50		1α-4-60	

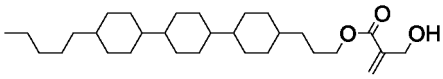
No.		No.	
1α-4-61		1α-4-71	
1α-4-62		1α-4-72	
1α-4-63		1α-4-73	
1α-4-64		1α-4-74	
1α-4-65		1α-4-75	
1α-4-66		1α-4-76	
1α-4-67		1α-4-77	
1α-4-68		1α-4-78	
1α-4-69		1α-4-79	
1α-4-70		1α-4-80	

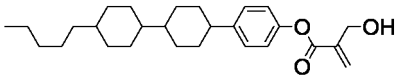
No.		No.	
1α-4-81		1α-4-91	
1α-4-82		1α-4-92	
1α-4-83		1α-4-93	
1α-4-84		1α-4-94	
1α-4-85		1α-4-95	
1α-4-86		1α-4-96	
1α-4-87		1α-4-97	
1α-4-88		1α-4-98	
1α-4-89		1α-4-99	
1α-4-90		1α-4-100	

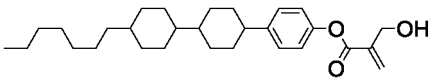
No.		No.	
1α-4-101		1α-4-111	
1α-4-102		1α-4-112	
1α-4-103		1α-4-113	
1α-4-104		1α-4-114	
1α-4-105		1α-4-115	
1α-4-106		1α-4-116	
1α-4-107		1α-4-117	
1α-4-108		1α-4-118	
1α-4-109		1α-4-119	
1α-4-110		1α-4-120	

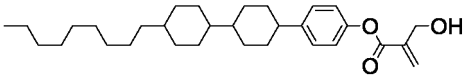
No.

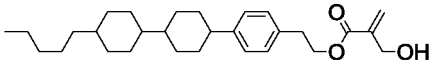
1α-5-1 

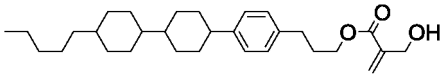
1α-5-2 

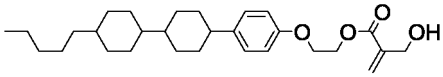
1α-5-3 

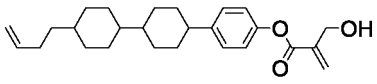
1α-5-4 

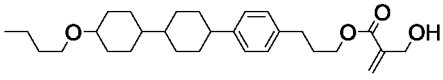
1α-5-5 

1α-5-6 

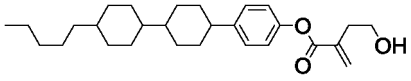
1α-5-7 

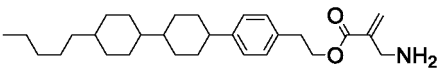
1α-5-8 

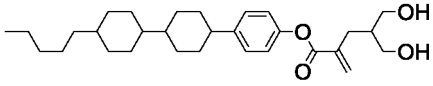
1α-5-9 

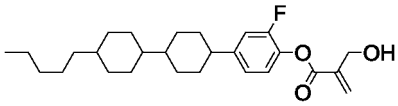
1α-5-10 

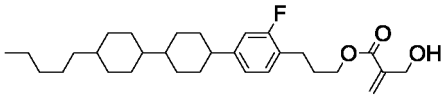
No.

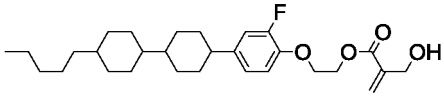
1α-5-11 

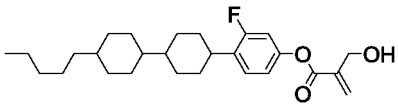
1α-5-12 

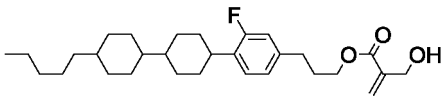
1α-5-13 

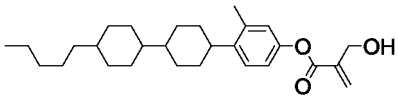
1α-5-14 

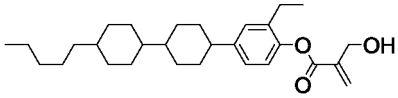
1α-5-15 

1α-5-16 

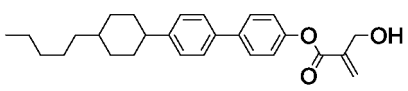
1α-5-17 

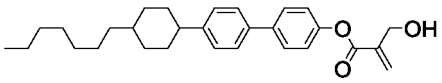
1α-5-18 

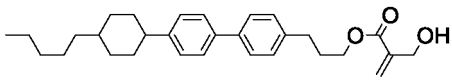
1α-5-19 

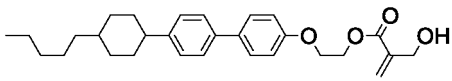
1α-5-20 

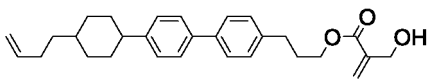
No.

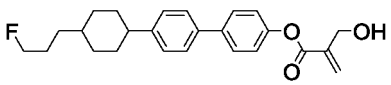
1α-5-21 

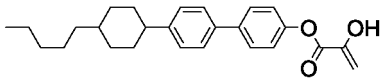
1α-5-22 

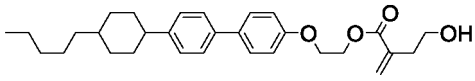
1α-5-23 

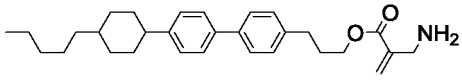
1α-5-24 

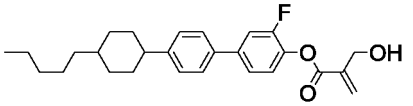
1α-5-25 

1α-5-26 

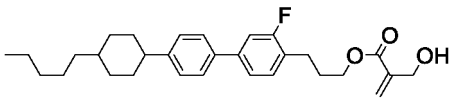
1α-5-27 

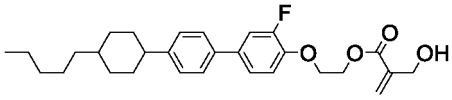
1α-5-28 

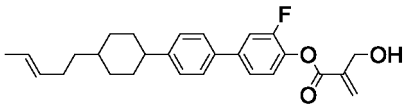
1α-5-29 

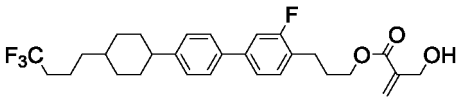
1α-5-30 

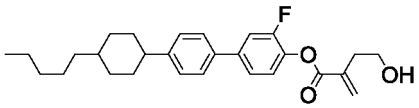
No.

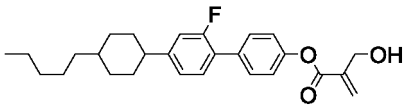
1α-5-31 

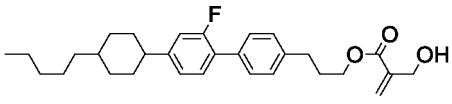
1α-5-32 

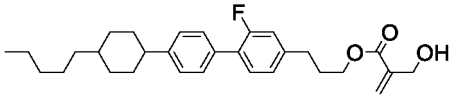
1α-5-33 

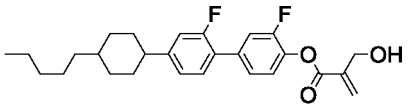
1α-5-34 

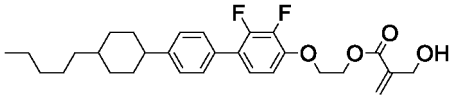
1α-5-35 

1α-5-36 

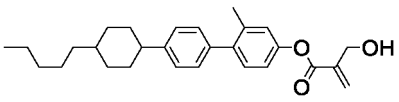
1α-5-37 

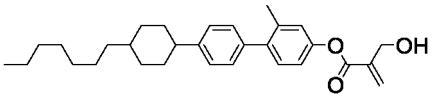
1α-5-38 

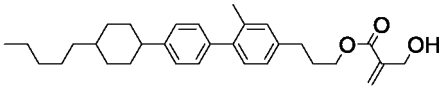
1α-5-39 

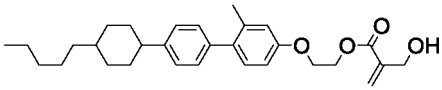
1α-5-40 

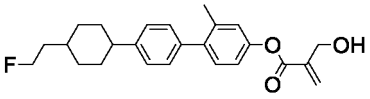
No.

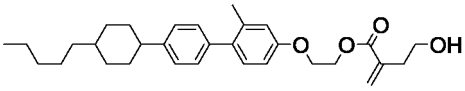
1α-5-41 

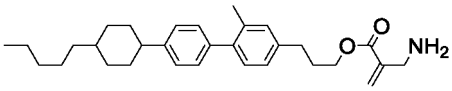
1α-5-42 

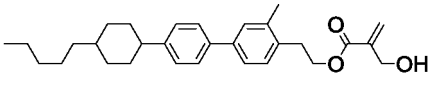
1α-5-43 

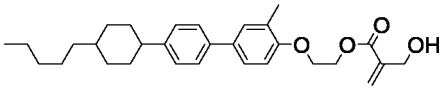
1α-5-44 

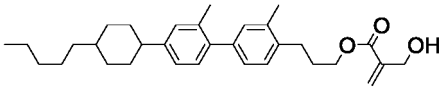
1α-5-45 

1α-5-46 

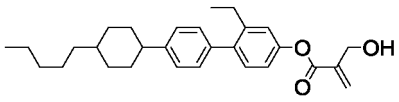
1α-5-47 

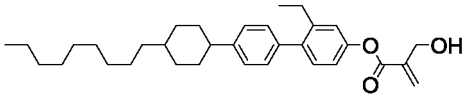
1α-5-48 

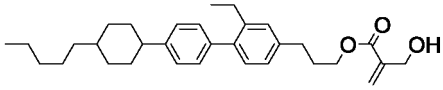
1α-5-49 

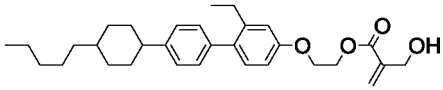
1α-5-50 

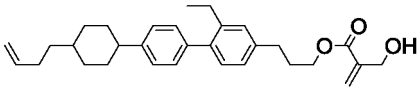
No.

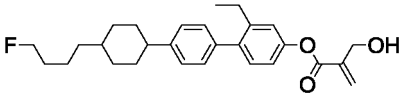
1α-5-51 

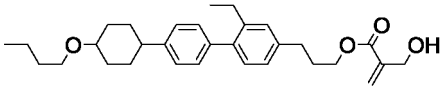
1α-5-52 

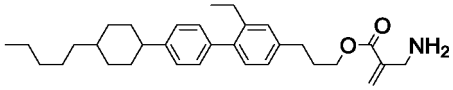
1α-5-53 

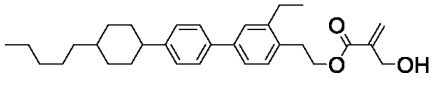
1α-5-54 

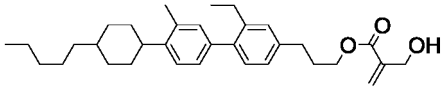
1α-5-55 

1α-5-56 

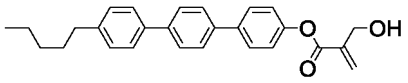
1α-5-57 

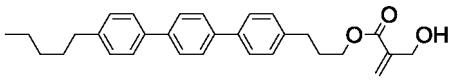
1α-5-58 

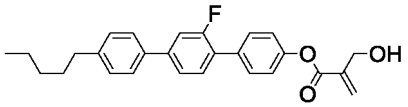
1α-5-59 

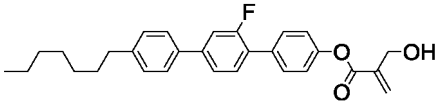
1α-5-60 

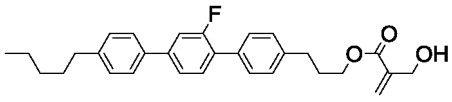
No.

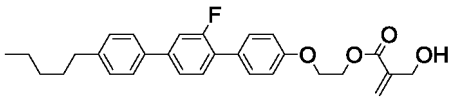
1α-5-61 

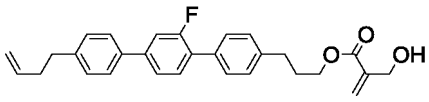
1α-5-62 

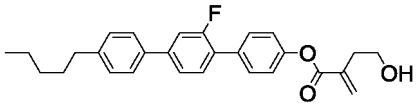
1α-5-63 

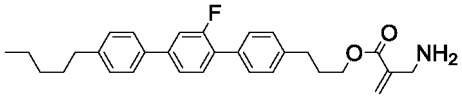
1α-5-64 

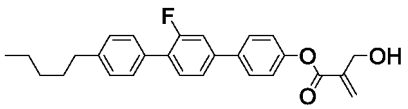
1α-5-65 

1α-5-66 

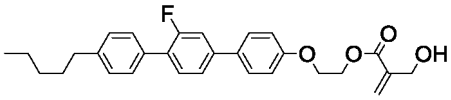
1α-5-67 

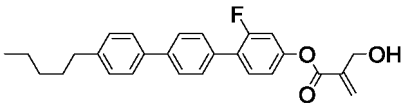
1α-5-68 

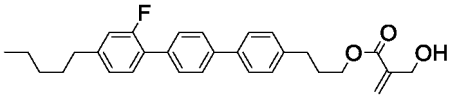
1α-5-69 

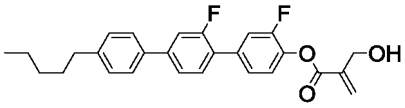
1α-5-70 

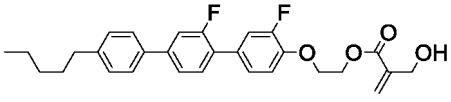
No.

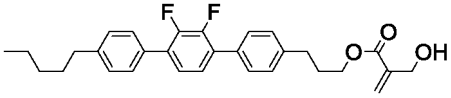
1α-5-71 

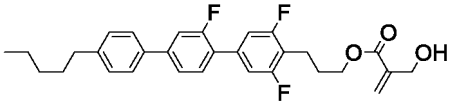
1α-5-72 

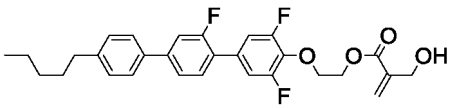
1α-5-73 

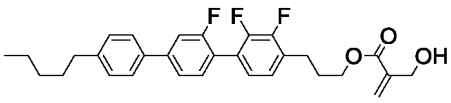
1α-5-74 

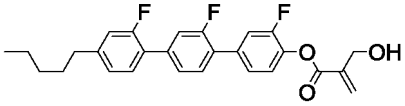
1α-5-75 

1α-5-76 

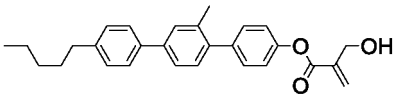
1α-5-77 

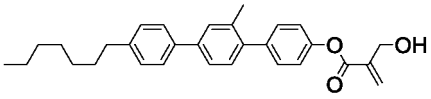
1α-5-78 

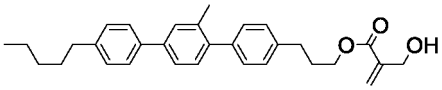
1α-5-79 

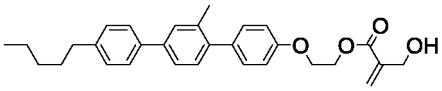
1α-5-80 

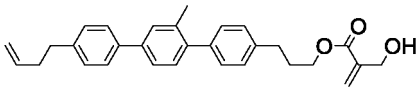
No.

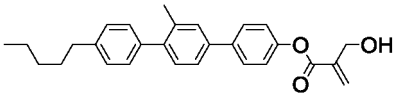
1α-5-81 

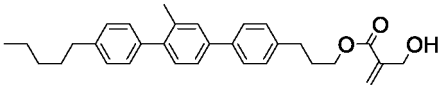
1α-5-82 

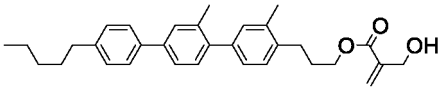
1α-5-83 

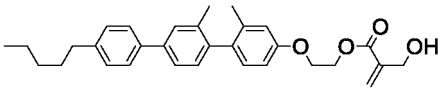
1α-5-84 

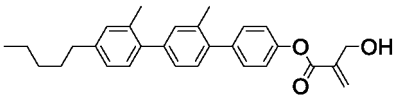
1α-5-85 

1α-5-86 

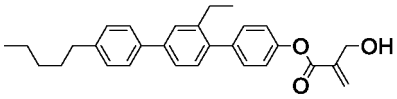
1α-5-87 

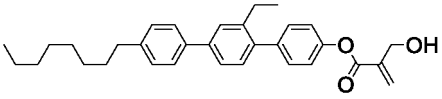
1α-5-88 

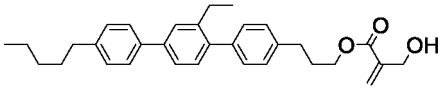
1α-5-89 

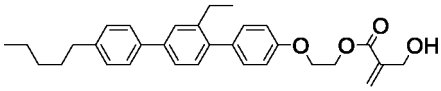
1α-5-90 

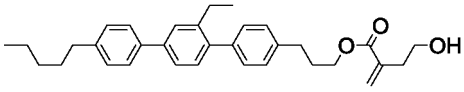
No.

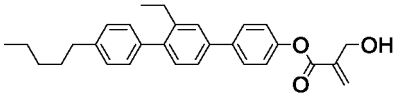
1α-5-91 

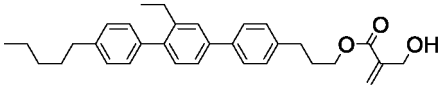
1α-5-92 

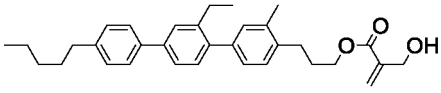
1α-5-93 

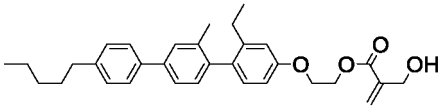
1α-5-94 

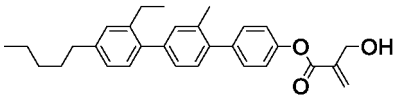
1α-5-95 

1α-5-96 

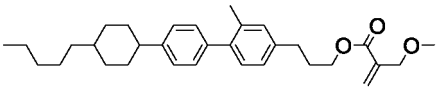
1α-5-97 

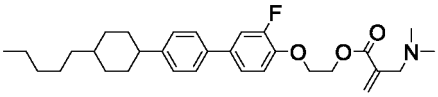
1α-5-98 

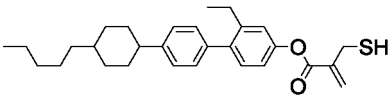
1α-5-99 

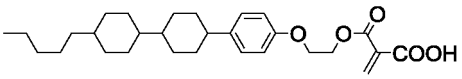
1α-5-100 

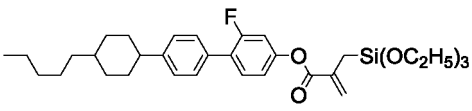
No.

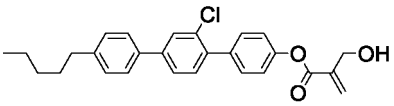
1α-5-101 

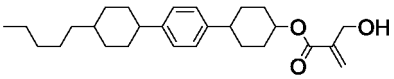
1α-5-102 

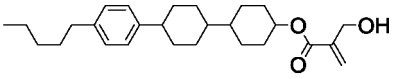
1α-5-103 

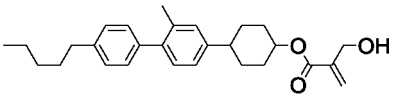
1α-5-104 

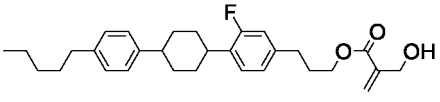
1α-5-105 

1α-5-106 

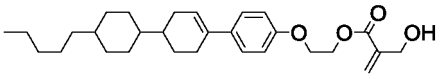
1α-5-107 

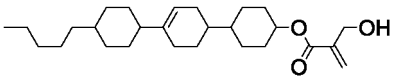
1α-5-108 

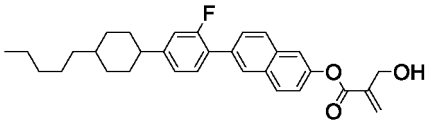
1α-5-109 

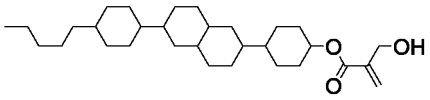
1α-5-110 

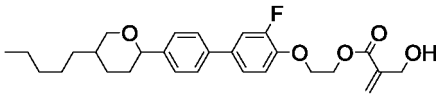
No.

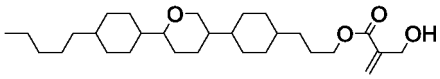
1α-5-111 

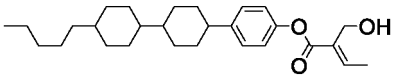
1α-5-112 

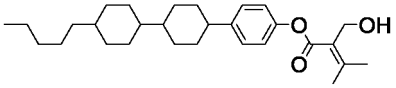
1α-5-113 

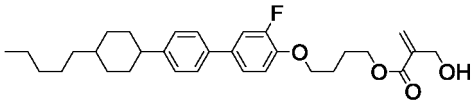
1α-5-114 

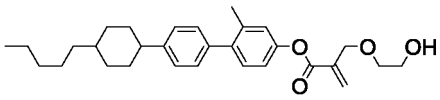
1α-5-115 

1α-5-116 

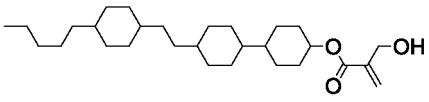
1α-5-117 

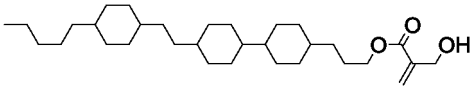
1α-5-118 

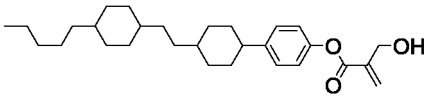
1α-5-119 

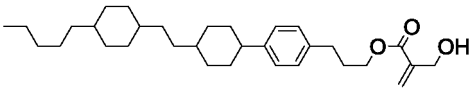
1α-5-120 

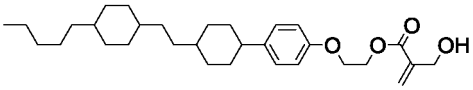
No.

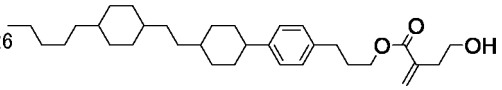
1α-5-121 

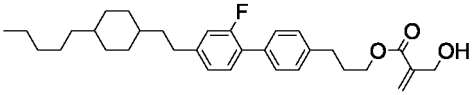
1α-5-122 

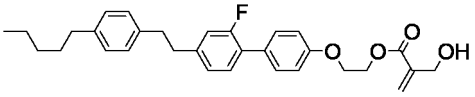
1α-5-123 

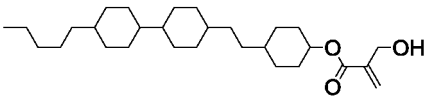
1α-5-124 

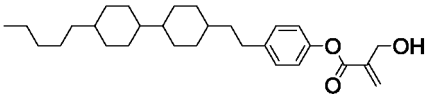
1α-5-125 

1α-5-126 

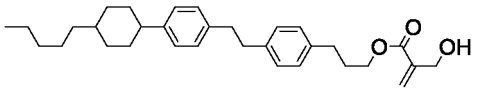
1α-5-127 

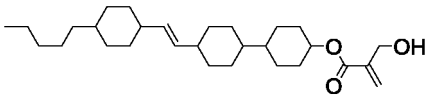
1α-5-128 

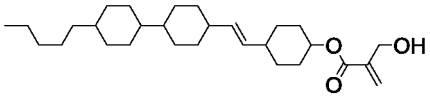
1α-5-129 

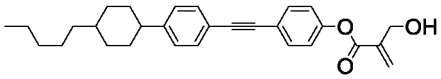
1α-5-130 

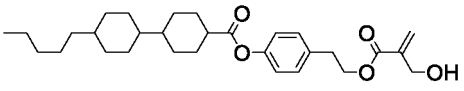
No.

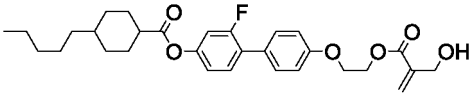
1α-5-131 

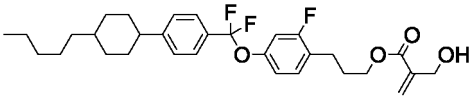
1α-5-132 

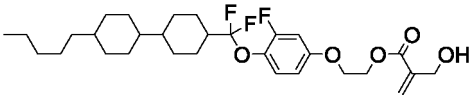
1α-5-133 

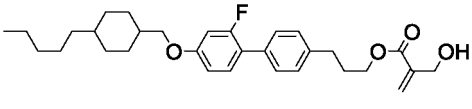
1α-5-134 

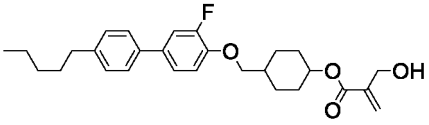
1α-5-135 

1α-5-136 

1α-5-137 

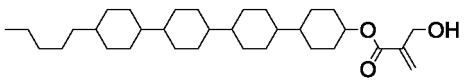
1α-5-138 

1α-5-139 

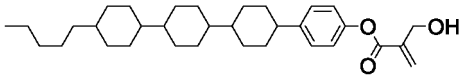
1α-5-140 

No.

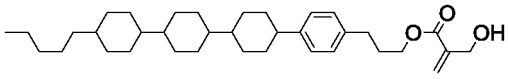
1α-6-1



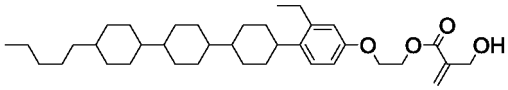
1α-6-2



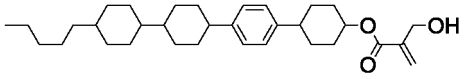
1α-6-3



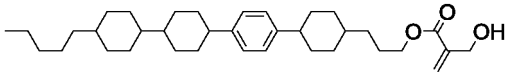
1α-6-4



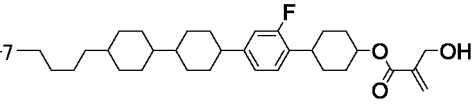
1α-6-5



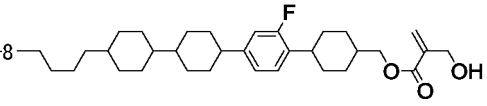
1α-6-6



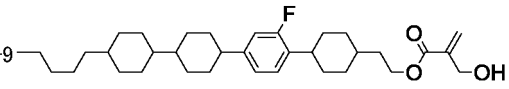
1α-6-7



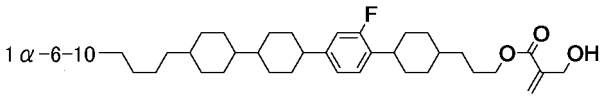
1α-6-8



1α-6-9

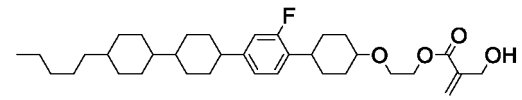


1α-6-10

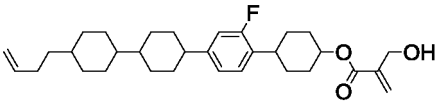


No.

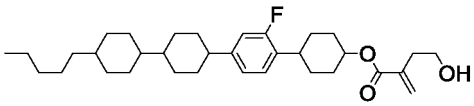
1α-6-11



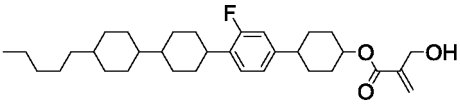
1α-6-12



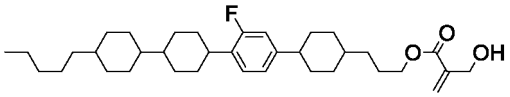
1α-6-13



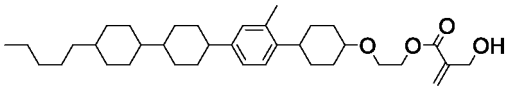
1α-6-14



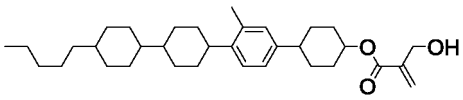
1α-6-15



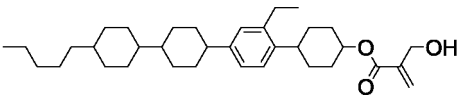
1α-6-16



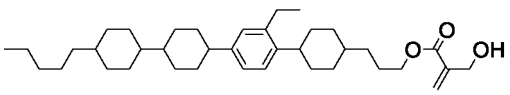
1α-6-17



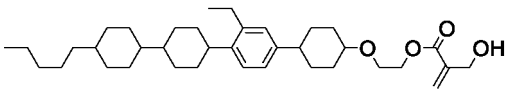
1α-6-18



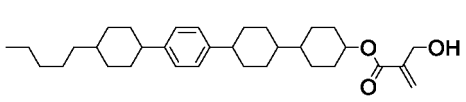
1α-6-19

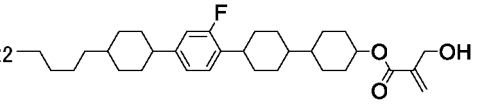


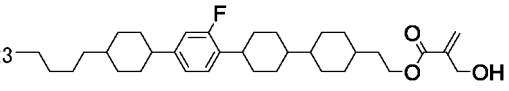
1α-6-20

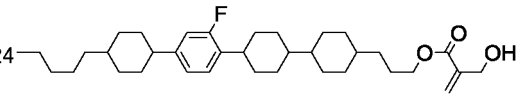


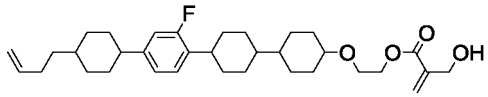
No.

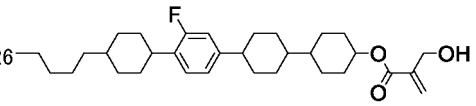
1α-6-21 

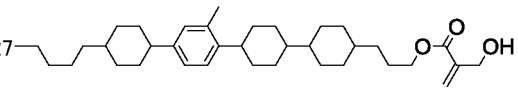
1α-6-22 

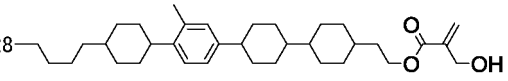
1α-6-23 

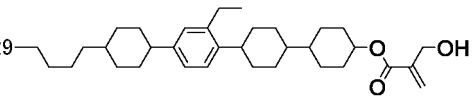
1α-6-24 

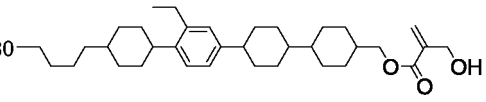
1α-6-25 

1α-6-26 

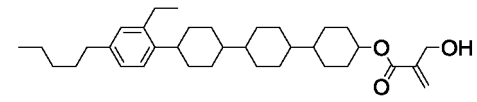
1α-6-27 

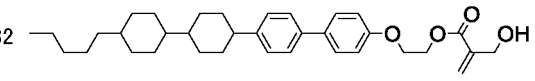
1α-6-28 

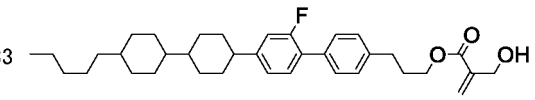
1α-6-29 

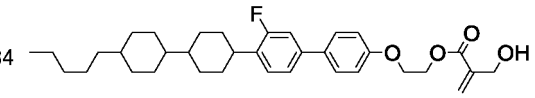
1α-6-30 

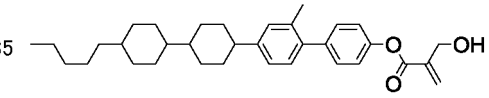
No.

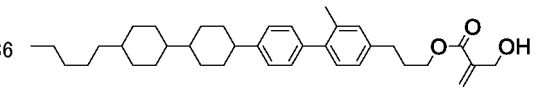
1α-6-31 

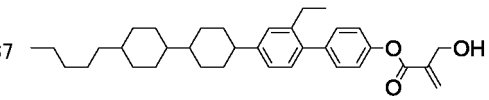
1α-6-32 

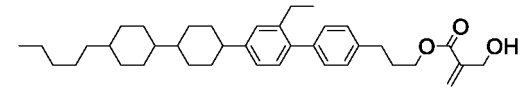
1α-6-33 

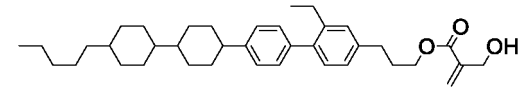
1α-6-34 

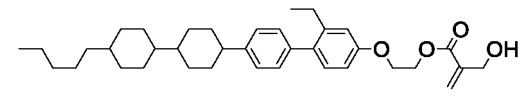
1α-6-35 

1α-6-36 

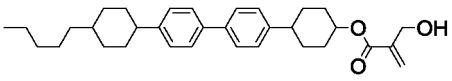
1α-6-37 

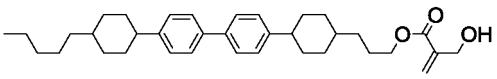
1α-6-38 

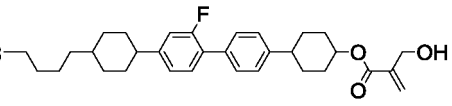
1α-6-39 

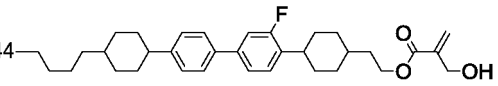
1α-6-40 

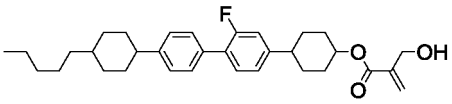
No.

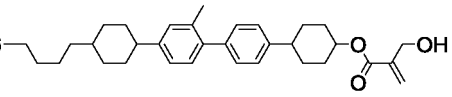
1α-6-41 

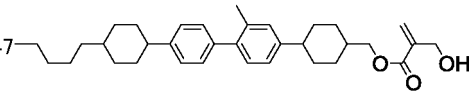
1α-6-42 

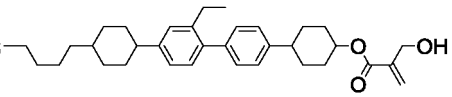
1α-6-43 

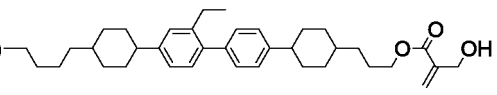
1α-6-44 

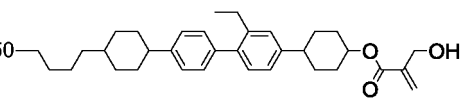
1α-6-45 

1α-6-46 

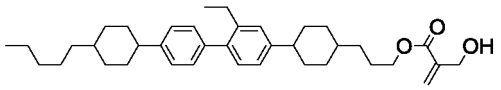
1α-6-47 

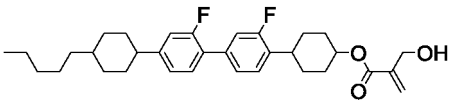
1α-6-48 

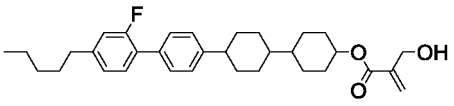
1α-6-49 

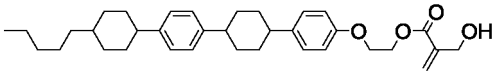
1α-6-50 

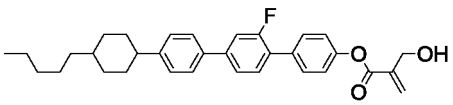
No.

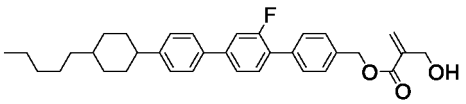
1α-6-51 

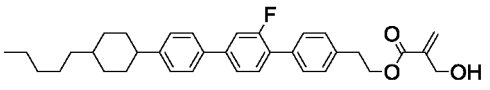
1α-6-52 

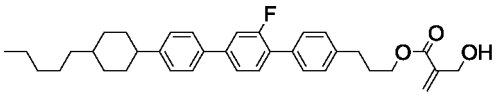
1α-6-53 

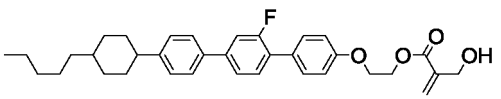
1α-6-54 

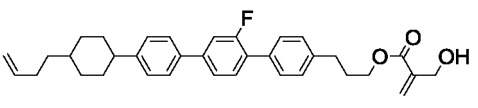
1α-6-55 

1α-6-56 

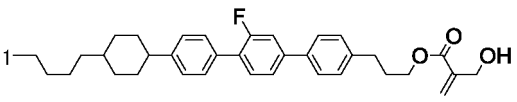
1α-6-57 

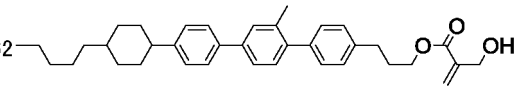
1α-6-58 

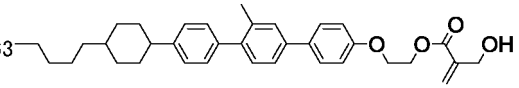
1α-6-59 

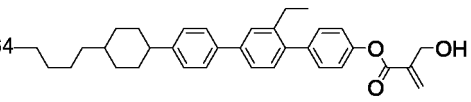
1α-6-60 

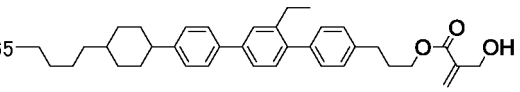
No.

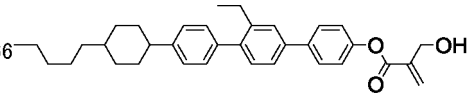
1α-6-61 

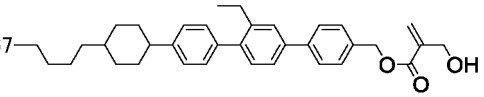
1α-6-62 

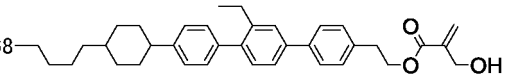
1α-6-63 

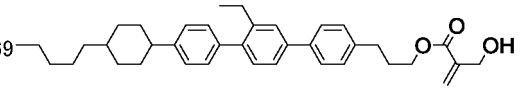
1α-6-64 

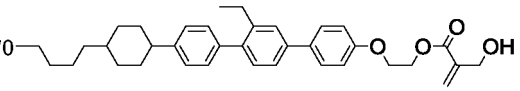
1α-6-65 

1α-6-66 

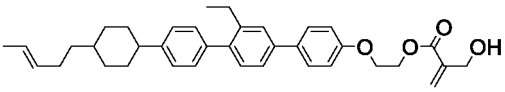
1α-6-67 

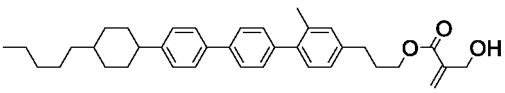
1α-6-68 

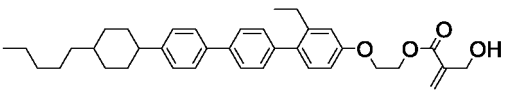
1α-6-69 

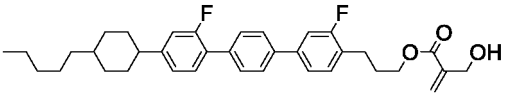
1α-6-70 

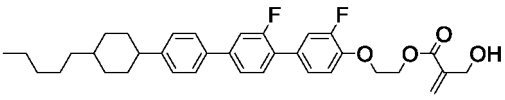
No.

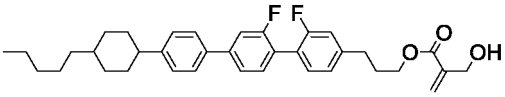
1α-6-71 

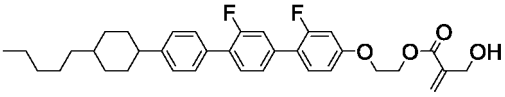
1α-6-72 

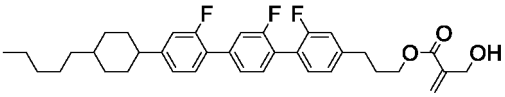
1α-6-73 

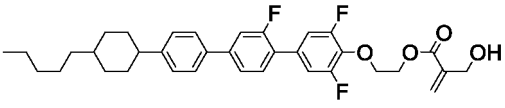
1α-6-74 

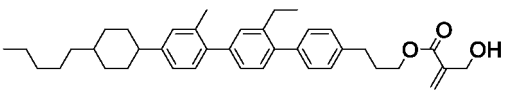
1α-6-75 

1α-6-76 

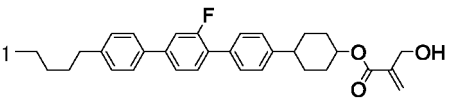
1α-6-77 

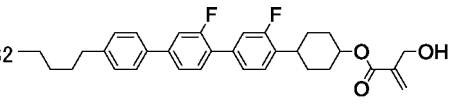
1α-6-78 

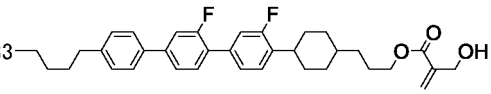
1α-6-79 

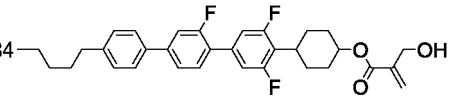
1α-6-80 

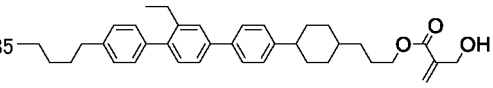
No.

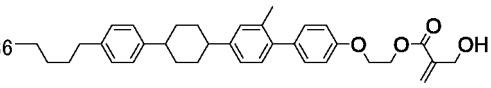
1α-6-81 

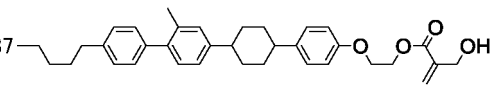
1α-6-82 

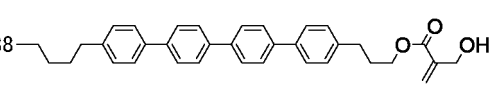
1α-6-83 

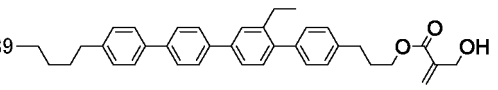
1α-6-84 

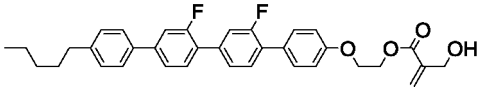
1α-6-85 

1α-6-86 

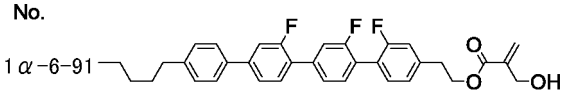
1α-6-87 

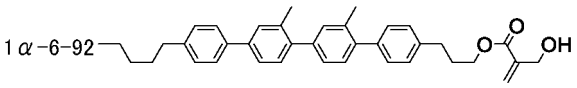
1α-6-88 

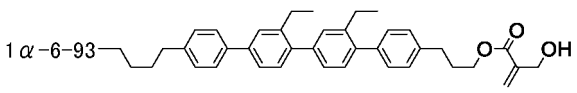
1α-6-89 

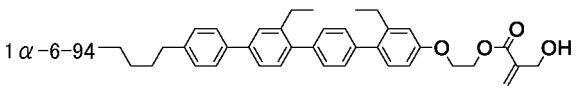
1α-6-90 

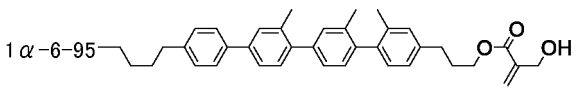
No.

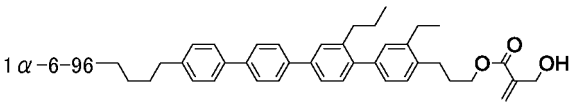
1α-6-91 

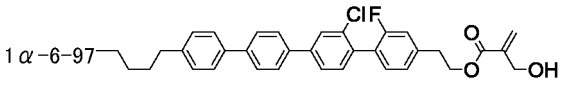
1α-6-92 

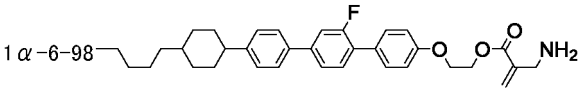
1α-6-93 

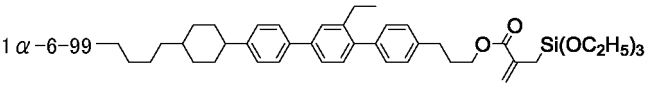
1α-6-94 

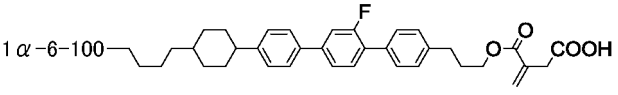
1α-6-95 

1α-6-96 

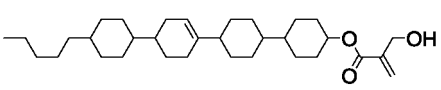
1α-6-97 

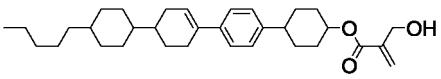
1α-6-98 

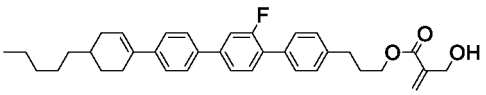
1α-6-99 

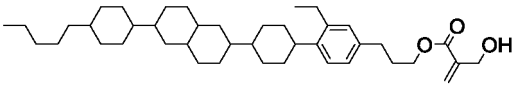
1α-6-100 

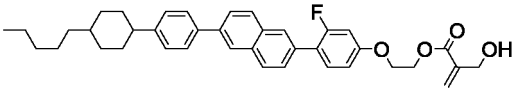
No.

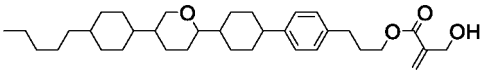
1α-6-101 

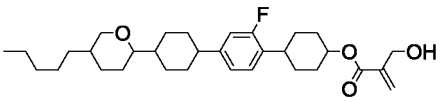
1α-6-102 

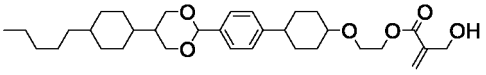
1α-6-103 

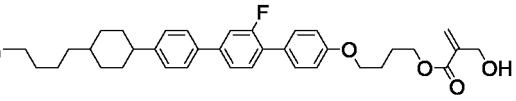
1α-6-104 

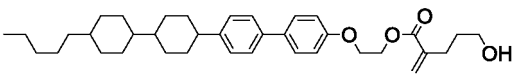
1α-6-105 

1α-6-106 

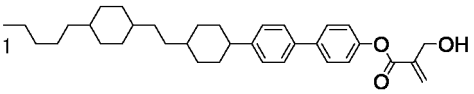
1α-6-107 

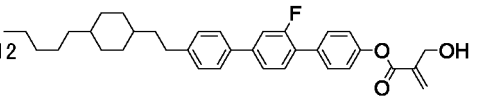
1α-6-108 

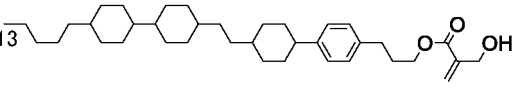
1α-6-109 

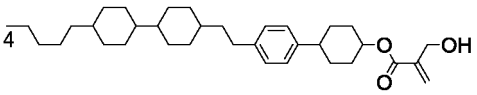
1α-6-110 

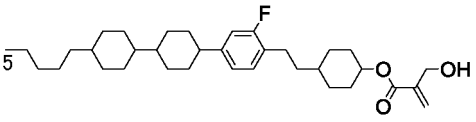
No.

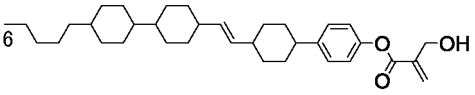
1α-6-111 

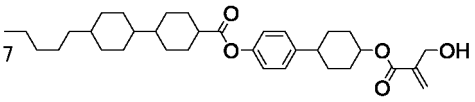
1α-6-112 

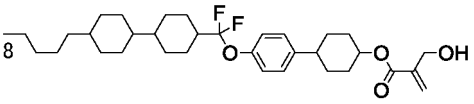
1α-6-113 

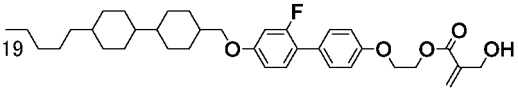
1α-6-114 

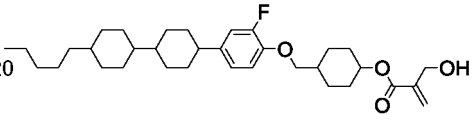
1α-6-115 

1α-6-116 

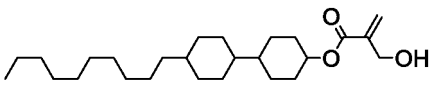
1α-6-117 

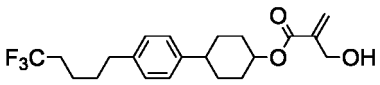
1α-6-118 

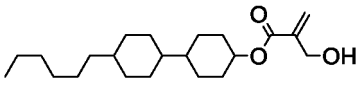
1α-6-119 

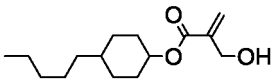
1α-6-120 

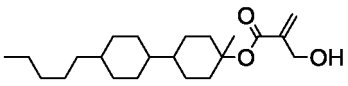
No.

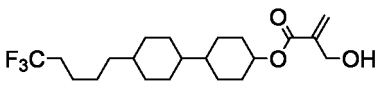
1α-6-121 

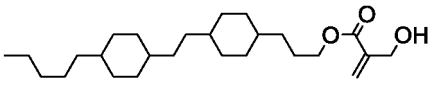
1α-6-122 

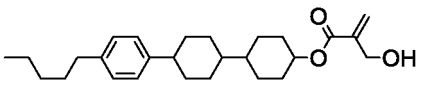
1α-6-123 

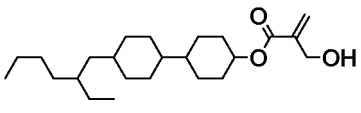
1α-6-124 

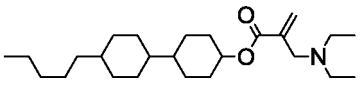
1α-6-125 

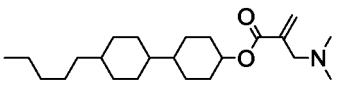
1α-6-126 

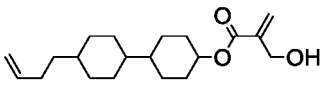
1α-6-127 

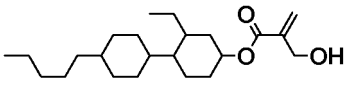
1α-6-128 

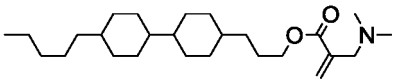
1α-6-129 

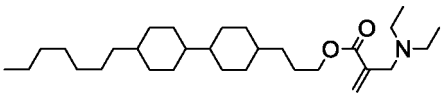
1α-6-130 

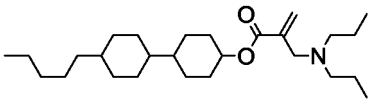
1α-6-131 

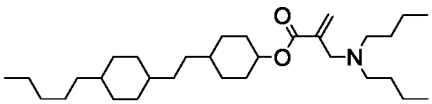
1α-6-132 

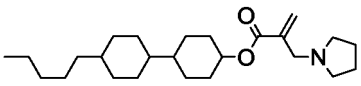
1α-6-133 

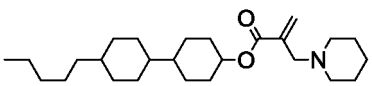
1α-6-134 

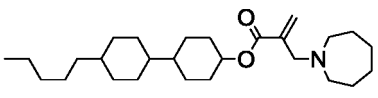
1α-6-135 

1α-6-136 

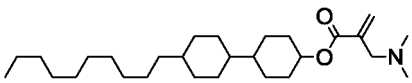
1α-6-137 

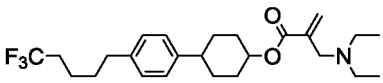
1α-6-138 

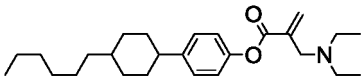
1α-6-139 

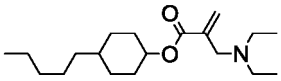
1α-6-140 

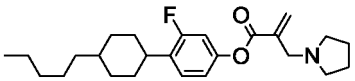
No.

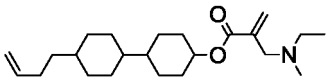
1α-6-141 

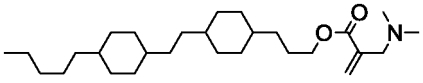
1α-6-142 

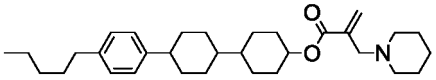
1α-6-143 

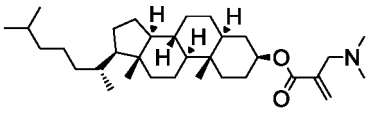
1α-6-144 

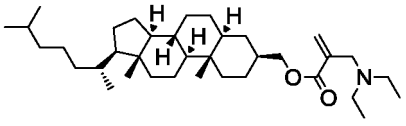
1α-6-145 

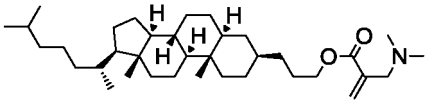
1α-6-146 

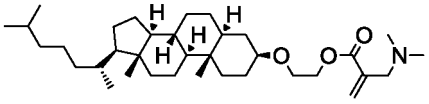
1α-6-147 

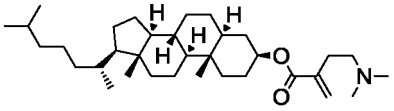
1α-6-148 

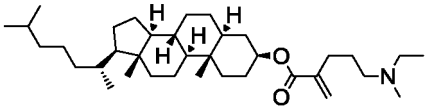
1α-6-149 

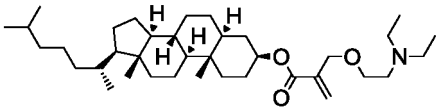
1α-6-150 

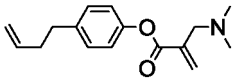
1α-6-151 

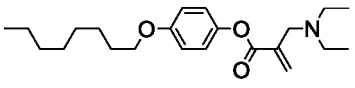
1α-6-152 

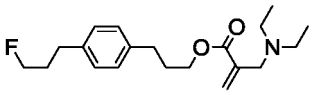
1α-6-153 

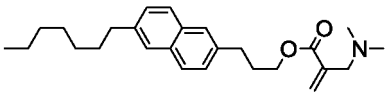
1α-6-154 

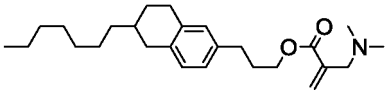
1α-6-155 

1α-6-156 

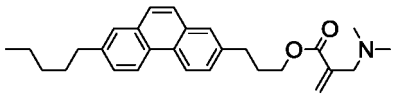
1α-6-157 

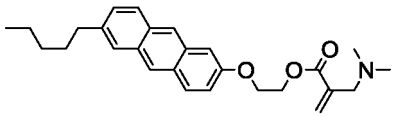
1α-6-158 

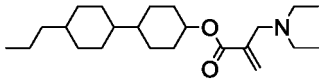
1α-6-159 

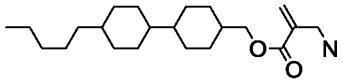
1α-6-160 

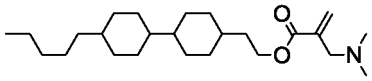
No.

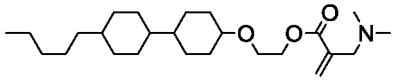
1α-6-161 

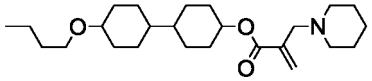
1α-6-162 

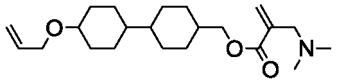
1α-6-163 

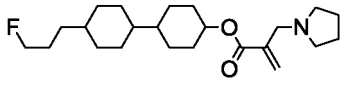
1α-6-164 

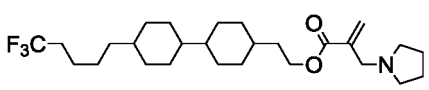
1α-6-165 

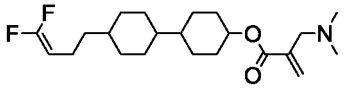
1α-6-166 

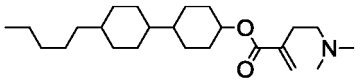
1α-6-167 

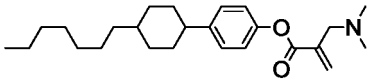
1α-6-168 

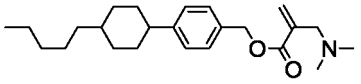
1α-6-169 

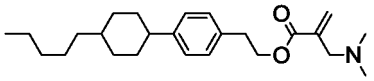
1α-6-170 

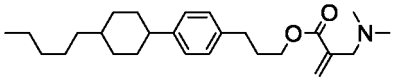
1α-6-171 

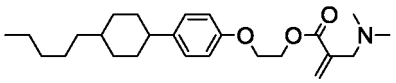
1α-6-172 

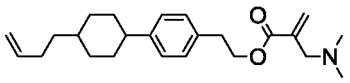
1α-6-173 

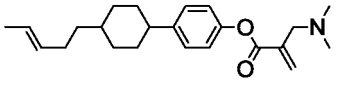
1α-6-174 

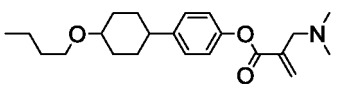
1α-6-175 

1α-6-176 

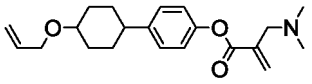
1α-6-177 

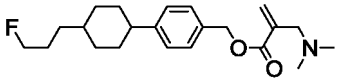
1α-6-178 

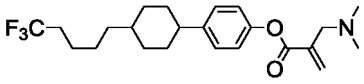
1α-6-179 

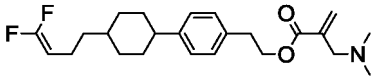
1α-6-180 

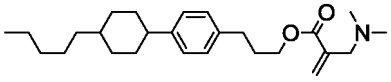
No.

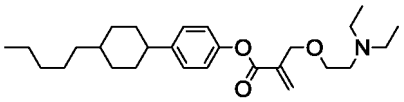
1α-6-181 

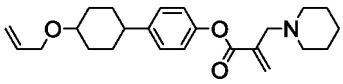
1α-6-182 

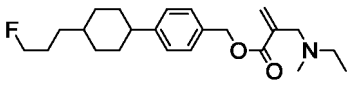
1α-6-183 

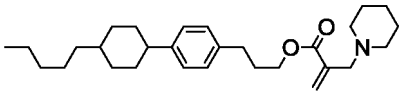
1α-6-184 

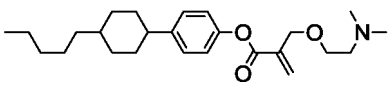
1α-6-185 

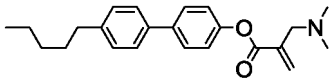
1α-6-186 

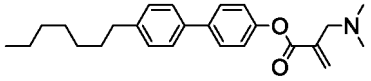
1α-6-187 

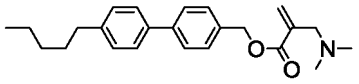
1α-6-188 

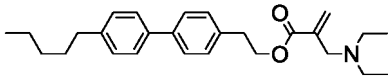
1α-6-189 

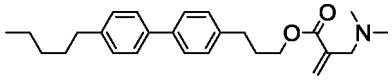
1α-6-190 

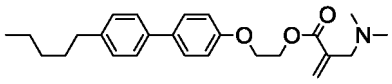
1α-6-191 

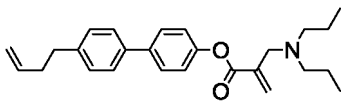
1α-6-192 

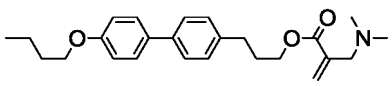
1α-6-193 

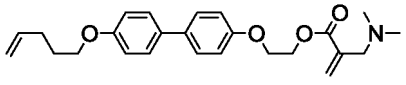
1α-6-194 

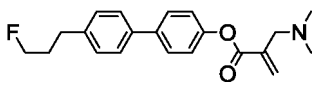
1α-6-195 

1α-6-196 

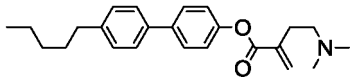
1α-6-197 

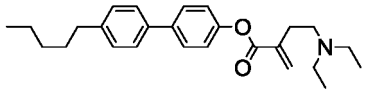
1α-6-198 

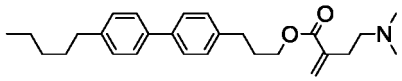
1α-6-199 

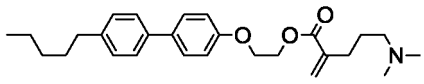
1α-6-200 

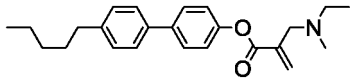
No.

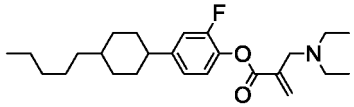
1α-6-201 

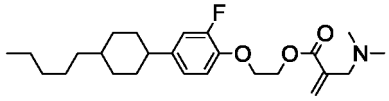
1α-6-202 

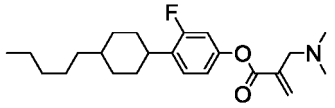
1α-6-203 

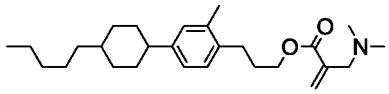
1α-6-204 

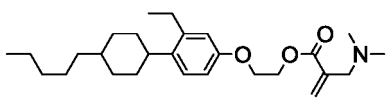
1α-6-205 

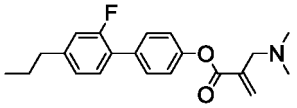
1α-6-206 

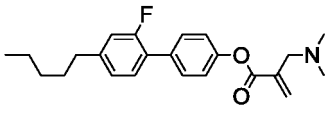
1α-6-207 

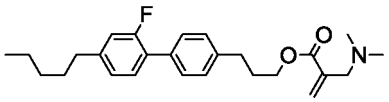
1α-6-208 

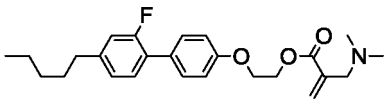
1α-6-209 

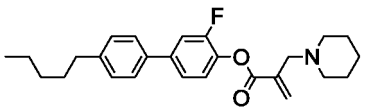
1α-6-210 

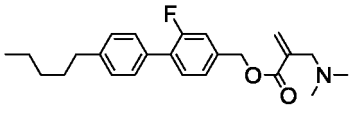
1α-6-211 

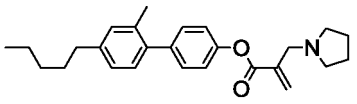
1α-6-212 

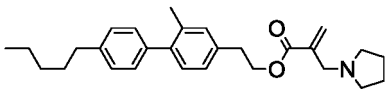
1α-6-213 

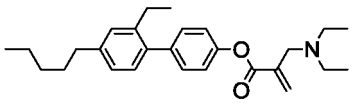
1α-6-214 

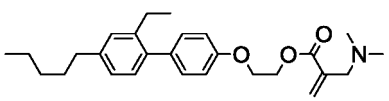
1α-6-215 

1α-6-216 

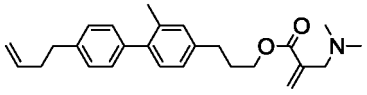
1α-6-217 

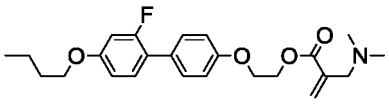
1α-6-218 

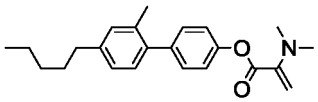
1α-6-219 

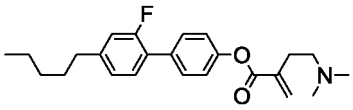
1α-6-220 

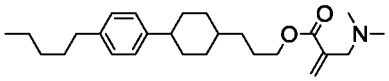
No.

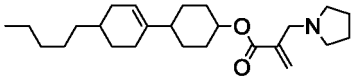
1α-6-221 

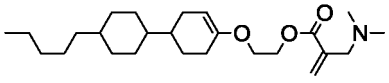
1α-6-222 

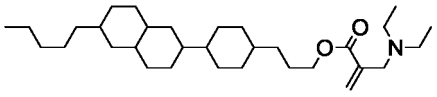
1α-6-223 

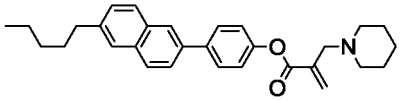
1α-6-224 

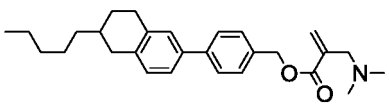
1α-6-225 

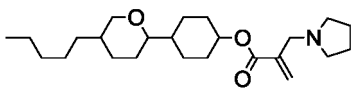
1α-6-226 

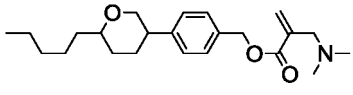
1α-6-227 

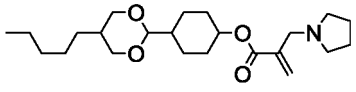
1α-6-228 

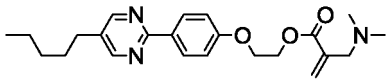
1α-6-229 

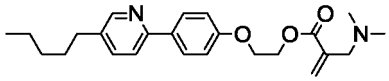
1α-6-230 

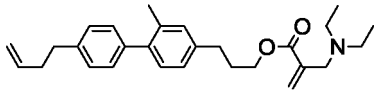
1α-6-231 

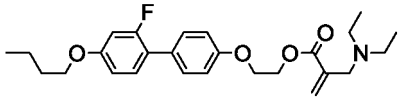
1α-6-232 

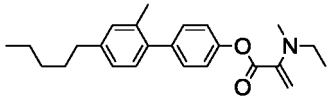
1α-6-233 

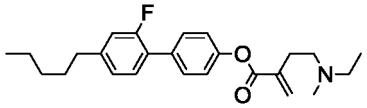
1α-6-234 

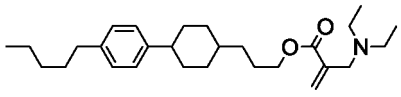
1α-6-235 

1α-6-236 

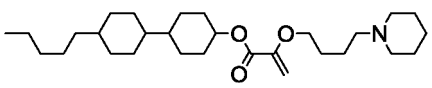
1α-6-237 

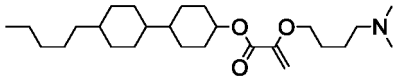
1α-6-238 

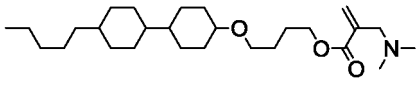
1α-6-239 

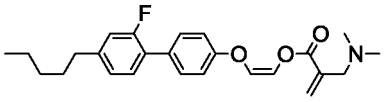
1α-6-240 

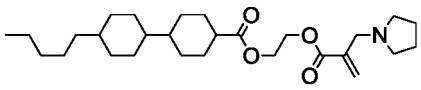
No.

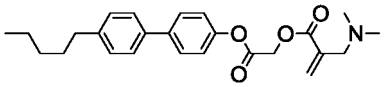
1α-6-241 

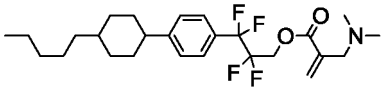
1α-6-242 

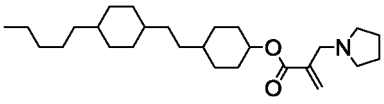
1α-6-243 

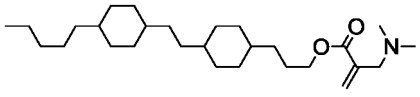
1α-6-244 

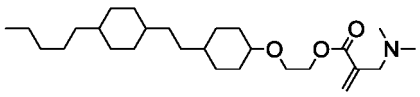
1α-6-245 

1α-6-246 

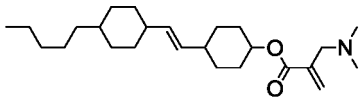
1α-6-247 

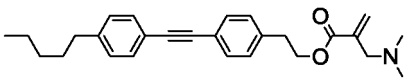
1α-6-248 

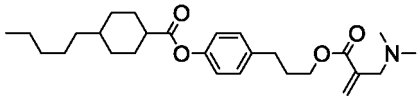
1α-6-249 

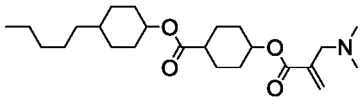
1α-6-250 

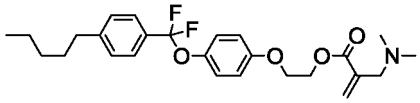
No.

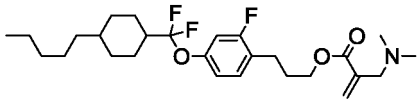
1α-6-251 

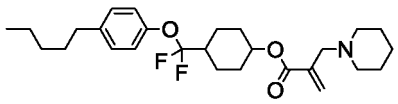
1α-6-252 

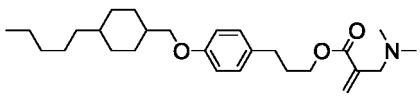
1α-6-253 

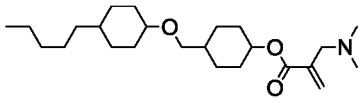
1α-6-254 

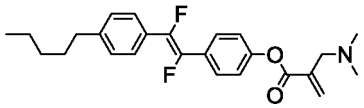
1α-6-255 

1α-6-256 

1α-6-257 

1α-6-258 

1α-6-259 

1α-6-260 

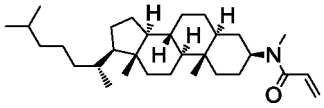
【０６４８】

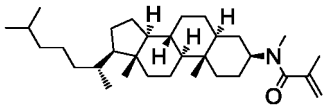
［１５．化合物（１β）の例示］

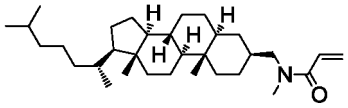
合成例に記載した合成法に準じて、以下の化合物（１β－３－１）～（１β－３－８２）、化合物（１β－４－１）～（１β－４－２４４）、化合物（１β－５－１）～（１β－５－２９６）、および化合物（１β－６－１）～（１β－６－２５８）を合成すること

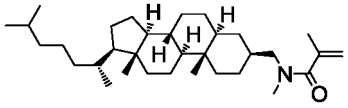
が可能である。

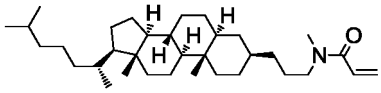
No.

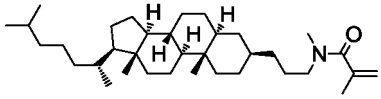
1β-3-1 

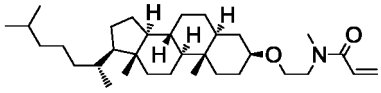
1β-3-2 

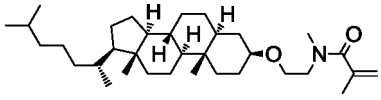
1β-3-3 

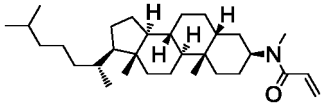
1β-3-4 

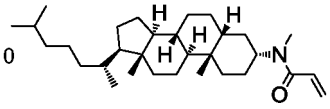
1β-3-5 

1β-3-6 

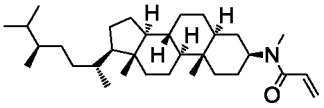
1β-3-7 

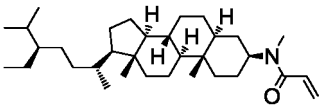
1β-3-8 

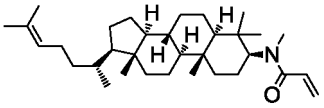
1β-3-9 

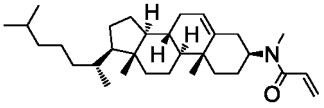
1β-3-10 

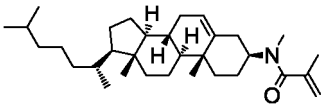
No.

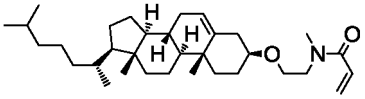
1β-3-11 

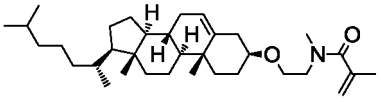
1β-3-12 

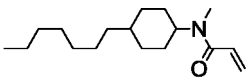
1β-3-13 

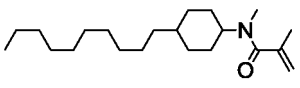
1β-3-14 

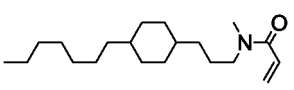
1β-3-15 

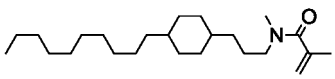
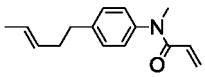
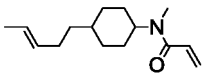
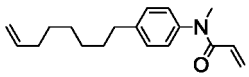
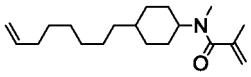
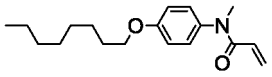
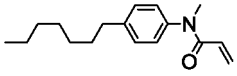
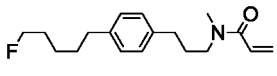
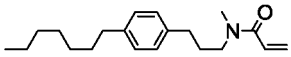
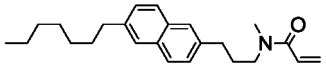
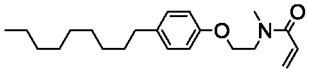
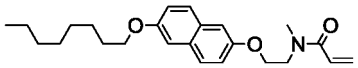
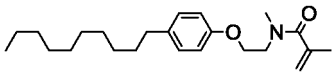
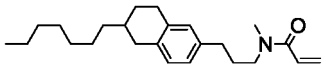
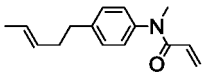
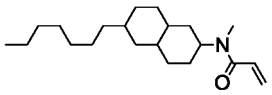
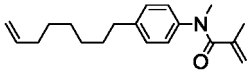
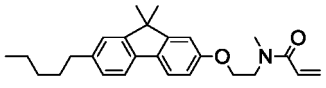
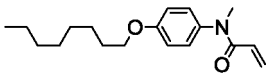
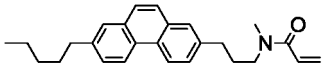
1β-3-16 

1β-3-17 

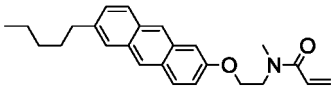
1β-3-18 

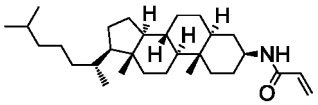
1β-3-19 

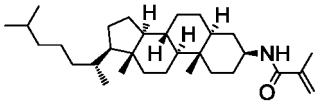
1β-3-20 

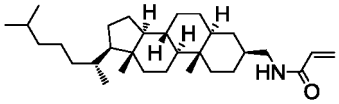
No.		No.	
1β-3-21		1β-3-31	
1β-3-22		1β-3-32	
1β-3-23		1β-3-33	
1β-3-24		1β-3-34	
1β-3-25		1β-3-35	
1β-3-26		1β-3-36	
1β-3-27		1β-3-37	
1β-3-28		1β-3-38	
1β-3-29		1β-3-39	
1β-3-30		1β-3-40	

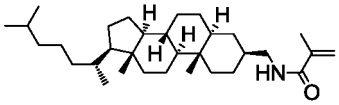
No.

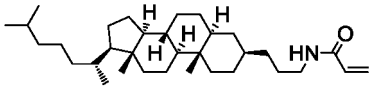
1β-3-41 

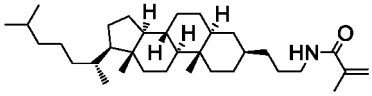
1β-3-42 

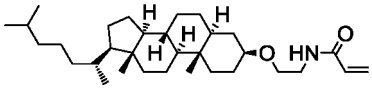
1β-3-43 

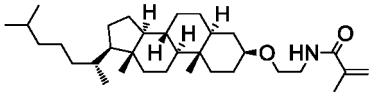
1β-3-44 

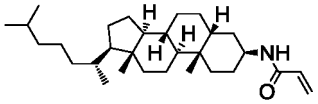
1β-3-45 

1β-3-46 

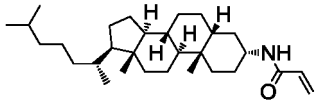
1β-3-47 

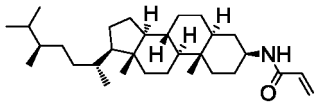
1β-3-48 

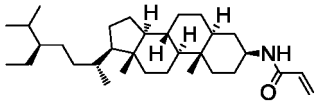
1β-3-49 

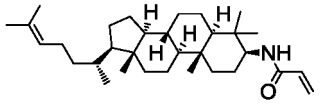
1β-3-50 

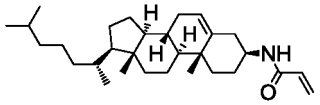
No.

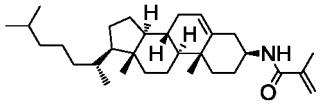
1β-3-51 

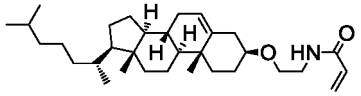
1β-3-52 

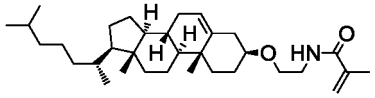
1β-3-53 

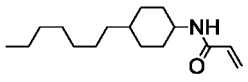
1β-3-54 

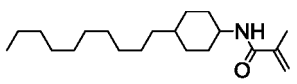
1β-3-55 

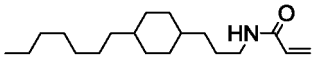
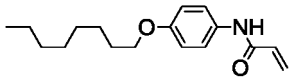
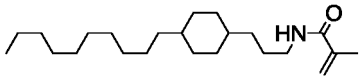
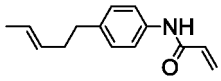
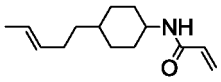
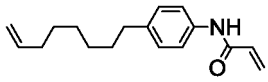
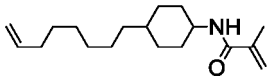
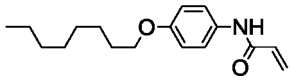
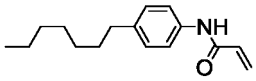
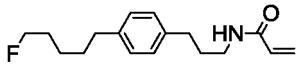
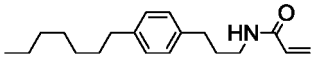
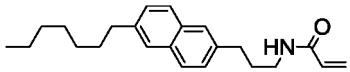
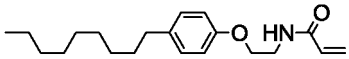
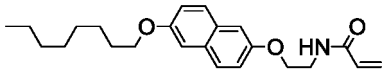
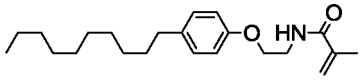
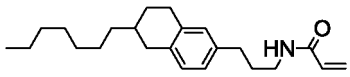
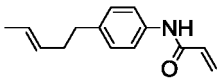
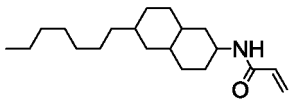
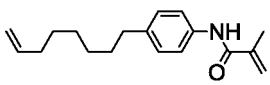
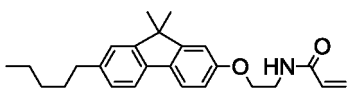
1β-3-56 

1β-3-57 

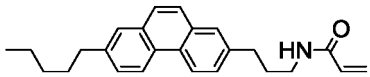
1β-3-58 

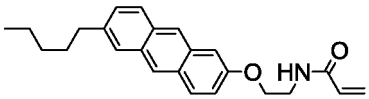
1β-3-59 

1β-3-60 

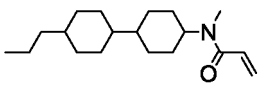
No.		No.	
1β-3-61		1β-3-71	
1β-3-62		1β-3-72	
1β-3-63		1β-3-73	
1β-3-64		1β-3-74	
1β-3-65		1β-3-75	
1β-3-66		1β-3-76	
1β-3-67		1β-3-77	
1β-3-68		1β-3-78	
1β-3-69		1β-3-79	
1β-3-70		1β-3-80	

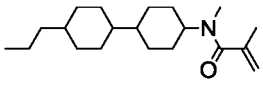
No.

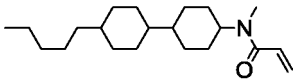
1β-3-81 

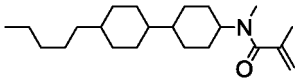
1β-3-82 

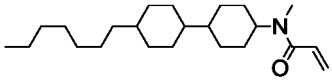
No.

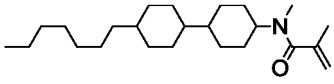
1β-4-1 

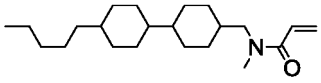
1β-4-2 

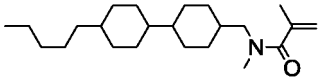
1β-4-3 

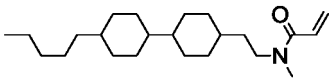
1β-4-4 

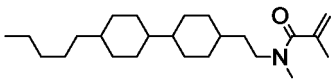
1β-4-5 

1β-4-6 

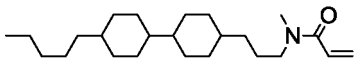
1β-4-7 

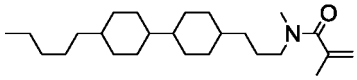
1β-4-8 

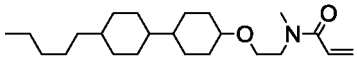
1β-4-9 

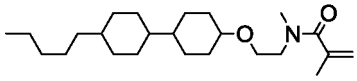
1β-4-10 

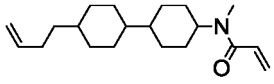
No.

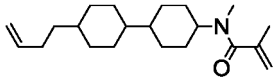
1β-4-11 

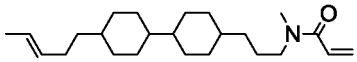
1β-4-12 

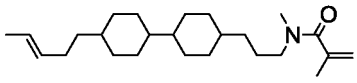
1β-4-13 

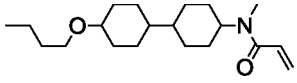
1β-4-14 

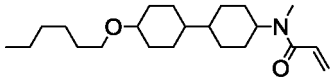
1β-4-15 

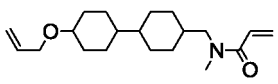
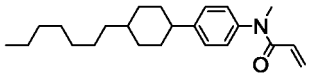
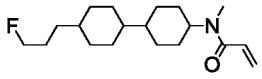
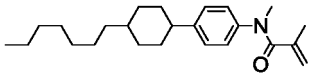
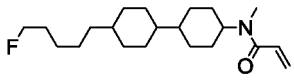
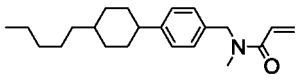
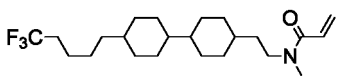
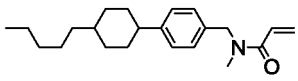
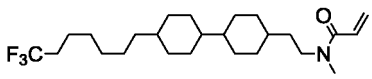
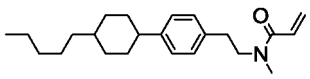
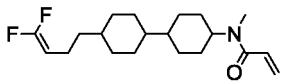
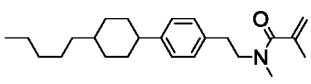
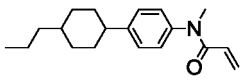
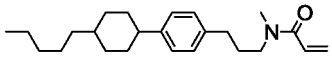
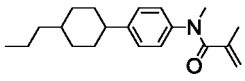
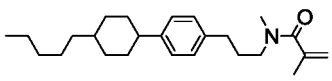
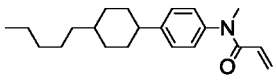
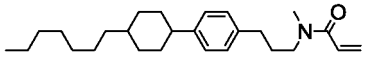
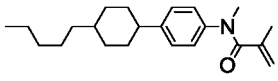
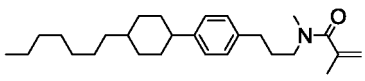
1β-4-16 

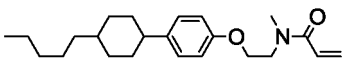
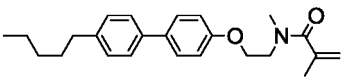
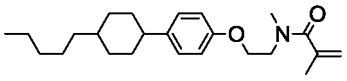
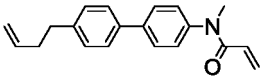
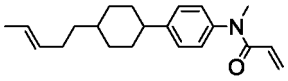
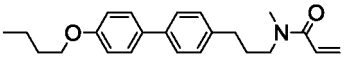
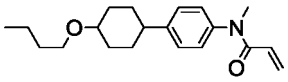
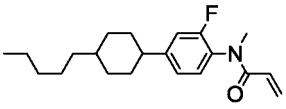
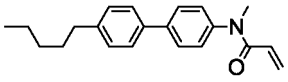
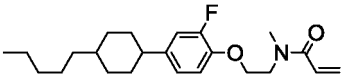
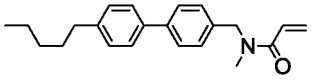
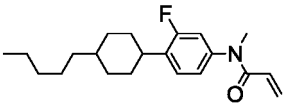
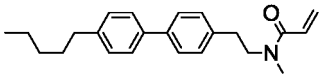
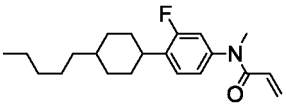
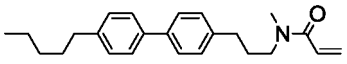
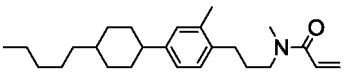
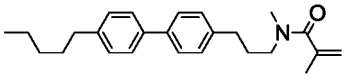
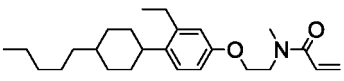
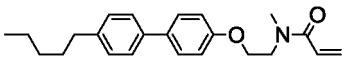
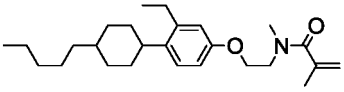
1β-4-17 

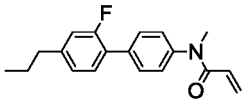
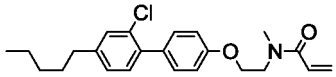
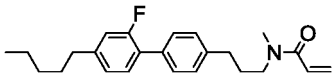
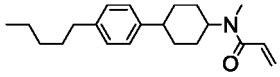
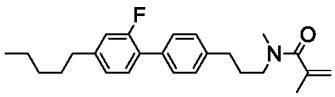
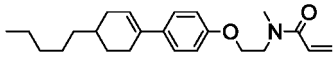
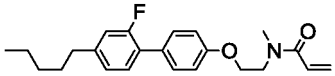
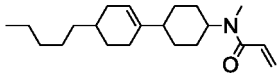
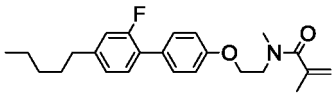
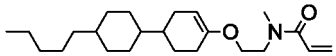
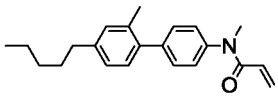
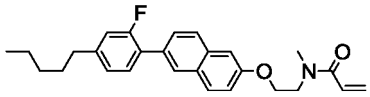
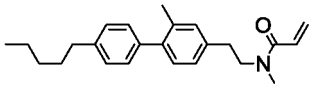
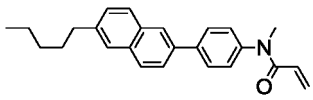
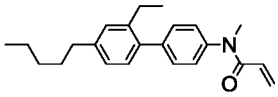
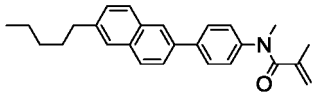
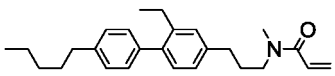
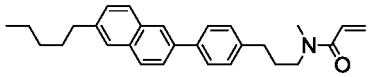
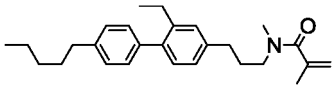
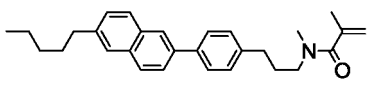
1β-4-18 

1β-4-19 

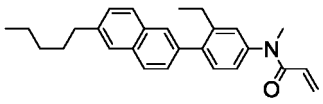
1β-4-20 

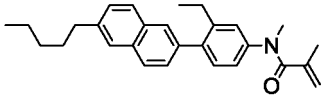
No.		No.	
1β-4-21		1β-4-31	
1β-4-22		1β-4-32	
1β-4-23		1β-4-33	
1β-4-24		1β-4-34	
1β-4-25		1β-4-35	
1β-4-26		1β-4-36	
1β-4-27		1β-4-37	
1β-4-28		1β-4-38	
1β-4-29		1β-4-39	
1β-4-30		1β-4-40	

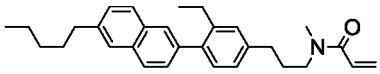
No.		No.	
1β-4-41		1β-4-51	
1β-4-42		1β-4-52	
1β-4-43		1β-4-53	
1β-4-44		1β-4-54	
1β-4-45		1β-4-55	
1β-4-46		1β-4-56	
1β-4-47		1β-4-57	
1β-4-48		1β-4-58	
1β-4-49		1β-4-59	
1β-4-50		1β-4-60	

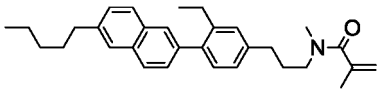
No.		No.	
1β-4-61		1β-4-71	
1β-4-62		1β-4-72	
1β-4-63		1β-4-73	
1β-4-64		1β-4-74	
1β-4-65		1β-4-75	
1β-4-66		1β-4-76	
1β-4-67		1β-4-77	
1β-4-68		1β-4-78	
1β-4-69		1β-4-79	
1β-4-70		1β-4-80	

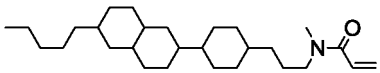
No.

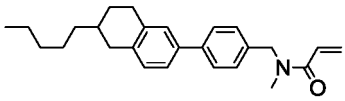
1β-4-81 

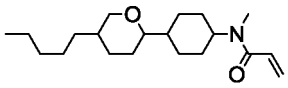
1β-4-82 

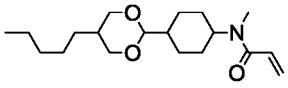
1β-4-83 

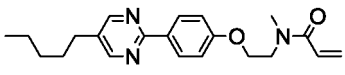
1β-4-84 

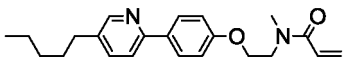
1β-4-85 

1β-4-86 

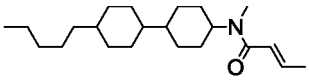
1β-4-87 

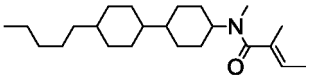
1β-4-88 

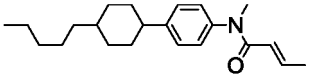
1β-4-89 

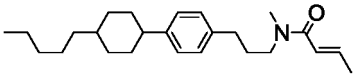
1β-4-90 

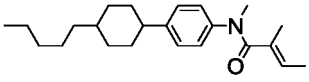
No.

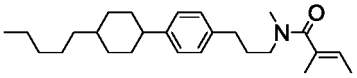
1β-4-91 

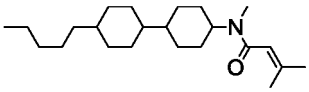
1β-4-92 

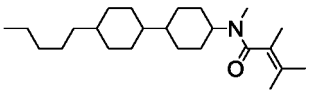
1β-4-93 

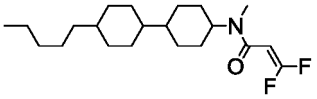
1β-4-94 

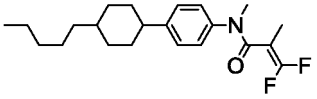
1β-4-95 

1β-4-96 

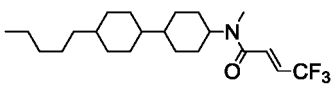
1β-4-97 

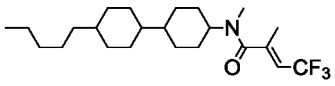
1β-4-98 

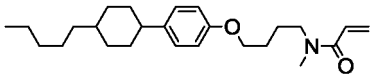
1β-4-99 

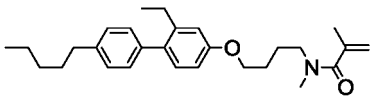
1β-4-100 

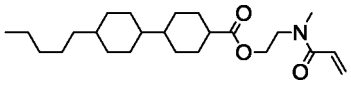
No.

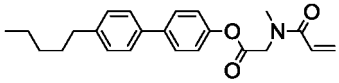
1β-4-101 

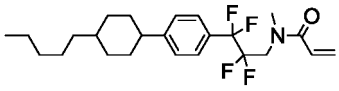
1β-4-102 

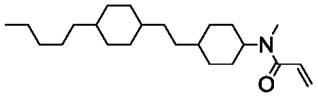
1β-4-103 

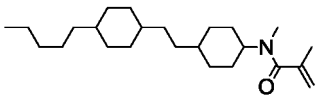
1β-4-104 

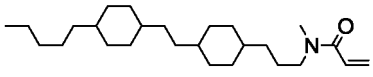
1β-4-105 

1β-4-106 

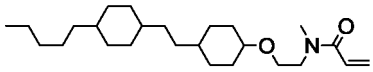
1β-4-107 

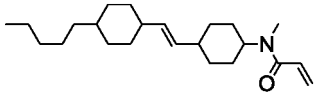
1β-4-108 

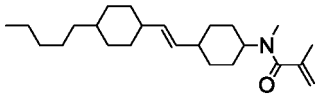
1β-4-109 

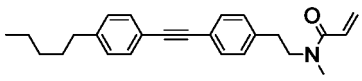
1β-4-110 

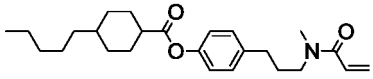
No.

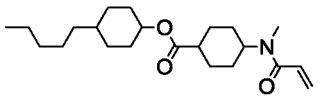
1β-4-111 

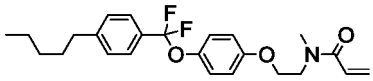
1β-4-112 

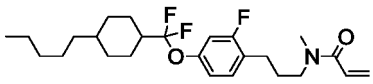
1β-4-113 

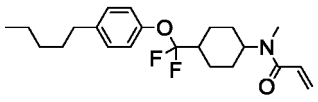
1β-4-114 

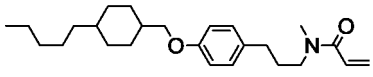
1β-4-115 

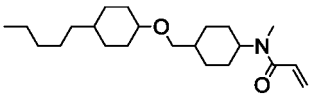
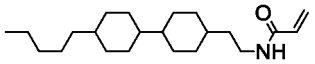
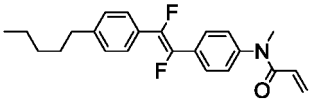
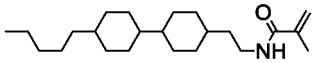
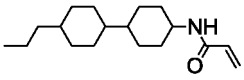
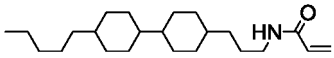
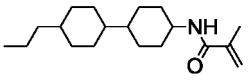
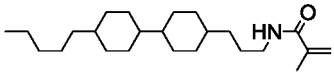
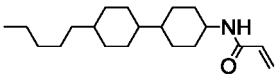
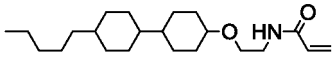
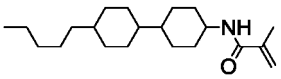
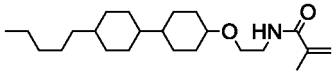
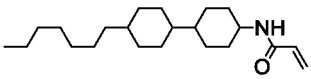
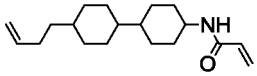
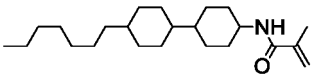
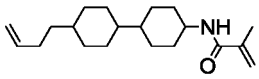
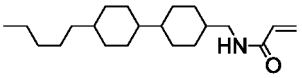
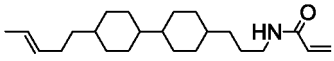
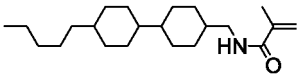
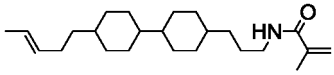
1β-4-116 

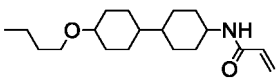
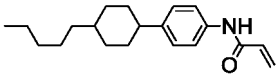
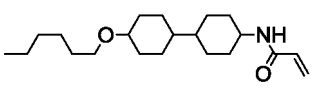
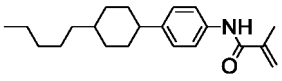
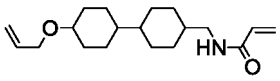
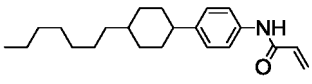
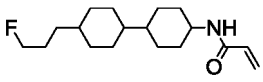
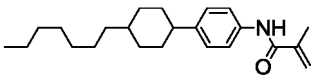
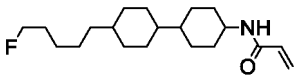
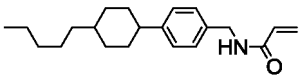
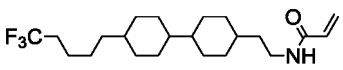
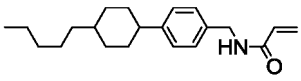
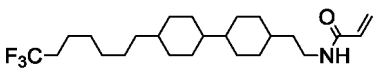
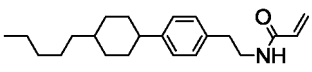
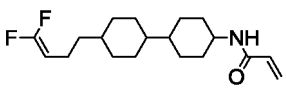
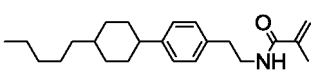
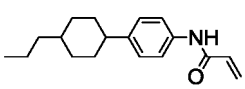
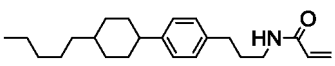
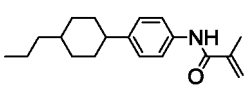
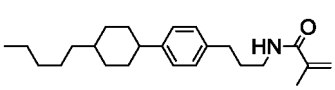
1β-4-117 

1β-4-118 

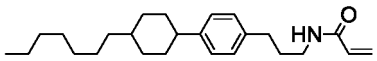
1β-4-119 

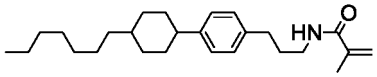
1β-4-120 

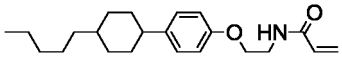
No.		No.	
1β-4-121		1β-4-131	
1β-4-122		1β-4-132	
1β-4-123		1β-4-133	
1β-4-124		1β-4-134	
1β-4-125		1β-4-135	
1β-4-126		1β-4-136	
1β-4-127		1β-4-137	
1β-4-128		1β-4-138	
1β-4-129		1β-4-139	
1β-4-130		1β-4-140	

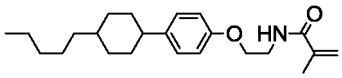
No.		No.	
1β-4-141		1β-4-151	
1β-4-142		1β-4-152	
1β-4-143		1β-4-153	
1β-4-144		1β-4-154	
1β-4-145		1β-4-155	
1β-4-146		1β-4-156	
1β-4-147		1β-4-157	
1β-4-148		1β-4-158	
1β-4-149		1β-4-159	
1β-4-150		1β-4-160	

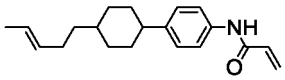
No.

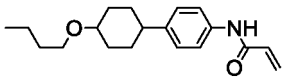
1β-4-161 

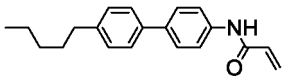
1β-4-162 

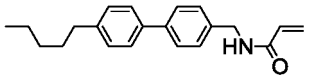
1β-4-163 

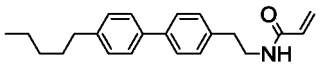
1β-4-164 

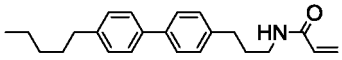
1β-4-165 

1β-4-166 

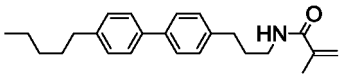
1β-4-167 

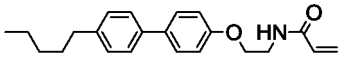
1β-4-168 

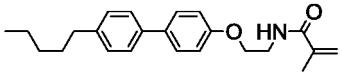
1β-4-169 

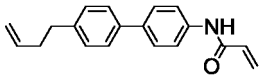
1β-4-170 

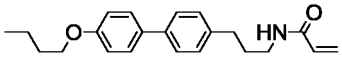
No.

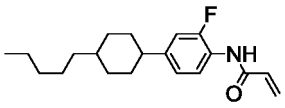
1β-4-171 

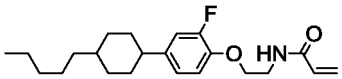
1β-4-172 

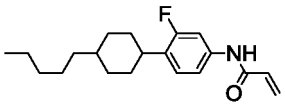
1β-4-173 

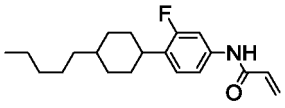
1β-4-174 

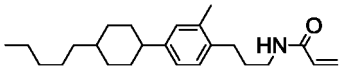
1β-4-175 

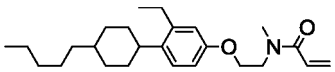
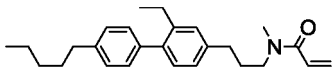
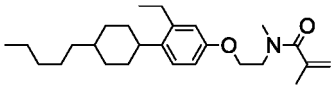
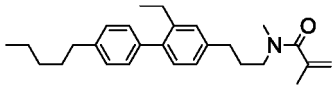
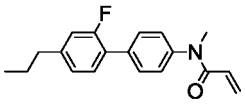
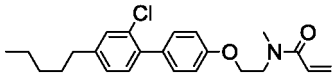
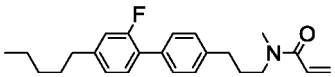
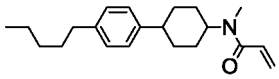
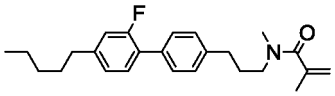
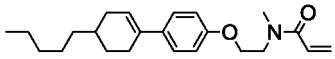
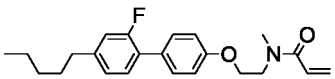
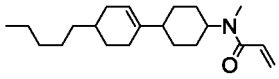
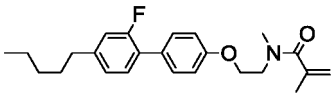
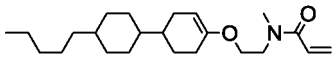
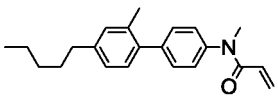
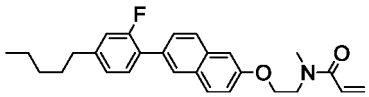
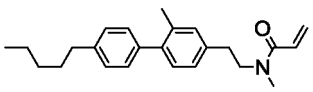
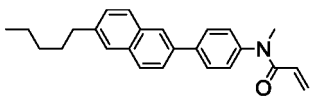
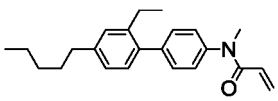
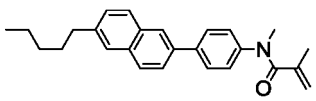
1β-4-176 

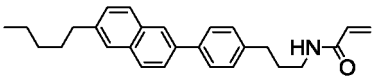
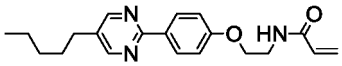
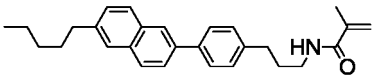
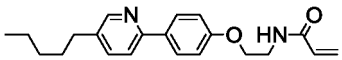
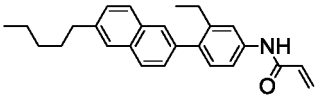
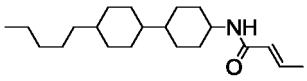
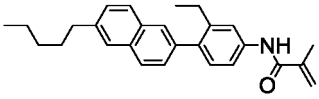
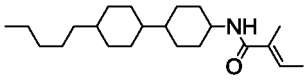
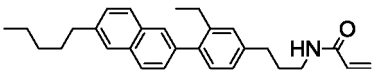
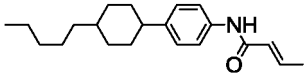
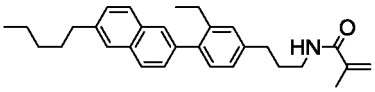
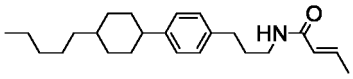
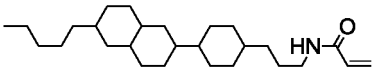
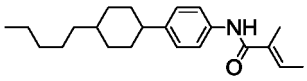
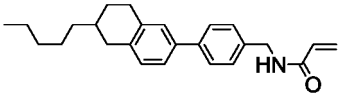
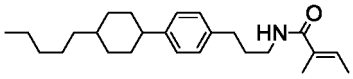
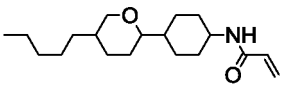
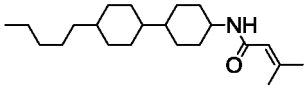
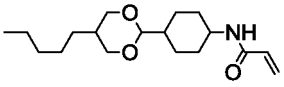
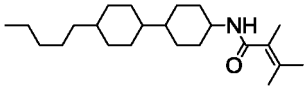
1β-4-177 

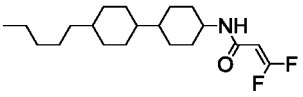
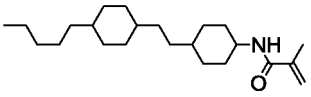
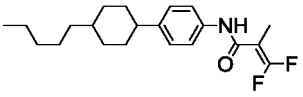
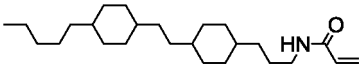
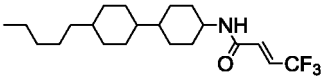
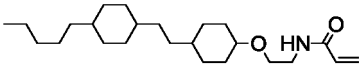
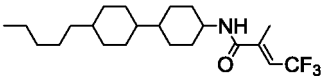
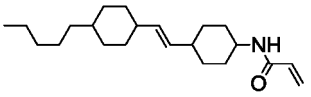
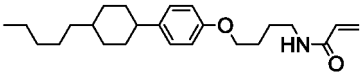
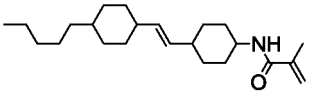
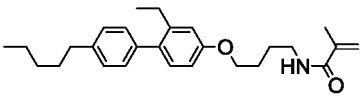
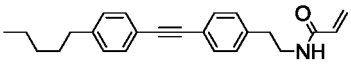
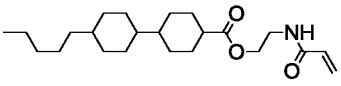
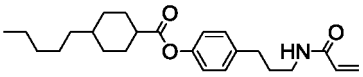
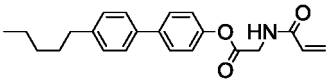
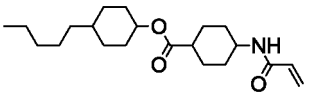
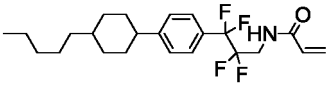
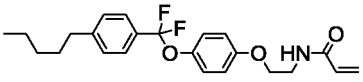
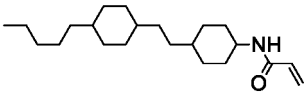
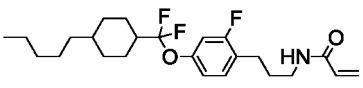
1β-4-178 

1β-4-179 

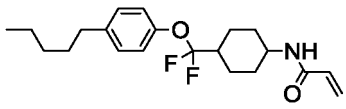
1β-4-180 

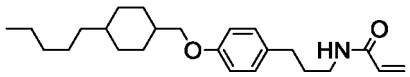
No.		No.	
1β-4-181		1β-4-191	
1β-4-182		1β-4-192	
1β-4-183		1β-4-193	
1β-4-184		1β-4-194	
1β-4-185		1β-4-195	
1β-4-186		1β-4-196	
1β-4-187		1β-4-197	
1β-4-188		1β-4-198	
1β-4-189		1β-4-199	
1β-4-190		1β-4-200	

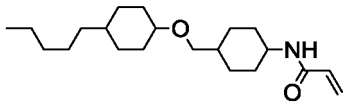
No.		No.	
1β-4-201		1β-4-211	
1β-4-202		1β-4-212	
1β-4-203		1β-4-213	
1β-4-204		1β-4-214	
1β-4-205		1β-4-215	
1β-4-206		1β-4-216	
1β-4-207		1β-4-217	
1β-4-208		1β-4-218	
1β-4-209		1β-4-219	
1β-4-210		1β-4-220	

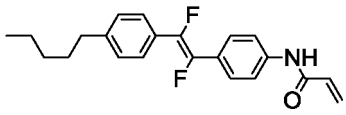
No.		No.	
1β-4-221		1β-4-231	
1β-4-222		1β-4-232	
1β-4-223		1β-4-233	
1β-4-224		1β-4-234	
1β-4-225		1β-4-235	
1β-4-226		1β-4-236	
1β-4-227		1β-4-237	
1β-4-228		1β-4-238	
1β-4-229		1β-4-239	
1β-4-230		1β-4-240	

No.

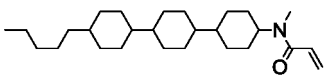
1β-4-241 

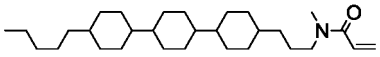
1β-4-242 

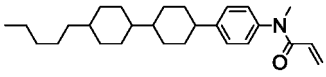
1β-4-243 

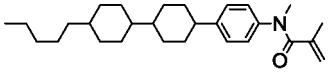
1β-4-244 

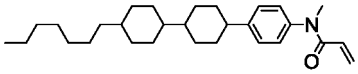
No.

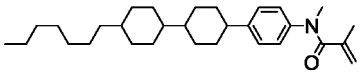
1β-5-1 

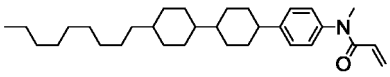
1β-5-2 

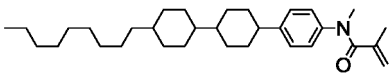
1β-5-3 

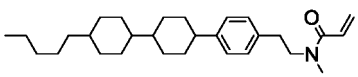
1β-5-4 

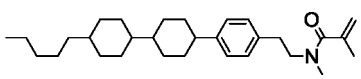
1β-5-5 

1β-5-6 

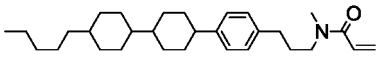
1β-5-7 

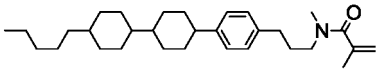
1β-5-8 

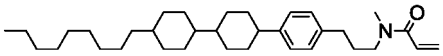
1β-5-9 

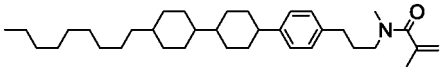
1β-5-10 

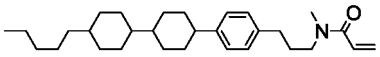
No.

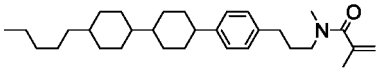
1β-5-11 

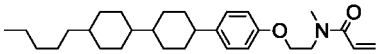
1β-5-12 

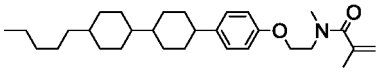
1β-5-13 

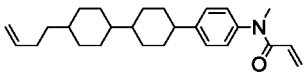
1β-5-14 

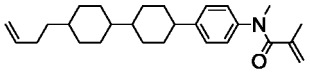
1β-5-15 

1β-5-16 

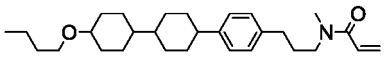
1β-5-17 

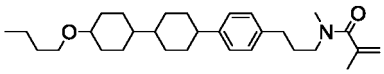
1β-5-18 

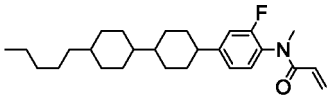
1β-5-19 

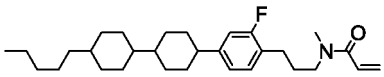
1β-5-20 

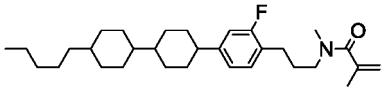
No.

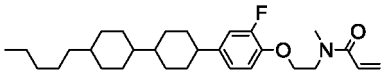
1β-5-21 

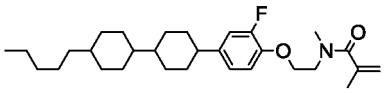
1β-5-22 

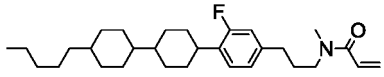
1β-5-23 

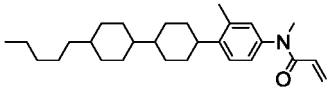
1β-5-24 

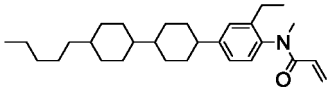
1β-5-25 

1β-5-26 

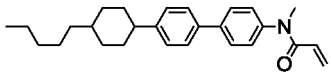
1β-5-27 

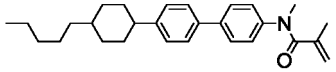
1β-5-28 

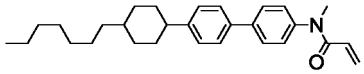
1β-5-29 

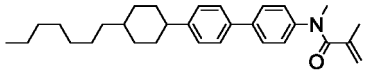
1β-5-30 

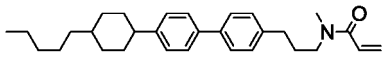
No.

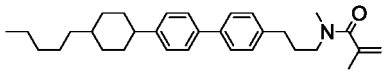
1β-5-31 

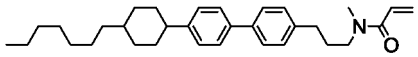
1β-5-32 

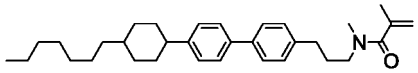
1β-5-33 

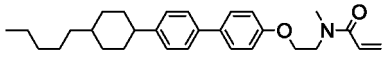
1β-5-34 

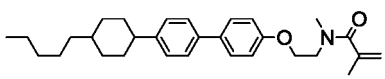
1β-5-35 

1β-5-36 

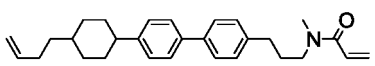
1β-5-37 

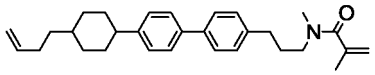
1β-5-38 

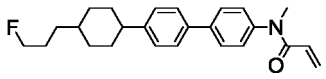
1β-5-39 

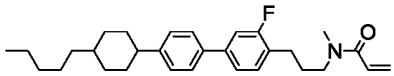
1β-5-40 

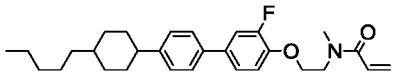
No.

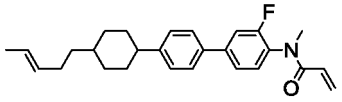
1β-5-41 

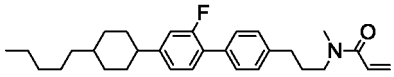
1β-5-42 

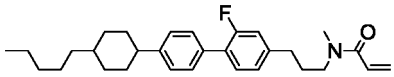
1β-5-43 

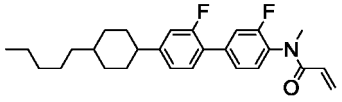
1β-5-44 

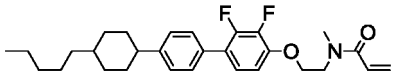
1β-5-45 

1β-5-46 

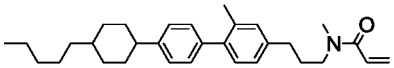
1β-5-47 

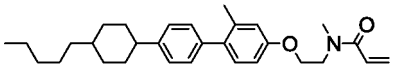
1β-5-48 

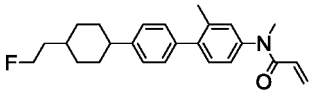
1β-5-49 

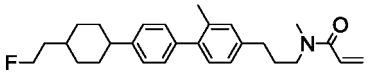
1β-5-50 

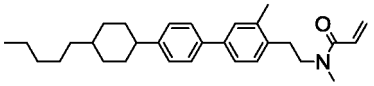
No.

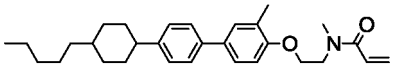
1β-5-51 

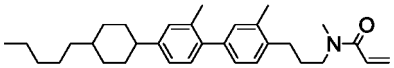
1β-5-52 

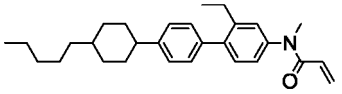
1β-5-53 

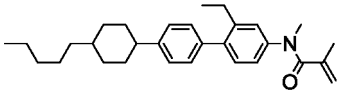
1β-5-54 

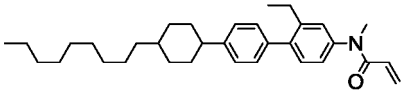
1β-5-55 

1β-5-56 

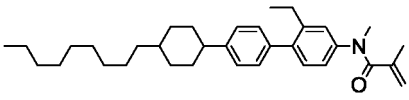
1β-5-57 

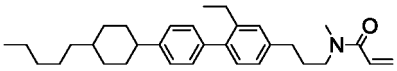
1β-5-58 

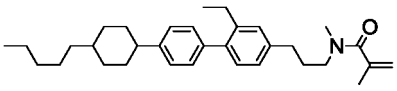
1β-5-59 

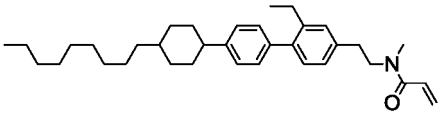
1β-5-60 

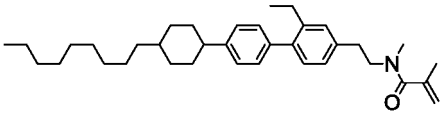
No.

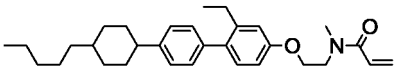
1β-5-61 

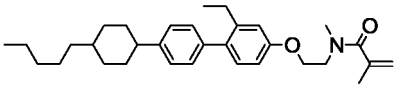
1β-5-62 

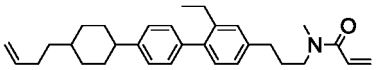
1β-5-63 

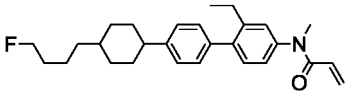
1β-5-64 

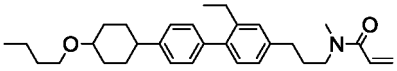
1β-5-65 

1β-5-66 

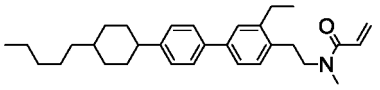
1β-5-67 

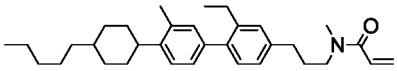
1β-5-68 

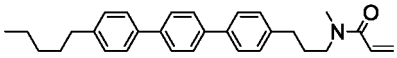
1β-5-69 

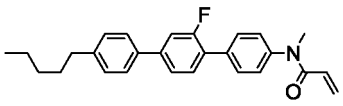
1β-5-70 

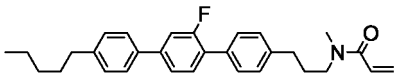
No.

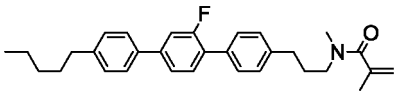
1β-5-71 

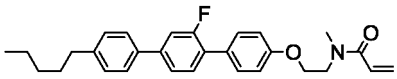
1β-5-72 

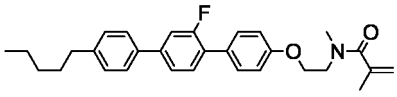
1β-5-73 

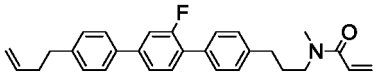
1β-5-74 

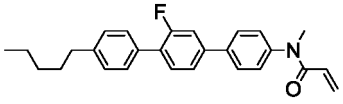
1β-5-75 

1β-5-76 

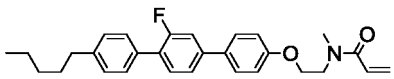
1β-5-77 

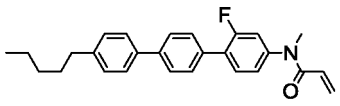
1β-5-78 

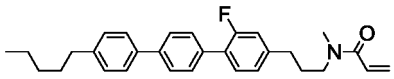
1β-5-79 

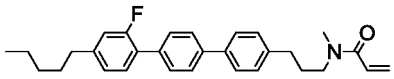
1β-5-80 

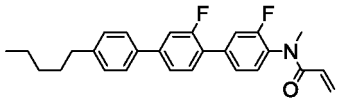
No.

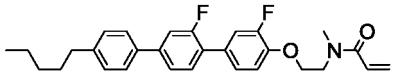
1β-5-81 

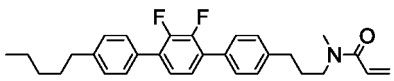
1β-5-82 

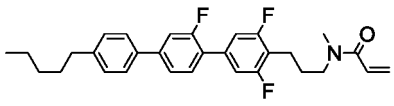
1β-5-83 

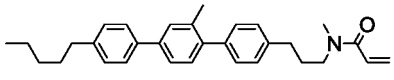
1β-5-84 

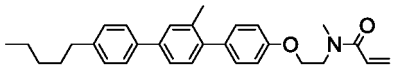
1β-5-85 

1β-5-86 

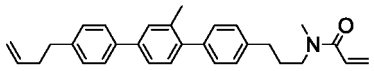
1β-5-87 

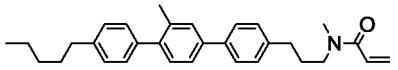
1β-5-88 

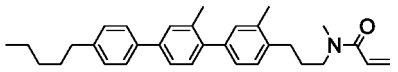
1β-5-89 

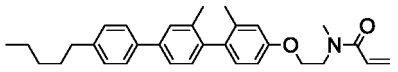
1β-5-90 

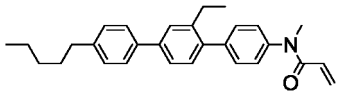
No.

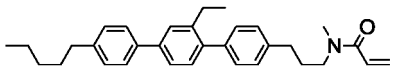
1β-5-91 

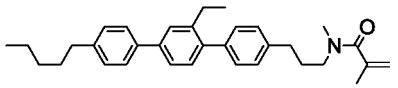
1β-5-92 

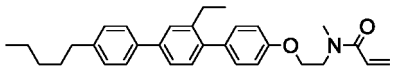
1β-5-93 

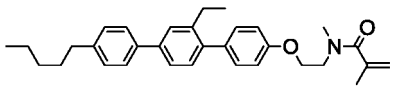
1β-5-94 

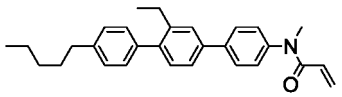
1β-5-95 

1β-5-96 

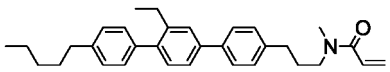
1β-5-97 

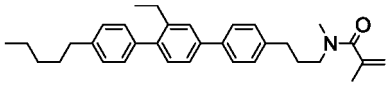
1β-5-98 

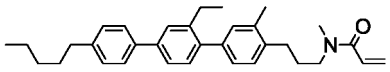
1β-5-99 

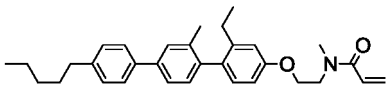
1β-5-100 

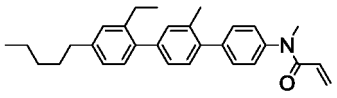
No.

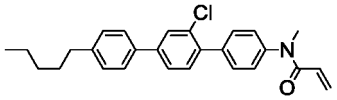
1β-5-101 

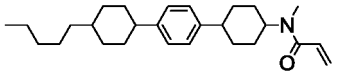
1β-5-102 

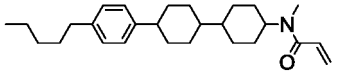
1β-5-103 

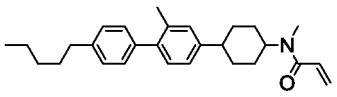
1β-5-104 

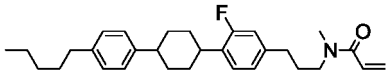
1β-5-105 

1β-5-106 

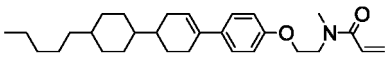
1β-5-107 

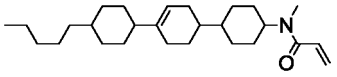
1β-5-108 

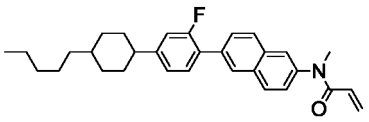
1β-5-109 

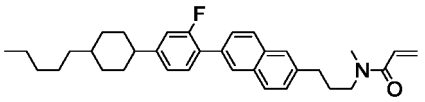
1β-5-110 

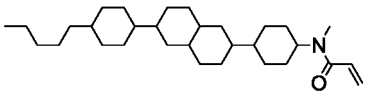
No.

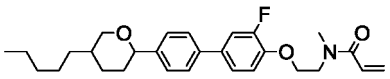
1β-5-111 

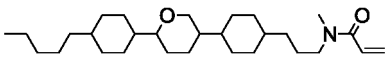
1β-5-112 

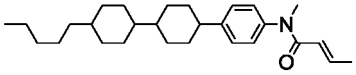
1β-5-113 

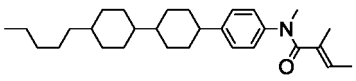
1β-5-114 

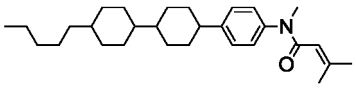
1β-5-115 

1β-5-116 

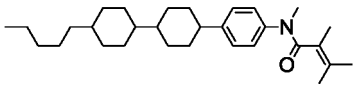
1β-5-117 

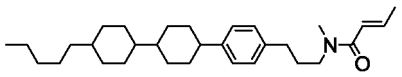
1β-5-118 

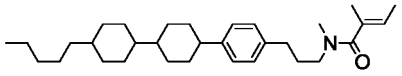
1β-5-119 

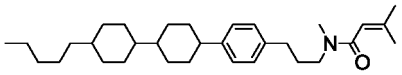
1β-5-120 

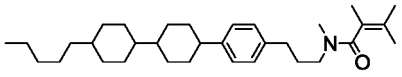
No.

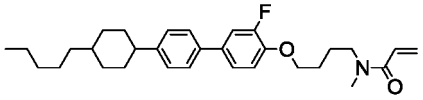
1β-5-121 

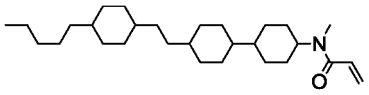
1β-5-122 

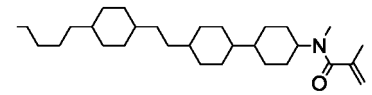
1β-5-123 

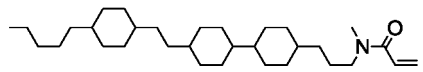
1β-5-124 

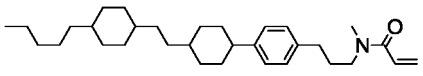
1β-5-125 

1β-5-126 

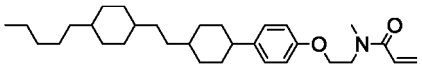
1β-5-127 

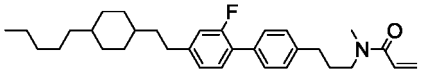
1β-5-128 

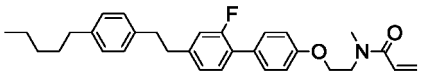
1β-5-129 

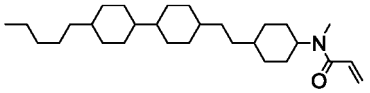
1β-5-130 

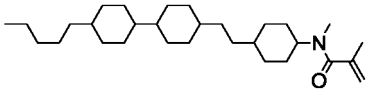
No.

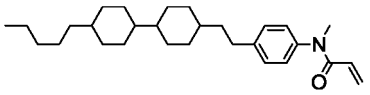
1β-5-131 

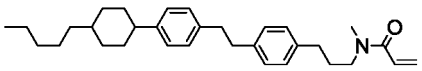
1β-5-132 

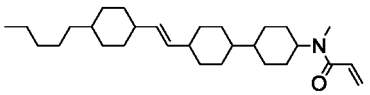
1β-5-133 

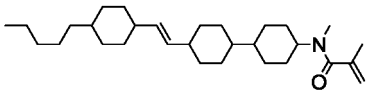
1β-5-134 

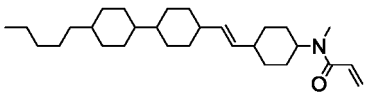
1β-5-135 

1β-5-136 

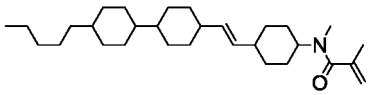
1β-5-137 

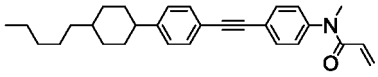
1β-5-138 

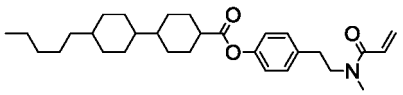
1β-5-139 

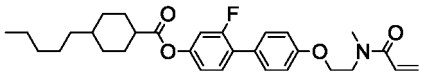
1β-5-140 

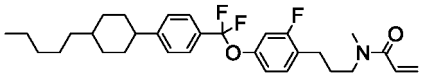
No.

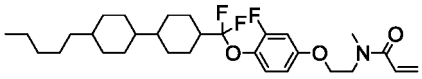
1β-5-141 

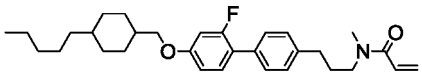
1β-5-142 

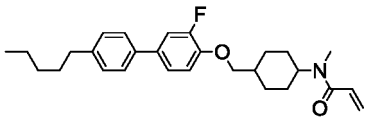
1β-5-143 

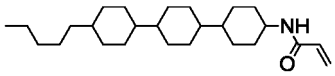
1β-5-144 

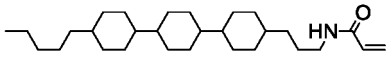
1β-5-145 

1β-5-146 

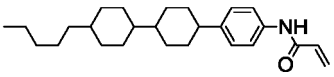
1β-5-147 

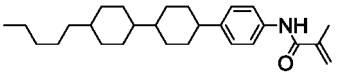
1β-5-148 

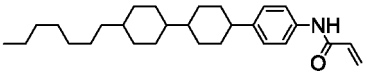
1β-5-149 

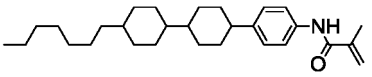
1β-5-150 

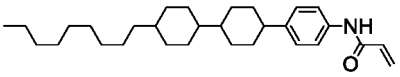
No.

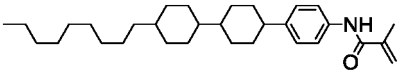
1β-5-151 

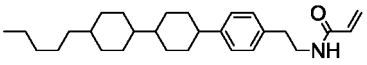
1β-5-152 

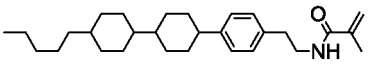
1β-5-153 

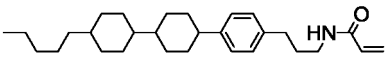
1β-5-154 

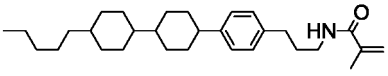
1β-5-155 

1β-5-156 

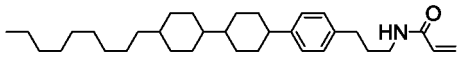
1β-5-157 

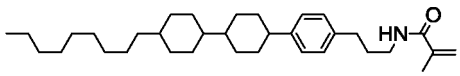
1β-5-158 

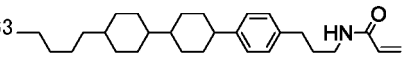
1β-5-159 

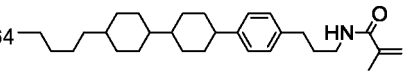
1β-5-160 

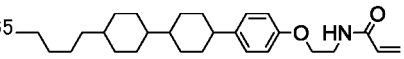
No.

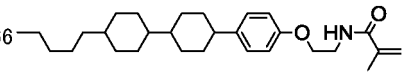
1β-5-161 

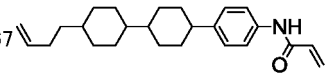
1β-5-162 

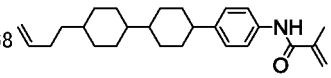
1β-5-163 

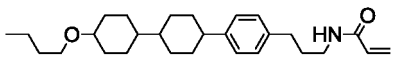
1β-5-164 

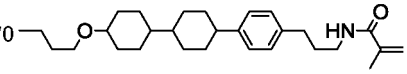
1β-5-165 

1β-5-166 

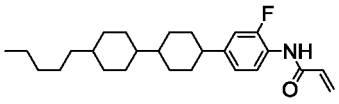
1β-5-167 

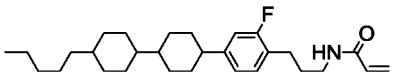
1β-5-168 

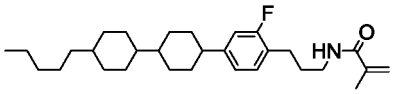
1β-5-169 

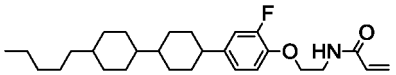
1β-5-170 

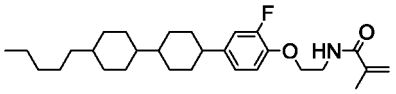
No.

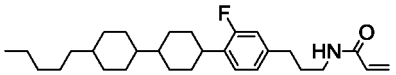
1β-5-171 

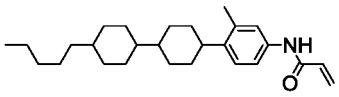
1β-5-172 

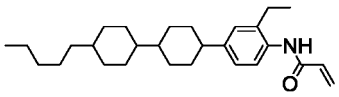
1β-5-173 

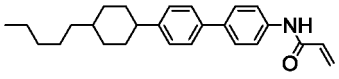
1β-5-174 

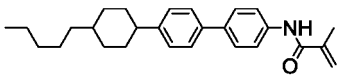
1β-5-175 

1β-5-176 

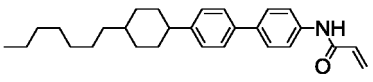
1β-5-177 

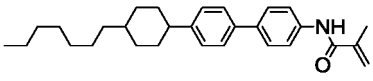
1β-5-178 

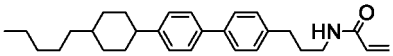
1β-5-179 

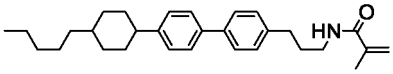
1β-5-180 

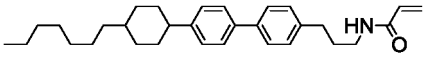
No.

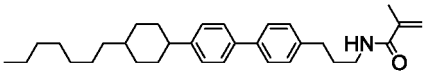
1β-5-181 

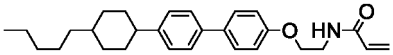
1β-5-182 

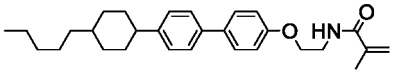
1β-5-183 

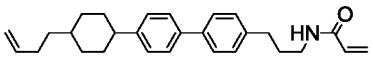
1β-5-184 

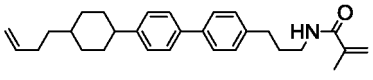
1β-5-185 

1β-5-186 

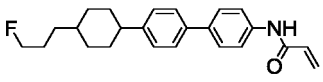
1β-5-187 

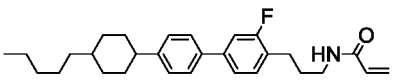
1β-5-188 

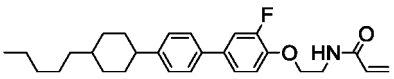
1β-5-189 

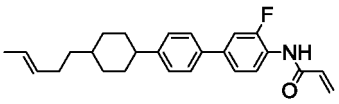
1β-5-190 

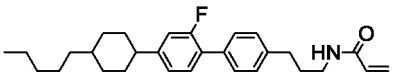
No.

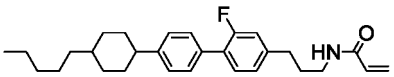
1β-5-191 

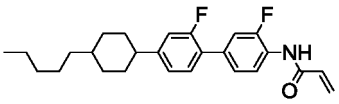
1β-5-192 

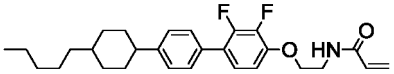
1β-5-193 

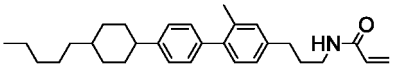
1β-5-194 

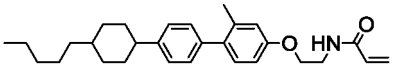
1β-5-195 

1β-5-196 

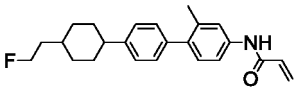
1β-5-197 

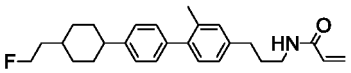
1β-5-198 

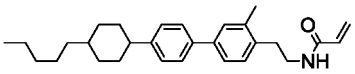
1β-5-199 

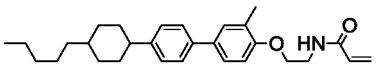
1β-5-200 

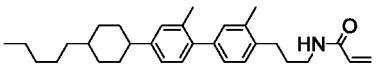
No.

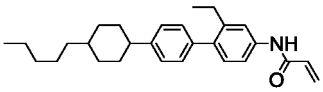
1β-5-201 

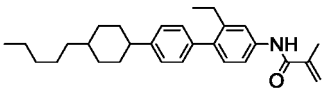
1β-5-202 

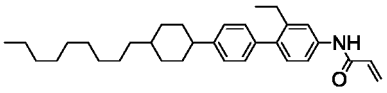
1β-5-203 

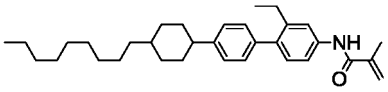
1β-5-204 

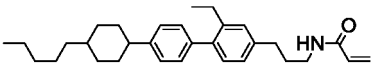
1β-5-205 

1β-5-206 

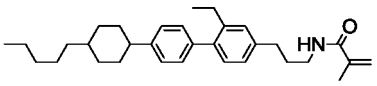
1β-5-207 

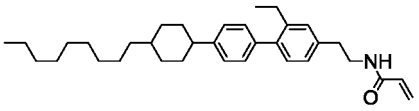
1β-5-208 

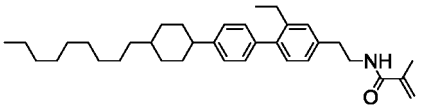
1β-5-209 

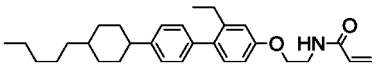
1β-5-210 

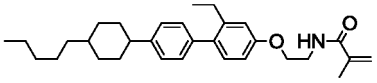
No.

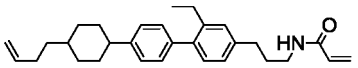
1β-5-211 

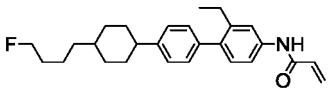
1β-5-212 

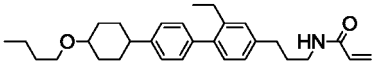
1β-5-213 

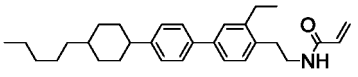
1β-5-214 

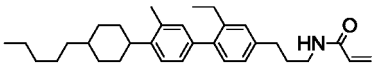
1β-5-215 

1β-5-216 

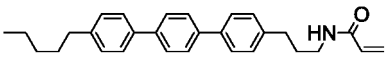
1β-5-217 

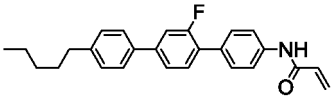
1β-5-218 

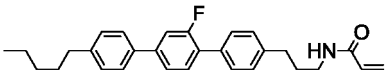
1β-5-219 

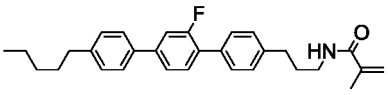
1β-5-220 

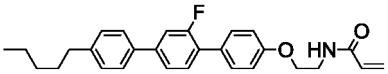
No.

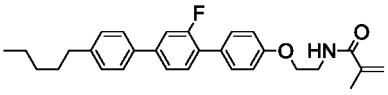
1β-5-221 

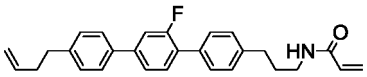
1β-5-222 

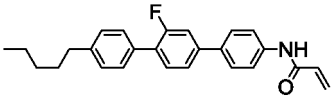
1β-5-223 

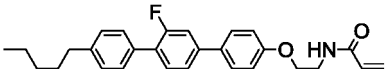
1β-5-224 

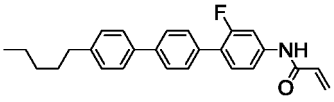
1β-5-225 

1β-5-226 

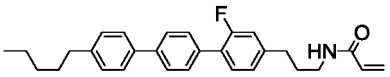
1β-5-227 

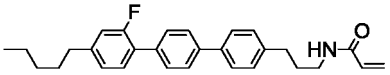
1β-5-228 

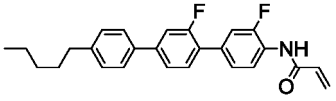
1β-5-229 

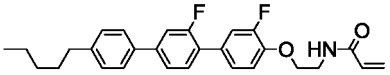
1β-5-230 

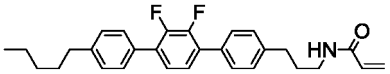
No.

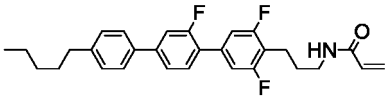
1β-5-231 

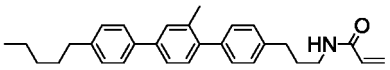
1β-5-232 

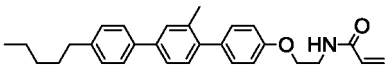
1β-5-233 

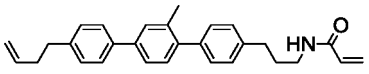
1β-5-234 

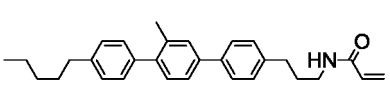
1β-5-235 

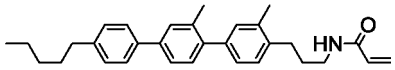
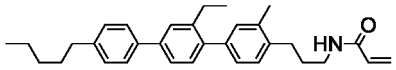
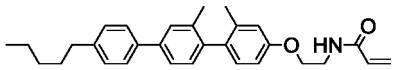
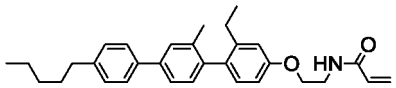
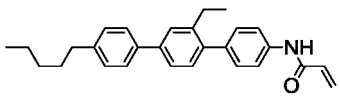
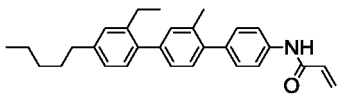
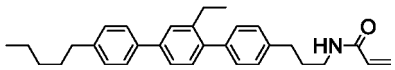
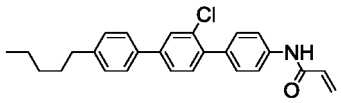
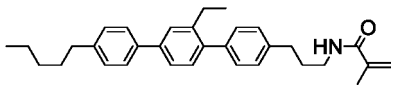
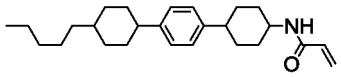
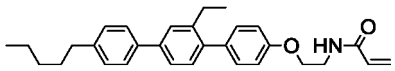
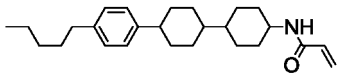
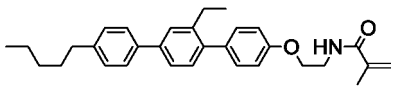
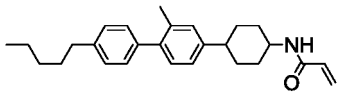
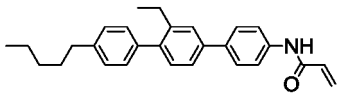
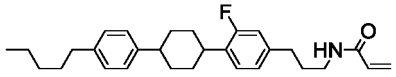
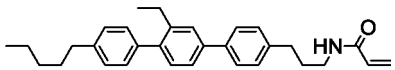
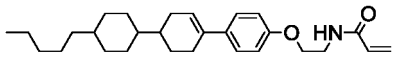
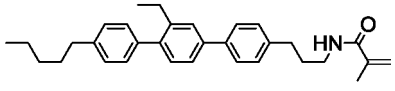
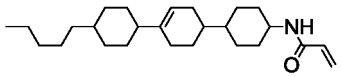
1β-5-236 

1β-5-237 

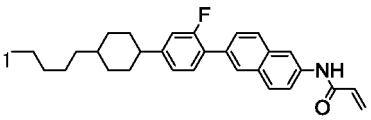
1β-5-238 

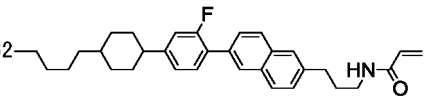
1β-5-239 

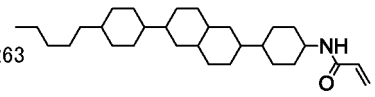
1β-5-240 

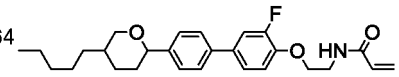
No.		No.	
1β-5-241		1β-5-251	
1β-5-242		1β-5-252	
1β-5-243		1β-5-253	
1β-5-244		1β-5-254	
1β-5-245		1β-5-255	
1β-5-246		1β-5-256	
1β-5-247		1β-5-257	
1β-5-248		1β-5-258	
1β-5-249		1β-5-259	
1β-5-250		1β-5-260	

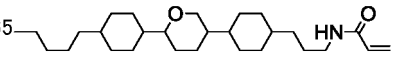
No.

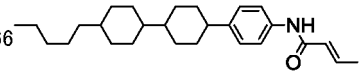
1β-5-261 

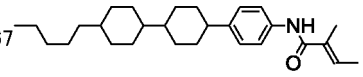
1β-5-262 

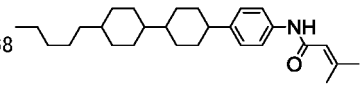
1β-5-263 

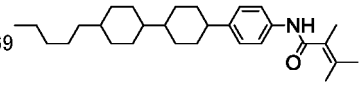
1β-5-264 

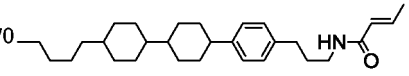
1β-5-265 

1β-5-266 

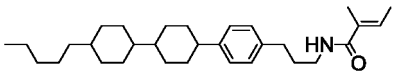
1β-5-267 

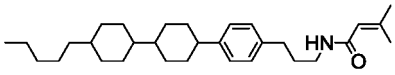
1β-5-268 

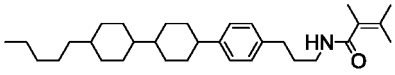
1β-5-269 

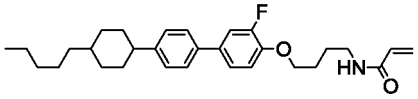
1β-5-270 

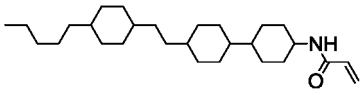
No.

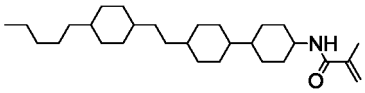
1β-5-271 

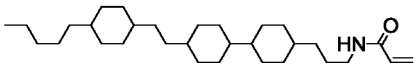
1β-5-272 

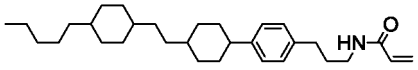
1β-5-273 

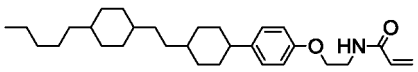
1β-5-274 

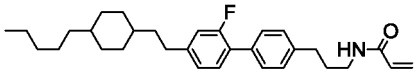
1β-5-275 

1β-5-276 

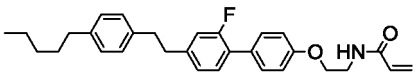
1β-5-277 

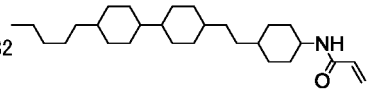
1β-5-278 

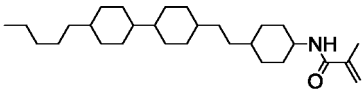
1β-5-279 

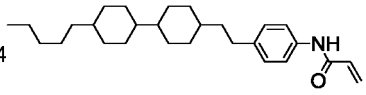
1β-5-280 

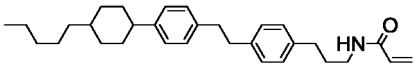
No.

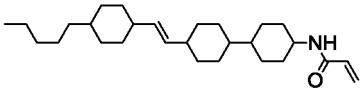
1β-5-281 

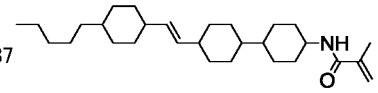
1β-5-282 

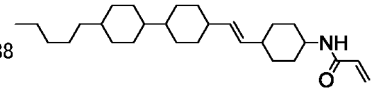
1β-5-283 

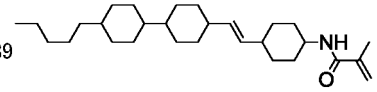
1β-5-284 

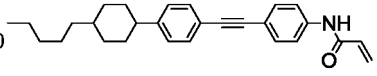
1β-5-285 

1β-5-286 

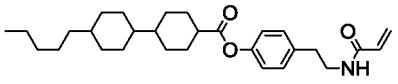
1β-5-287 

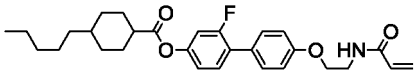
1β-5-288 

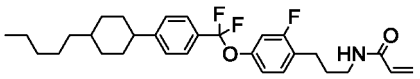
1β-5-289 

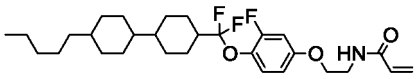
1β-5-290 

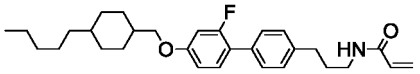
No.

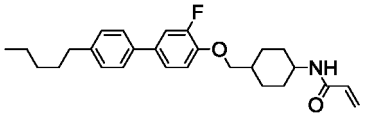
1β-5-291 

1β-5-292 

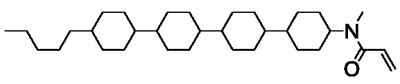
1β-5-293 

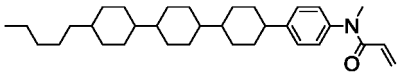
1β-5-294 

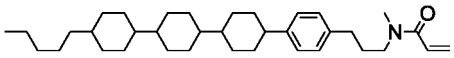
1β-5-295 

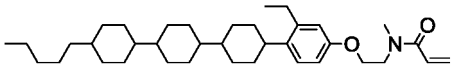
1β-5-296 

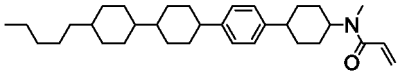
No.

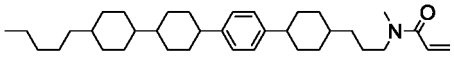
1β-6-1 

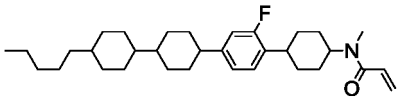
1β-6-2 

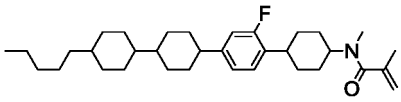
1β-6-3 

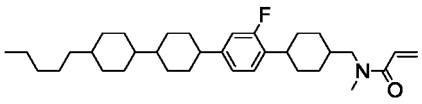
1β-6-4 

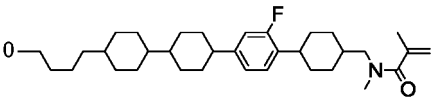
1β-6-5 

1β-6-6 

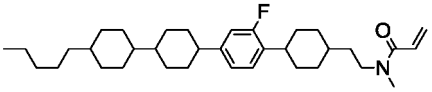
1β-6-7 

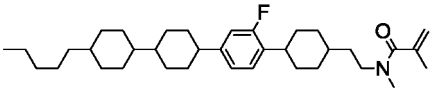
1β-6-8 

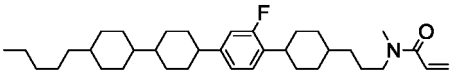
1β-6-9 

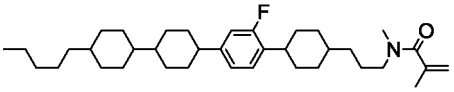
1β-6-10 

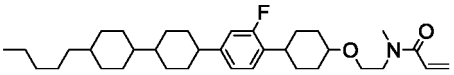
No.

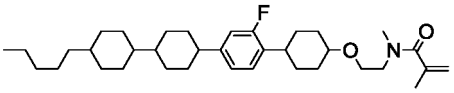
1β-6-11 

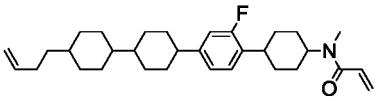
1β-6-12 

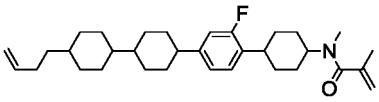
1β-6-13 

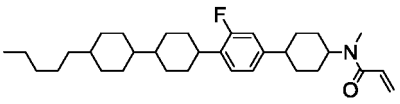
1β-6-14 

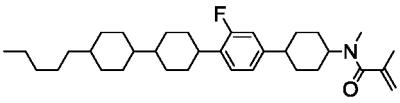
1β-6-15 

1β-6-16 

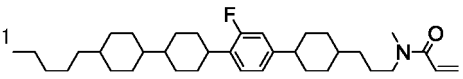
1β-6-17 

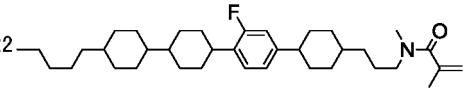
1β-6-18 

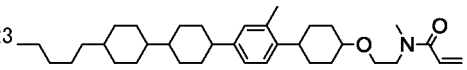
1β-6-19 

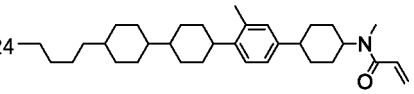
1β-6-20 

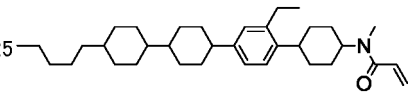
No.

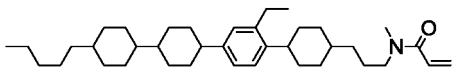
1β-6-21 

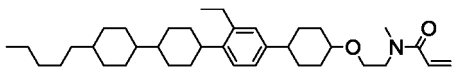
1β-6-22 

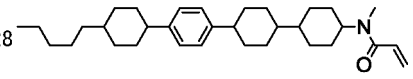
1β-6-23 

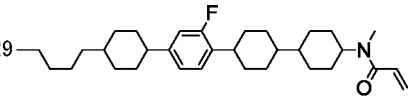
1β-6-24 

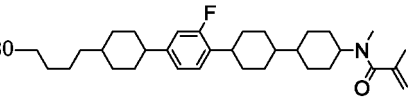
1β-6-25 

1β-6-26 

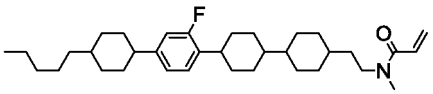
1β-6-27 

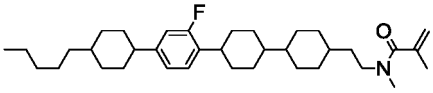
1β-6-28 

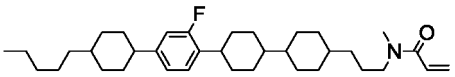
1β-6-29 

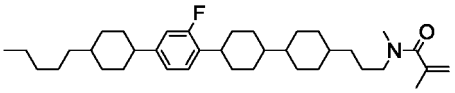
1β-6-30 

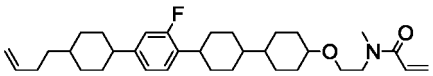
No.

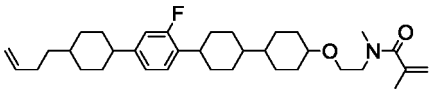
1β-6-31 

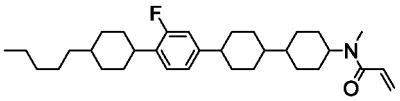
1β-6-32 

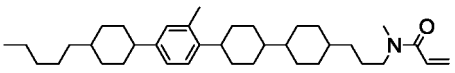
1β-6-33 

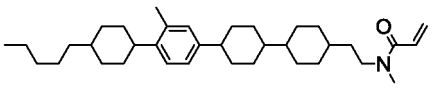
1β-6-34 

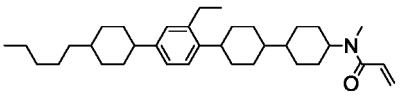
1β-6-35 

1β-6-36 

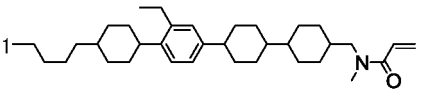
1β-6-37 

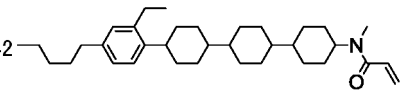
1β-6-38 

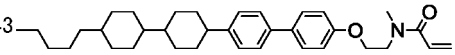
1β-6-39 

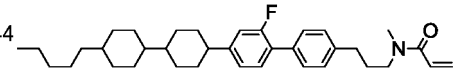
1β-6-40 

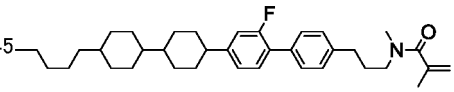
No.

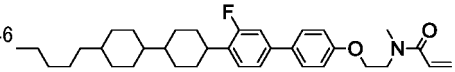
1β-6-41 

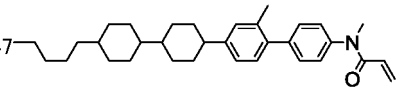
1β-6-42 

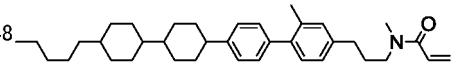
1β-6-43 

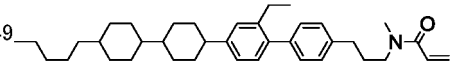
1β-6-44 

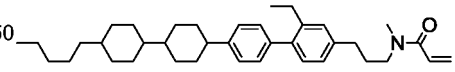
1β-6-45 

1β-6-46 

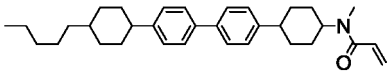
1β-6-47 

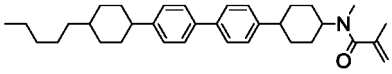
1β-6-48 

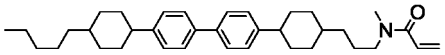
1β-6-49 

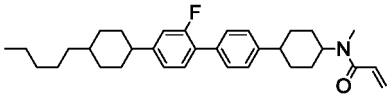
1β-6-50 

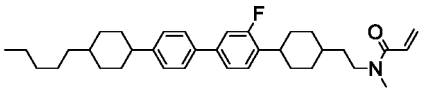
No.

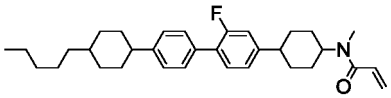
1β-6-51 

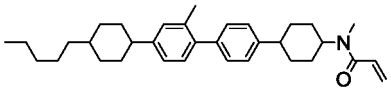
1β-6-52 

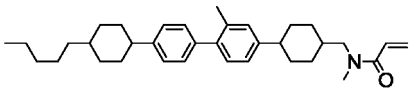
1β-6-53 

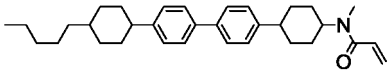
1β-6-54 

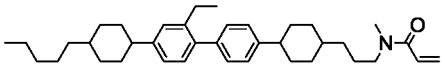
1β-6-55 

1β-6-56 

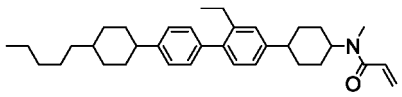
1β-6-57 

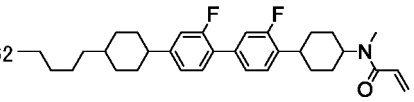
1β-6-58 

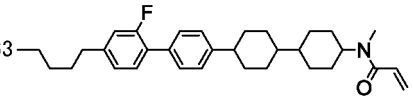
1β-6-59 

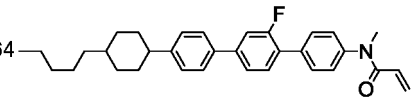
1β-6-60 

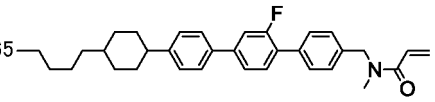
No.

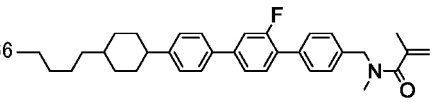
1β-6-61 

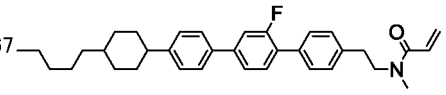
1β-6-62 

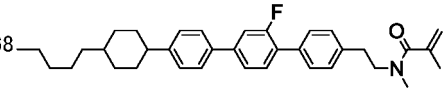
1β-6-63 

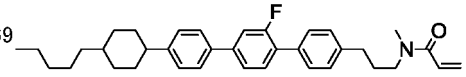
1β-6-64 

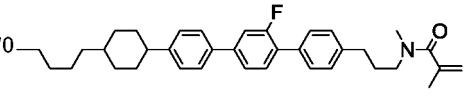
1β-6-65 

1β-6-66 

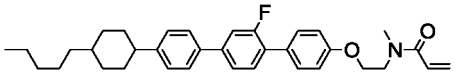
1β-6-67 

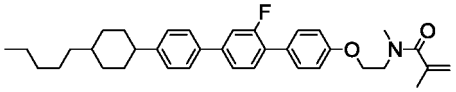
1β-6-68 

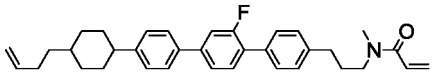
1β-6-69 

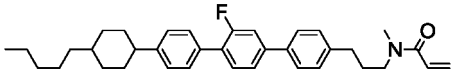
1β-6-70 

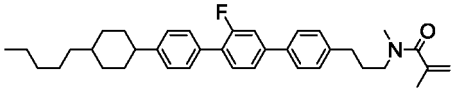
No.

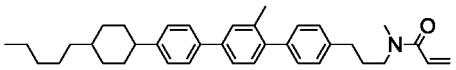
1β-6-71 

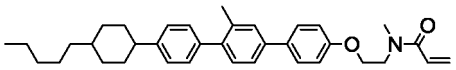
1β-6-72 

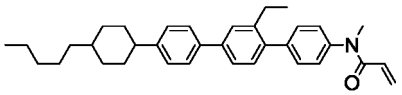
1β-6-73 

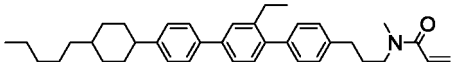
1β-6-74 

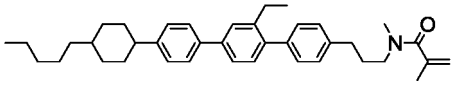
1β-6-75 

1β-6-76 

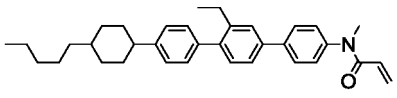
1β-6-77 

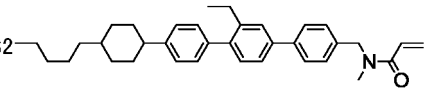
1β-6-78 

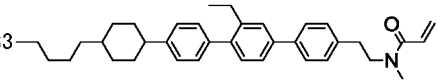
1β-6-79 

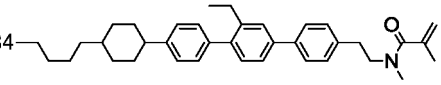
1β-6-80 

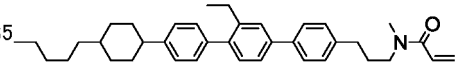
No.

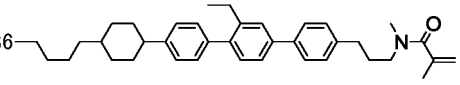
1β-6-81 

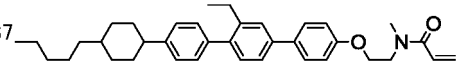
1β-6-82 

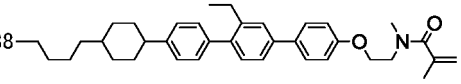
1β-6-83 

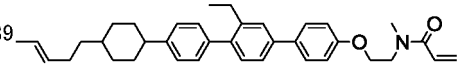
1β-6-84 

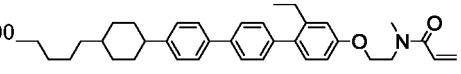
1β-6-85 

1β-6-86 

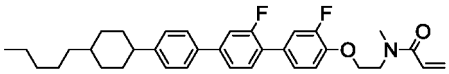
1β-6-87 

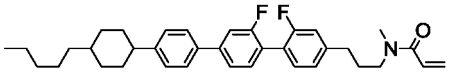
1β-6-88 

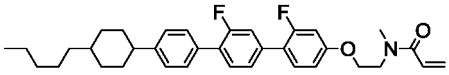
1β-6-89 

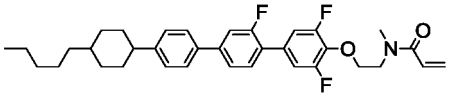
1β-6-90 

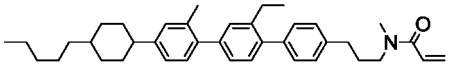
No.

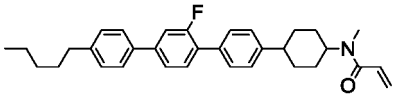
1β-6-91 

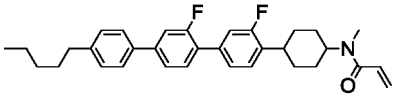
1β-6-92 

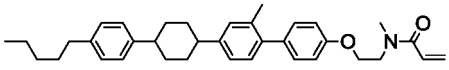
1β-6-93 

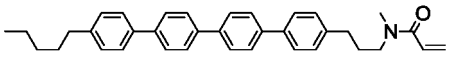
1β-6-94 

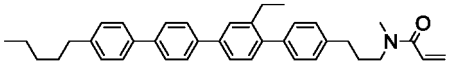
1β-6-95 

1β-6-96 

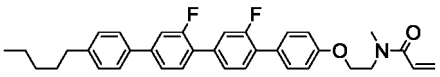
1β-6-97 

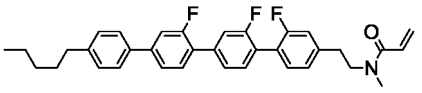
1β-6-98 

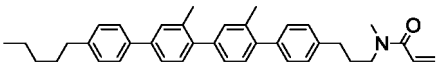
1β-6-99 

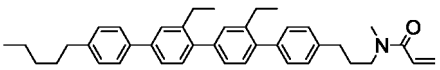
1β-6-100 

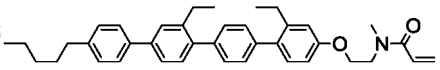
No.

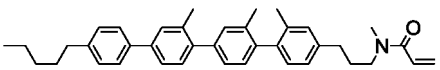
1β-6-101 

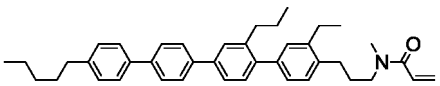
1β-6-102 

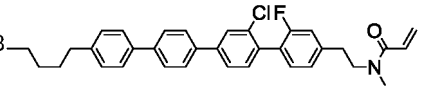
1β-6-103 

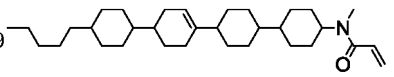
1β-6-104 

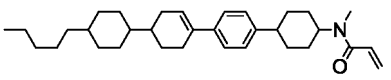
1β-6-105 

1β-6-106 

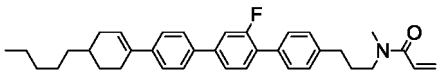
1β-6-107 

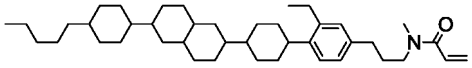
1β-6-108 

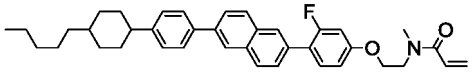
1β-6-109 

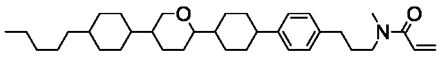
1β-6-110 

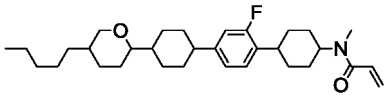
No.

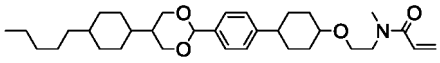
1β-6-111 

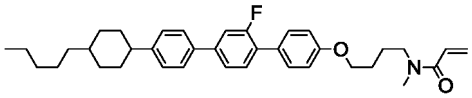
1β-6-112 

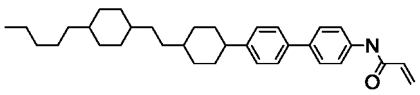
1β-6-113 

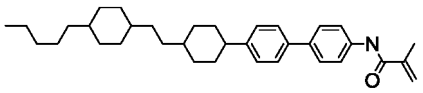
1β-6-114 

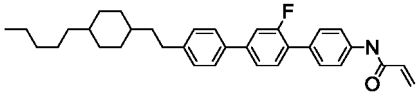
1β-6-115 

1β-6-116 

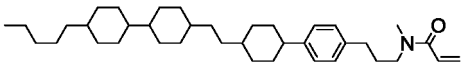
1β-6-117 

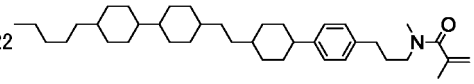
1β-6-118 

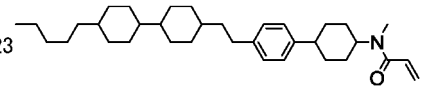
1β-6-119 

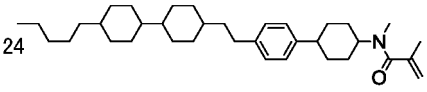
1β-6-120 

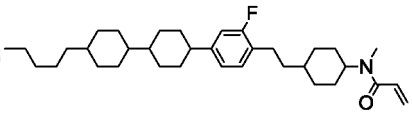
No.

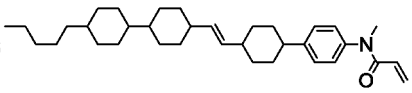
1β-6-121 

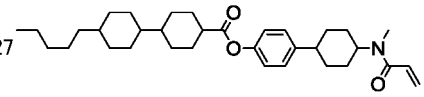
1β-6-122 

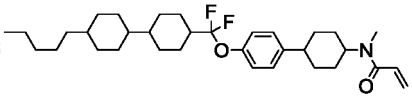
1β-6-123 

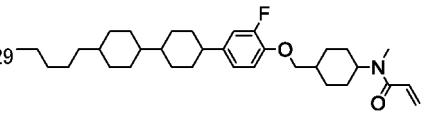
1β-6-124 

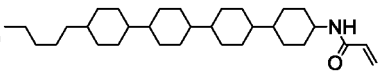
1β-6-125 

1β-6-126 

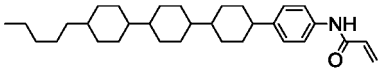
1β-6-127 

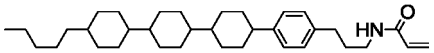
1β-6-128 

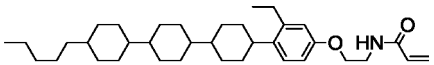
1β-6-129 

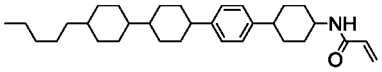
1β-6-130 

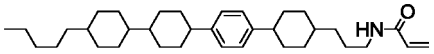
No.

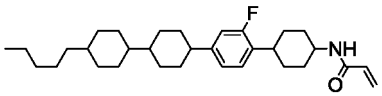
1β-6-131 

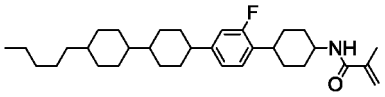
1β-6-132 

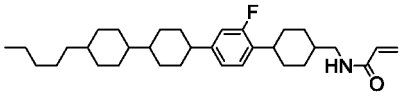
1β-6-133 

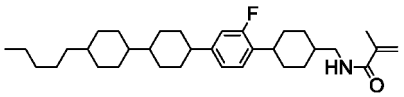
1β-6-134 

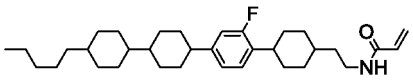
1β-6-135 

1β-6-136 

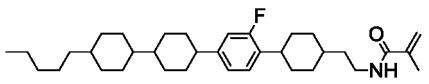
1β-6-137 

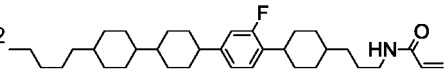
1β-6-138 

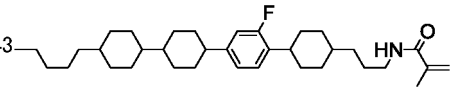
1β-6-139 

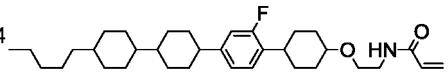
1β-6-140 

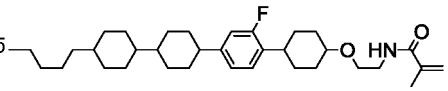
No.

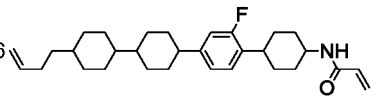
1β-6-141 

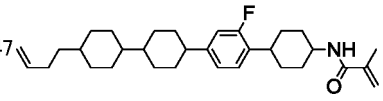
1β-6-142 

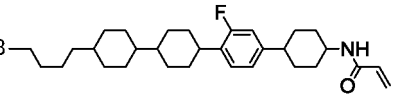
1β-6-143 

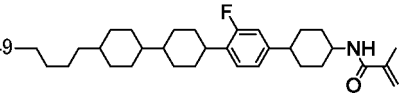
1β-6-144 

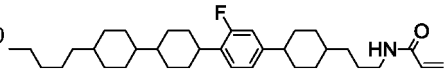
1β-6-145 

1β-6-146 

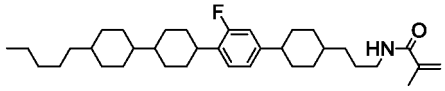
1β-6-147 

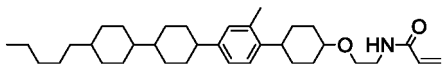
1β-6-148 

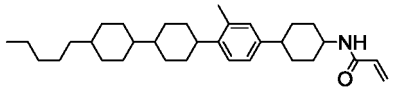
1β-6-149 

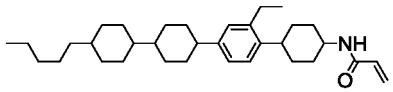
1β-6-150 

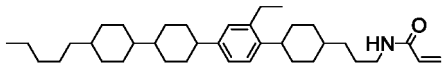
No.

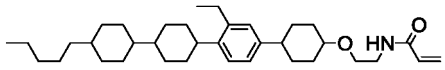
1β-6-151 

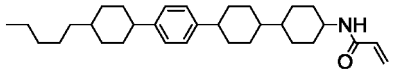
1β-6-152 

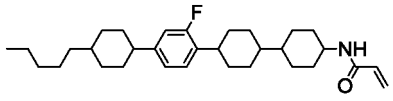
1β-6-153 

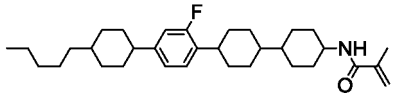
1β-6-154 

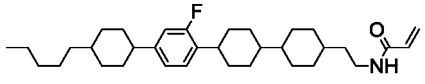
1β-6-155 

1β-6-156 

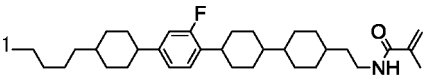
1β-6-157 

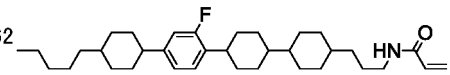
1β-6-158 

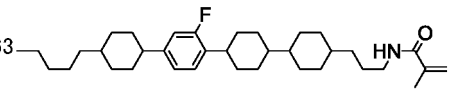
1β-6-159 

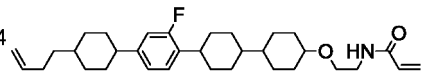
1β-6-160 

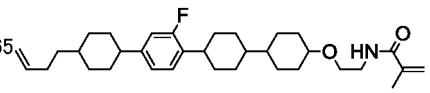
No.

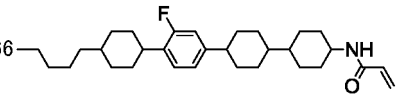
1β-6-161 

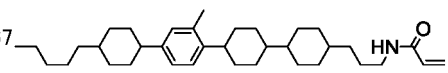
1β-6-162 

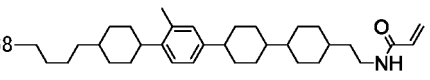
1β-6-163 

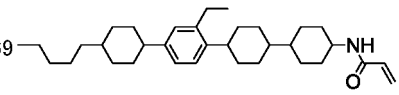
1β-6-164 

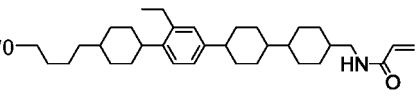
1β-6-165 

1β-6-166 

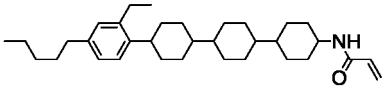
1β-6-167 

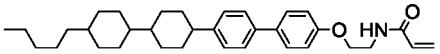
1β-6-168 

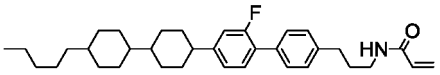
1β-6-169 

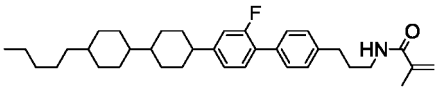
1β-6-170 

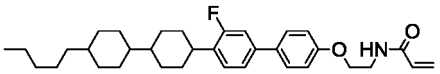
No.

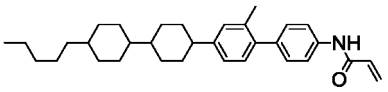
1β-6-171 

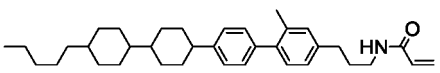
1β-6-172 

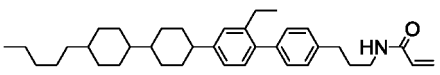
1β-6-173 

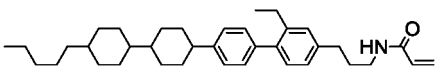
1β-6-174 

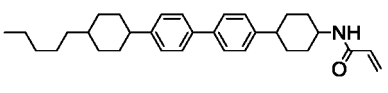
1β-6-175 

1β-6-176 

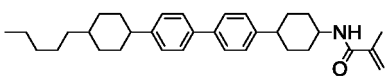
1β-6-177 

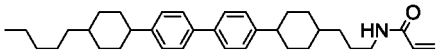
1β-6-178 

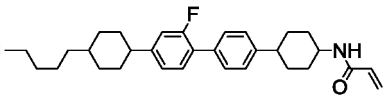
1β-6-179 

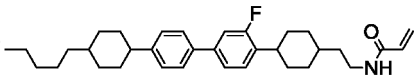
1β-6-180 

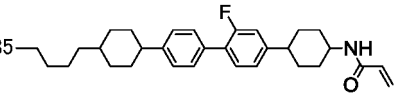
No.

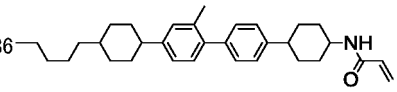
1β-6-181 

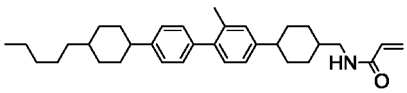
1β-6-182 

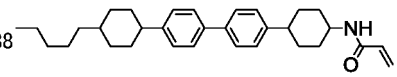
1β-6-183 

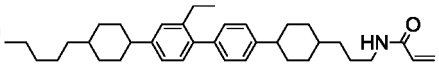
1β-6-184 

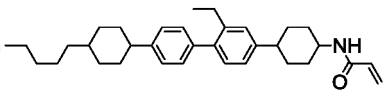
1β-6-185 

1β-6-186 

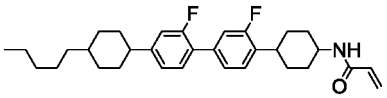
1β-6-187 

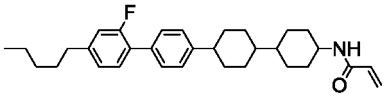
1β-6-188 

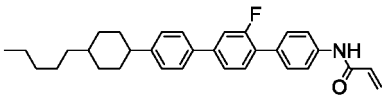
1β-6-189 

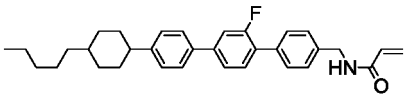
1β-6-190 

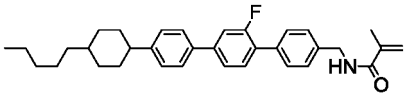
No.

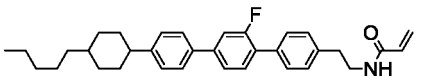
1β-6-191 

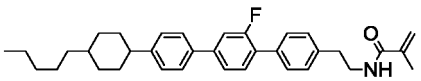
1β-6-192 

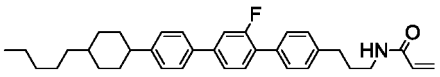
1β-6-193 

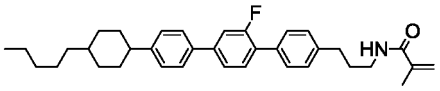
1β-6-194 

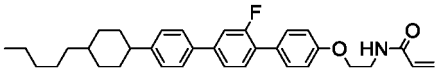
1β-6-195 

1β-6-196 

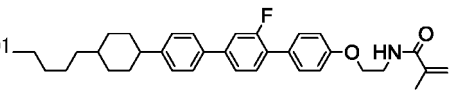
1β-6-197 

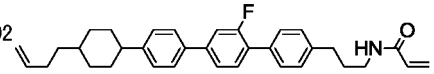
1β-6-198 

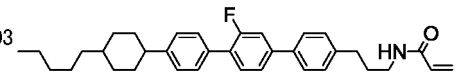
1β-6-199 

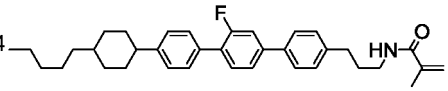
1β-6-200 

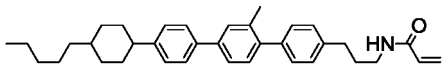
No.

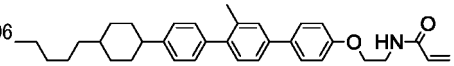
1β-6-201 

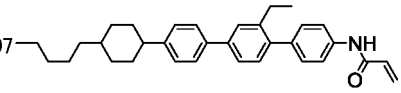
1β-6-202 

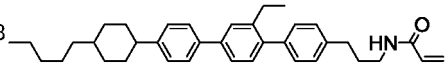
1β-6-203 

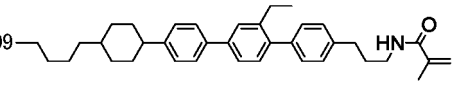
1β-6-204 

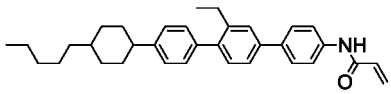
1β-6-205 

1β-6-206 

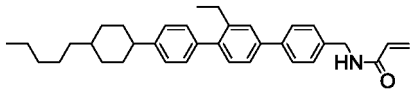
1β-6-207 

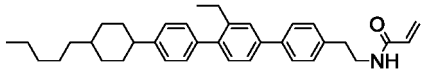
1β-6-208 

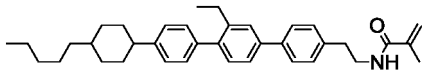
1β-6-209 

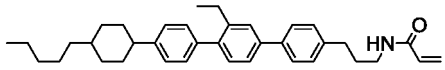
1β-6-210 

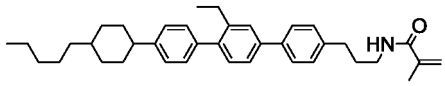
No.

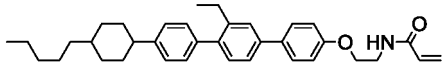
1β-6-211 

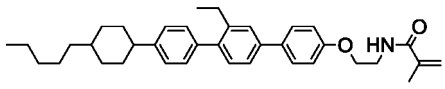
1β-6-212 

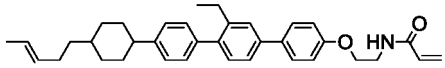
1β-6-213 

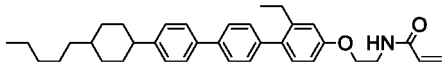
1β-6-214 

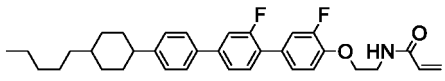
1β-6-215 

1β-6-216 

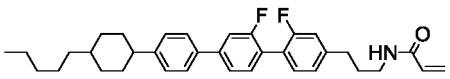
1β-6-217 

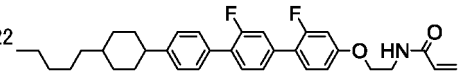
1β-6-218 

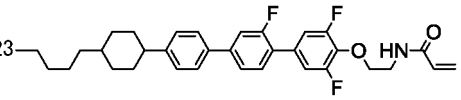
1β-6-219 

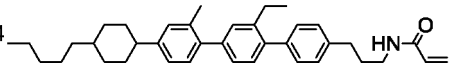
1β-6-220 

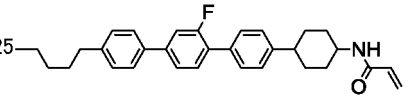
No.

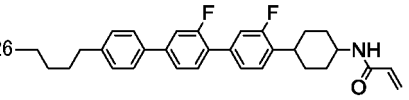
1β-6-221 

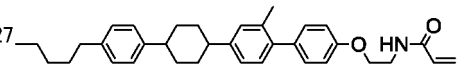
1β-6-222 

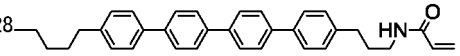
1β-6-223 

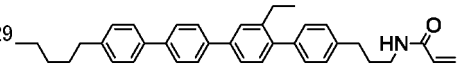
1β-6-224 

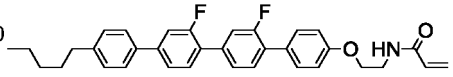
1β-6-225 

1β-6-226 

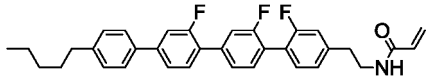
1β-6-227 

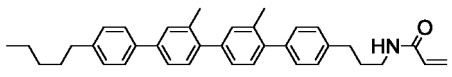
1β-6-228 

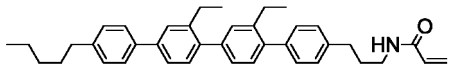
1β-6-229 

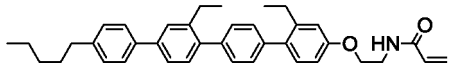
1β-6-230 

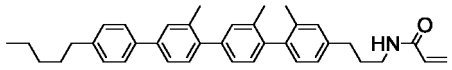
No.

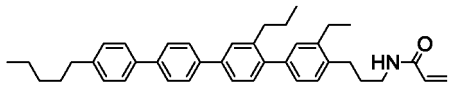
1β-6-231 

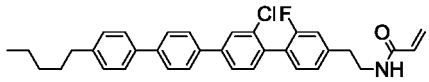
1β-6-232 

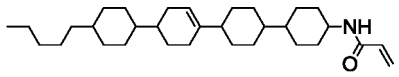
1β-6-233 

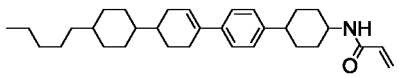
1β-6-234 

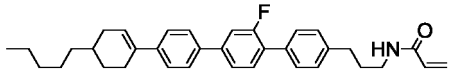
1β-6-235 

1β-6-236 

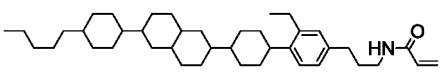
1β-6-237 

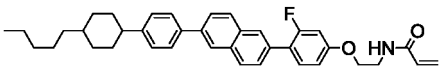
1β-6-238 

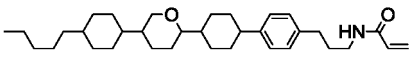
1β-6-239 

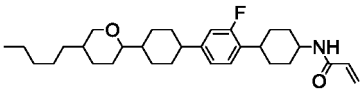
1β-6-240 

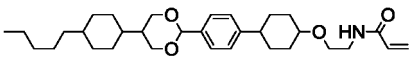
No.

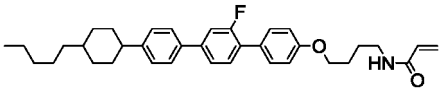
1β-6-241 

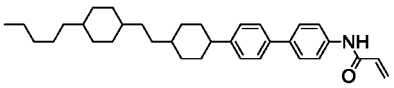
1β-6-242 

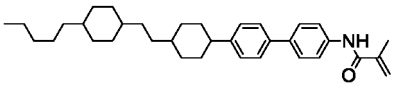
1β-6-243 

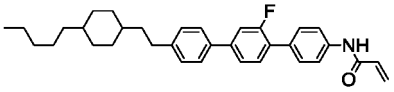
1β-6-244 

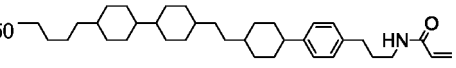
1β-6-245 

1β-6-246 

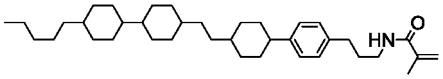
1β-6-247 

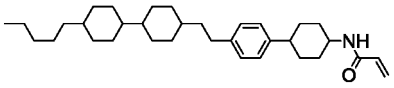
1β-6-248 

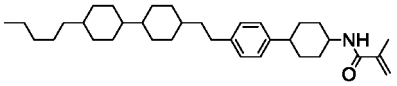
1β-6-249 

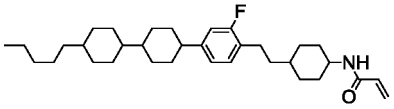
1β-6-250 

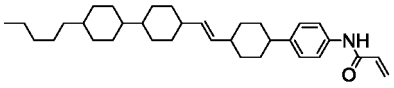
No.

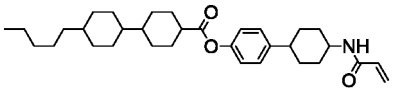
1β-6-251 

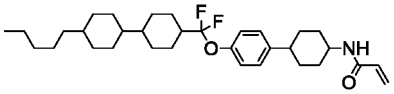
1β-6-252 

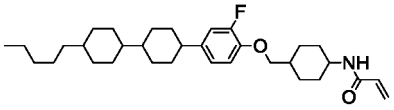
1β-6-253 

1β-6-254 

1β-6-255 

1β-6-256 

1β-6-257 

1β-6-258 

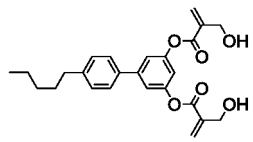
【０６４９】

［１６．化合物（１γ）の例示］

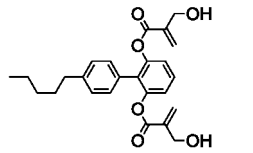
合成例に記載した合成法に準じて、以下の化合物（１γ－１－１）～（１γ－１－８０）、化合物（１γ－２－１）～（１γ－２－２２５）、化合物（１γ－３－１）～（１γ－３－１００）、化合物（１γ－４－１）～（１γ－４－７０）、化合物（１γ－５－１）～（１γ－５－７５）、および化合物（１γ－６－１）～（１γ－６－６０）を合成することが可能である。

No.

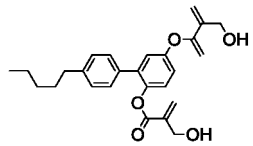
1γ-1-1



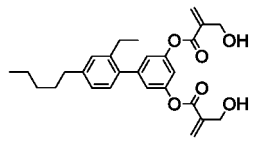
1γ-1-2



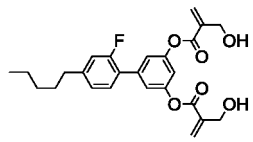
1γ-1-3



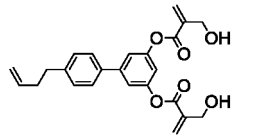
1γ-1-4



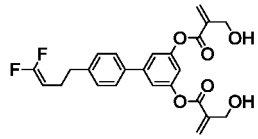
1γ-1-5



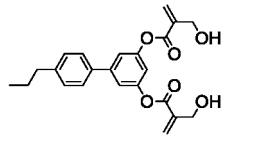
1γ-1-6



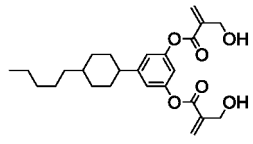
1γ-1-7



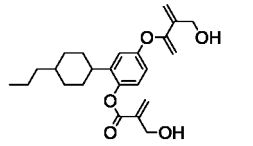
1γ-1-8



1γ-1-9

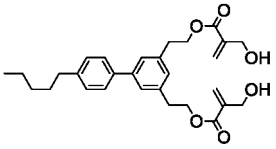


1γ-1-10

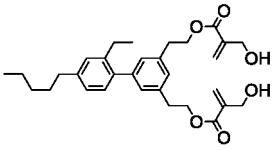


No.

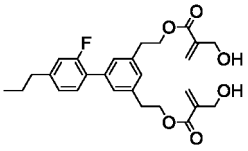
1γ-1-11



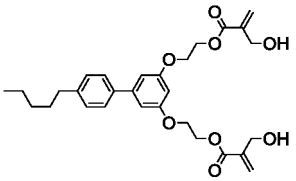
1γ-1-12



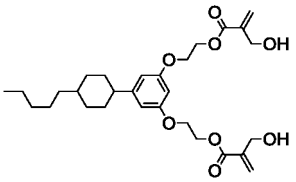
1γ-1-13



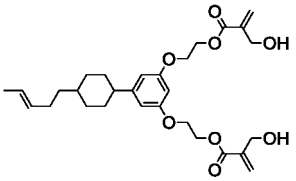
1γ-1-14



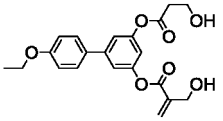
1γ-1-15



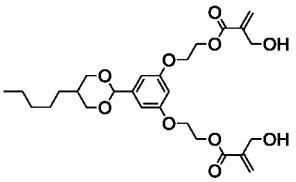
1γ-1-16



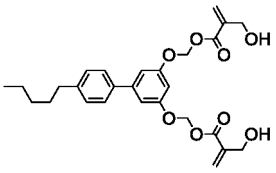
1γ-1-17



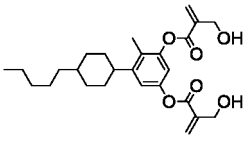
1γ-1-18



1γ-1-19

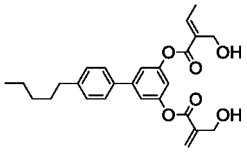


1γ-1-20

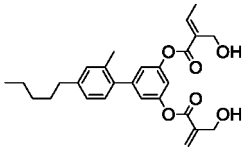


No.

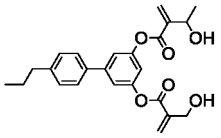
1γ-1-21



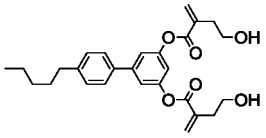
1γ-1-22



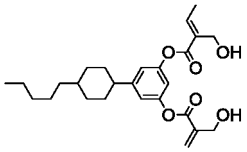
1γ-1-23



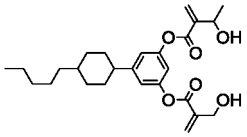
1γ-1-24



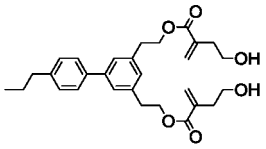
1γ-1-25



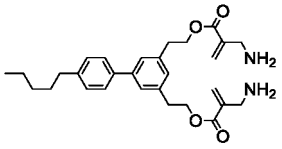
1γ-1-26



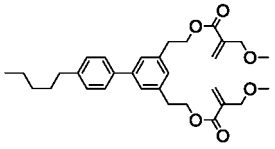
1γ-1-27



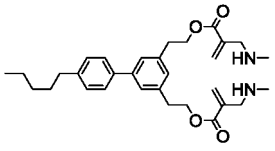
1γ-1-28



1γ-1-29

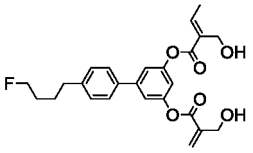


1γ-1-30

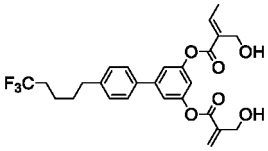


No.

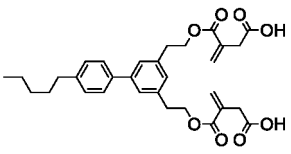
1γ-1-31



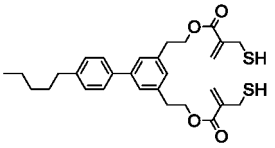
1γ-1-32



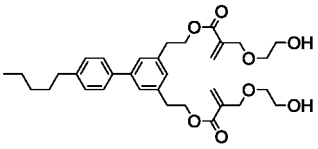
1γ-1-33



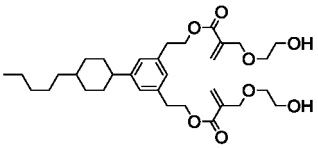
1γ-1-34



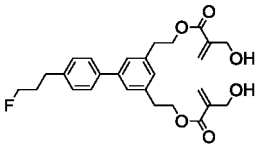
1γ-1-35



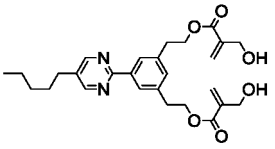
1γ-1-36



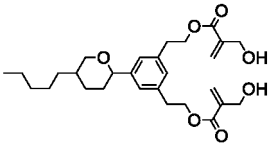
1γ-1-37



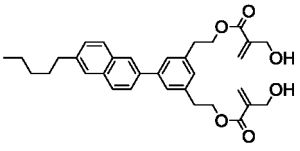
1γ-1-38



1γ-1-39

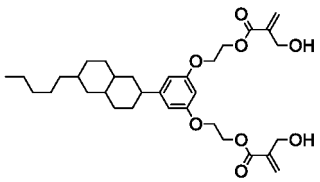


1γ-1-40

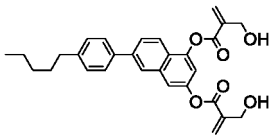


No.

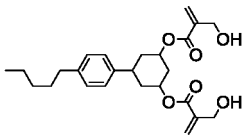
1γ-1-41



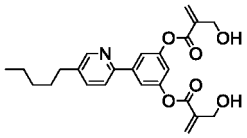
1γ-1-42



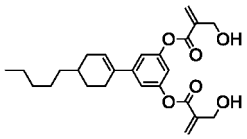
1γ-1-43



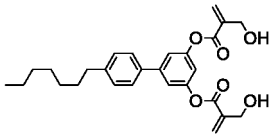
1γ-1-44



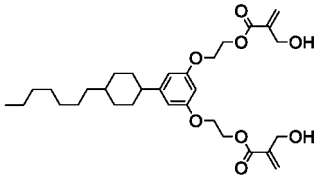
1γ-1-45



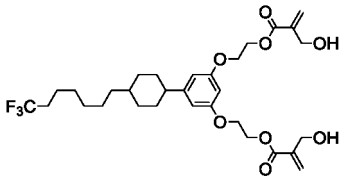
1γ-1-46



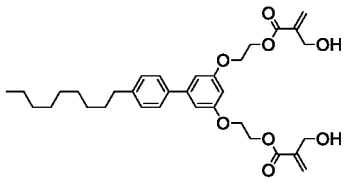
1γ-1-47



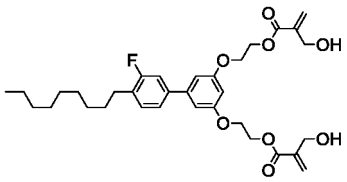
1γ-1-48



1γ-1-49

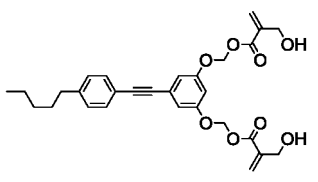


1γ-1-50

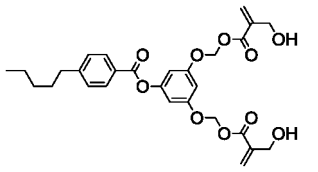


No.

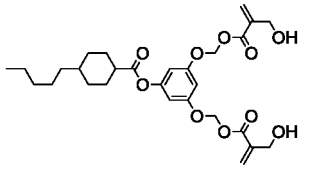
1γ-1-51



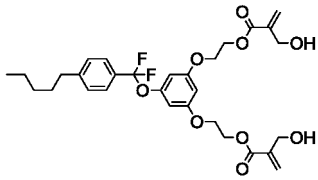
1γ-1-52



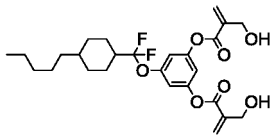
1γ-1-53



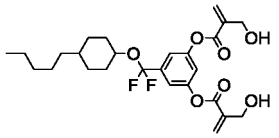
1γ-1-54



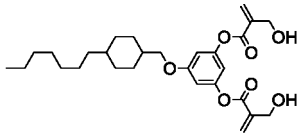
1γ-1-55



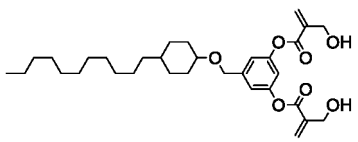
1γ-1-56



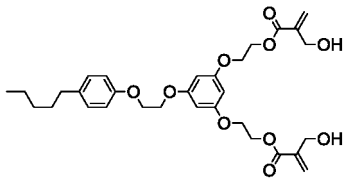
1γ-1-57



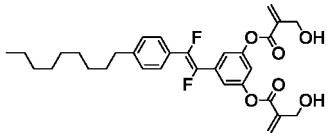
1γ-1-58



1γ-1-59

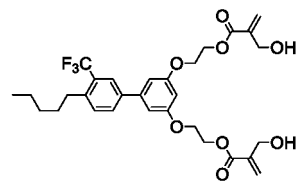


1γ-1-60

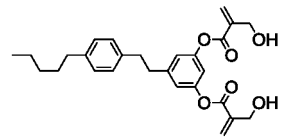


No.

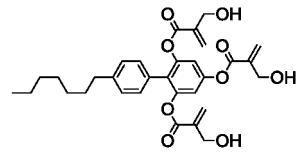
1γ-1-61



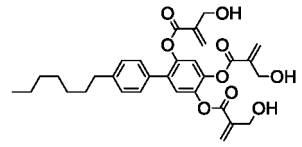
1γ-1-62



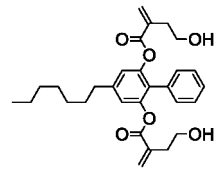
1γ-1-63



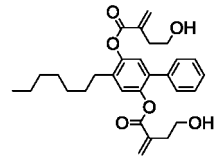
1γ-1-64



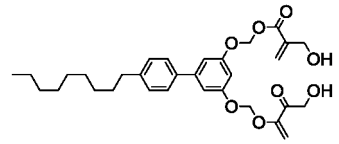
1γ-1-65



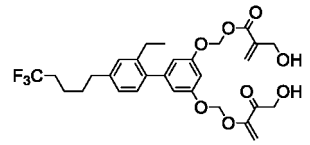
1γ-1-66



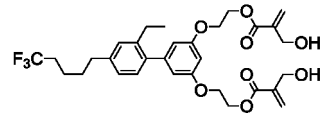
1γ-1-67



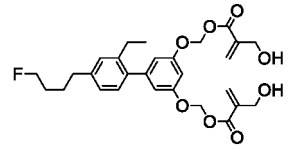
1γ-1-68



1γ-1-69

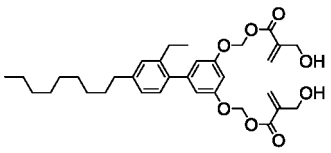


1γ-1-70

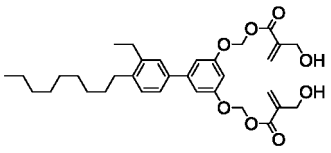


No.

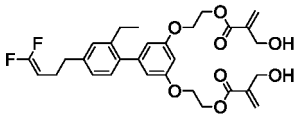
1γ-1-71



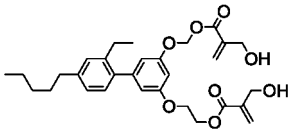
1γ-1-72



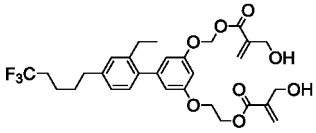
1γ-1-73



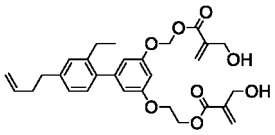
1γ-1-74



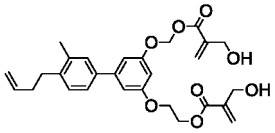
1γ-1-75



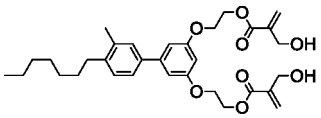
1γ-1-76



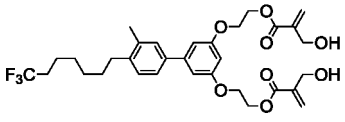
1γ-1-77



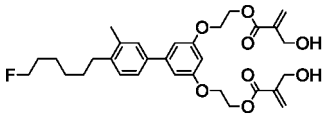
1γ-1-78



1γ-1-79

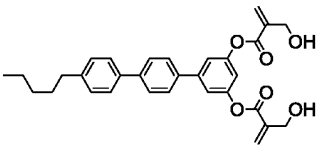


1γ-1-80

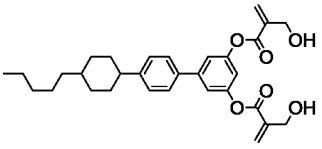


No.

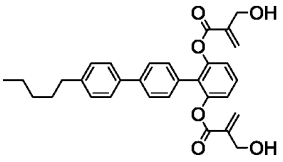
1γ-2-1



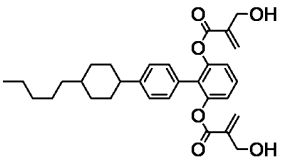
1γ-2-2



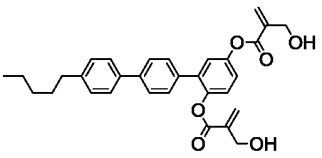
1γ-2-3



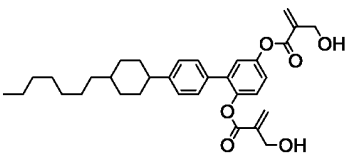
1γ-2-4



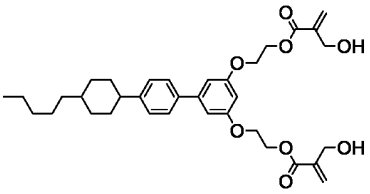
1γ-2-5



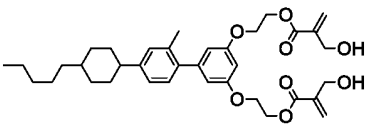
1γ-2-6



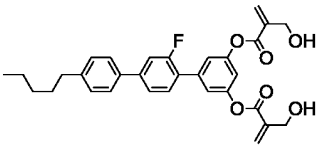
1γ-2-7



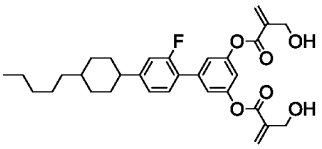
1γ-2-8



1γ-2-9

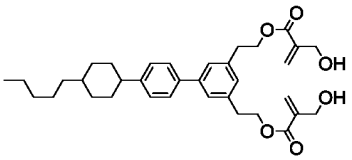


1γ-2-10

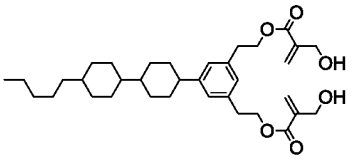


No.

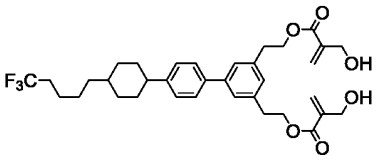
1γ-2-11



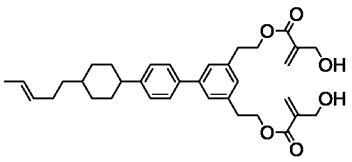
1γ-2-12



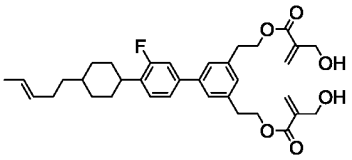
1γ-2-13



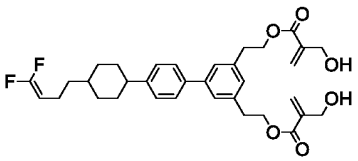
1γ-2-14



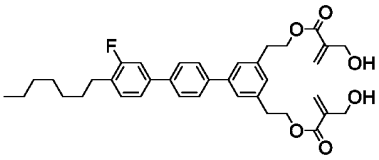
1γ-2-15



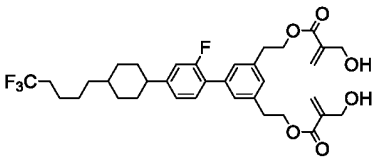
1γ-2-16



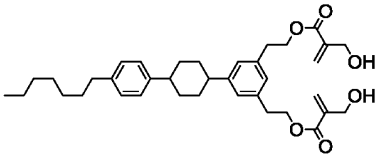
1γ-2-17



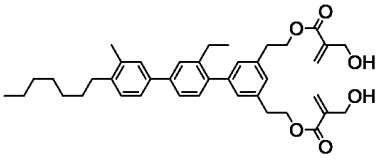
1γ-2-18



1γ-2-19

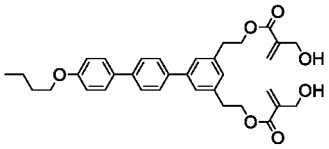


1γ-2-20

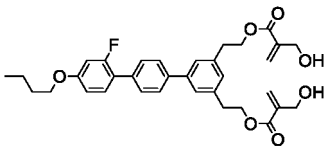


No.

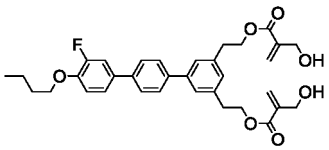
1γ-2-21



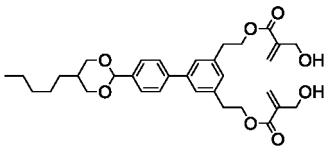
1γ-2-22



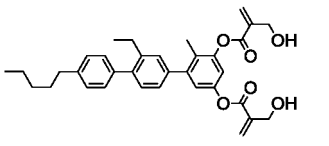
1γ-2-23



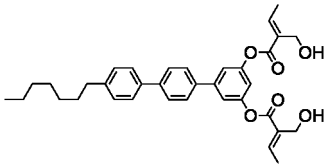
1γ-2-24



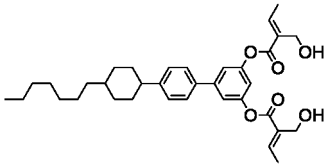
1γ-2-25



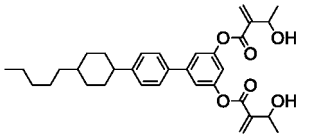
1γ-2-26



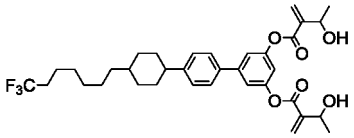
1γ-2-27



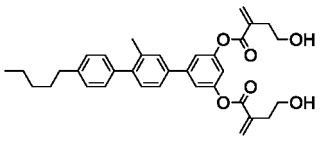
1γ-2-28



1γ-2-29

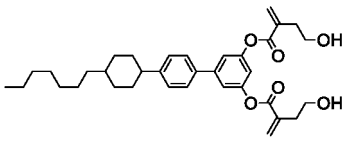


1γ-2-30

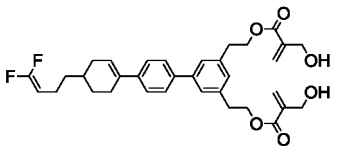


No.

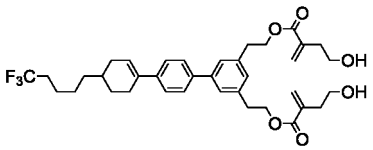
1γ-2-31



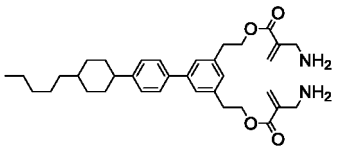
1γ-2-32



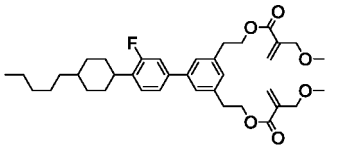
1γ-2-33



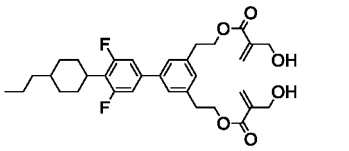
1γ-2-34



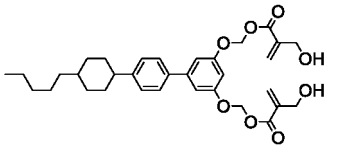
1γ-2-35



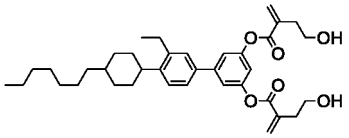
1γ-2-36



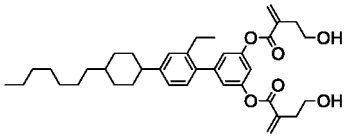
1γ-2-37



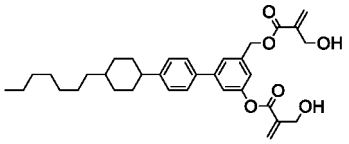
1γ-2-38



1γ-2-39

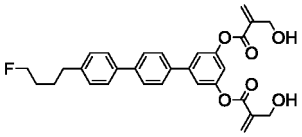


1γ-2-40

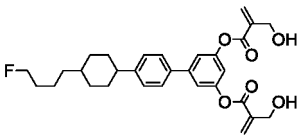


No.

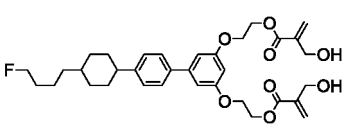
1γ-2-41



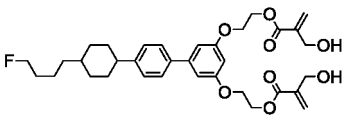
1γ-2-42



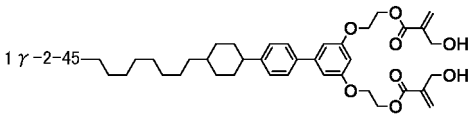
1γ-2-43



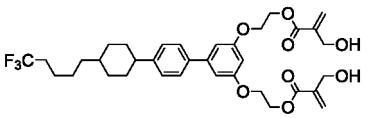
1γ-2-44



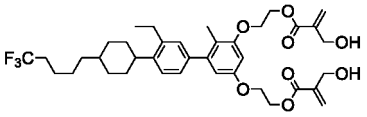
1γ-2-45



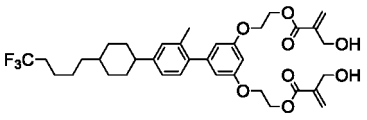
1γ-2-46



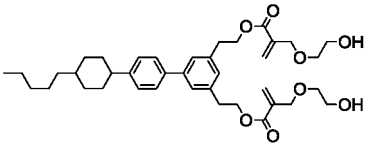
1γ-2-47



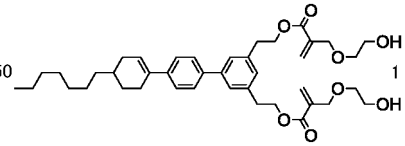
1γ-2-48



1γ-2-49

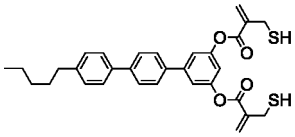


1γ-2-50

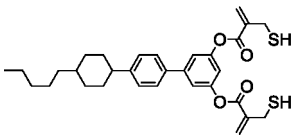


No.

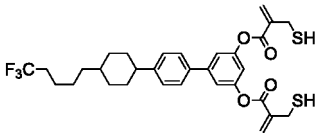
1γ-2-51



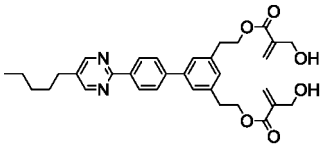
1γ-2-52



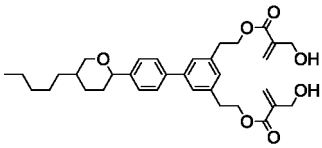
1γ-2-53



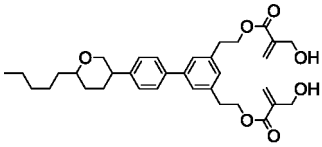
1γ-2-54



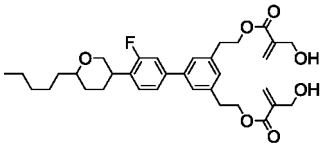
1γ-2-55



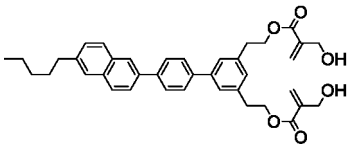
1γ-2-56



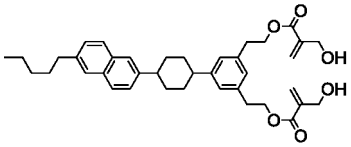
1γ-2-57



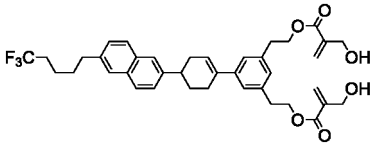
1γ-2-58



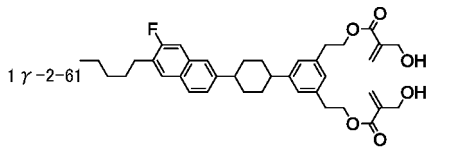
1γ-2-59

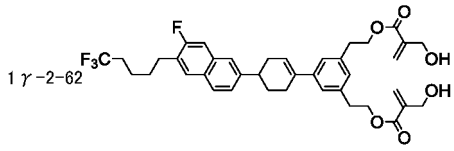


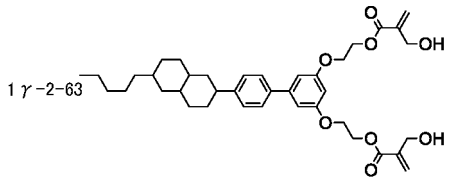
1γ-2-60

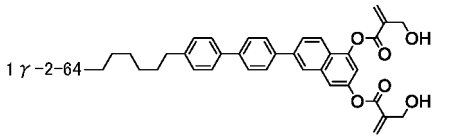


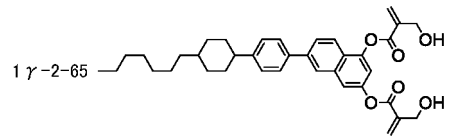
No.

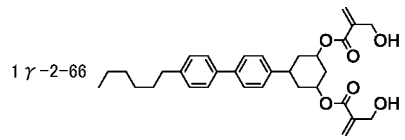

1γ-2-61
F
OH
OH

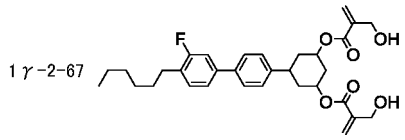

1γ-2-62
F
F3C
OH
OH

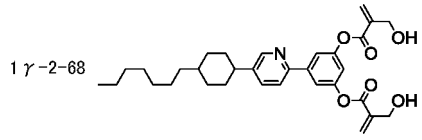

1γ-2-63
OH
OH

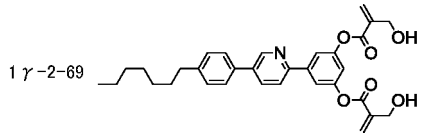

1γ-2-64
OH
OH

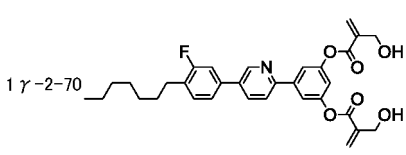

1γ-2-65
OH
OH


1γ-2-66
OH
OH

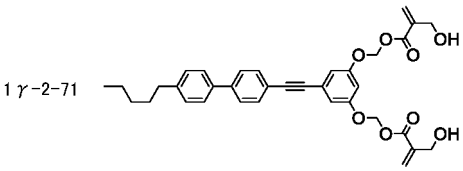

1γ-2-67
F
OH
OH

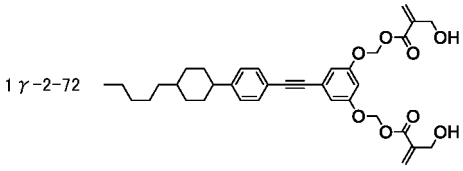

1γ-2-68
N
OH
OH

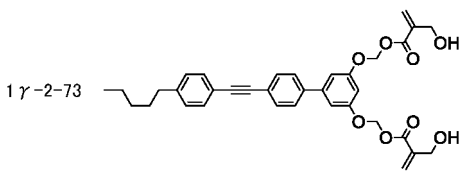

1γ-2-69
N
OH
OH

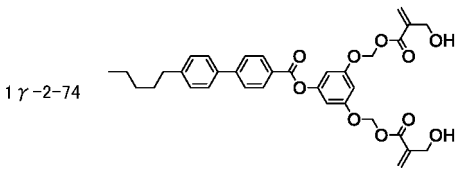

1γ-2-70
F
N
OH
OH

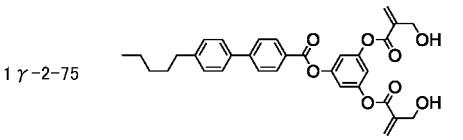
No.

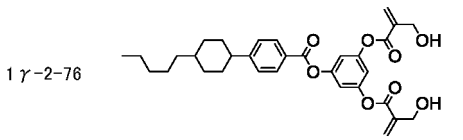

1γ-2-71
OH
OH

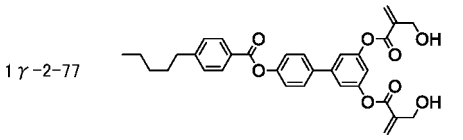

1γ-2-72
OH
OH

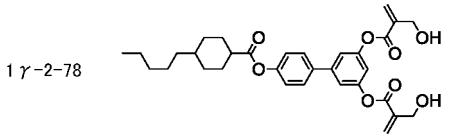

1γ-2-73
OH
OH

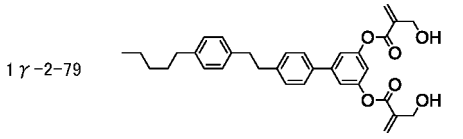

1γ-2-74
OH
OH

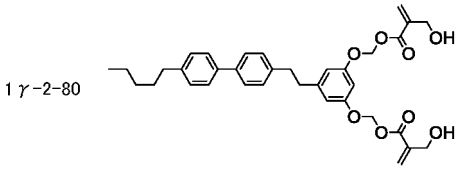

1γ-2-75
OH
OH


1γ-2-76
OH
OH


1γ-2-77
OH
OH

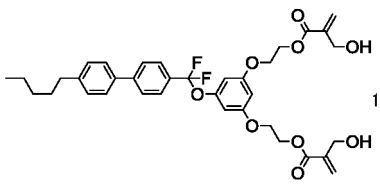

1γ-2-78
OH
OH


1γ-2-79
OH
OH

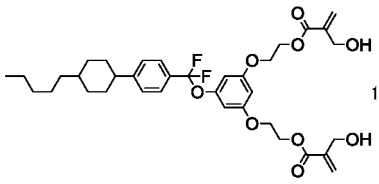

1γ-2-80
OH
OH

No.

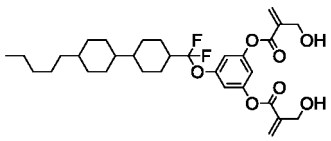
1γ-2-81



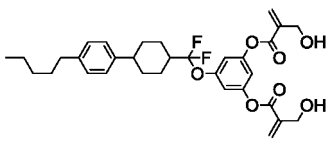
1γ-2-82



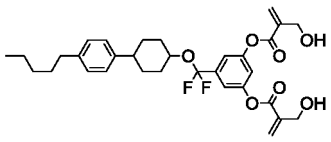
1γ-2-83



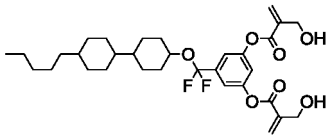
1γ-2-84



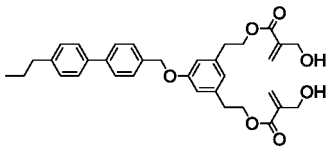
1γ-2-85



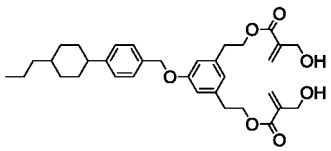
1γ-2-86



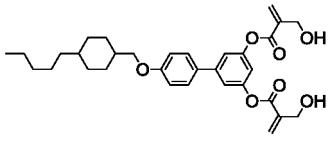
1γ-2-87



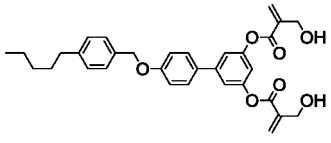
1γ-2-88



1γ-2-89

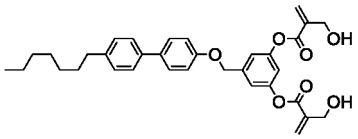


1γ-2-90

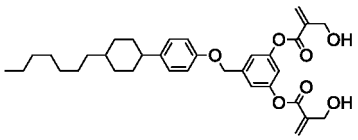


No.

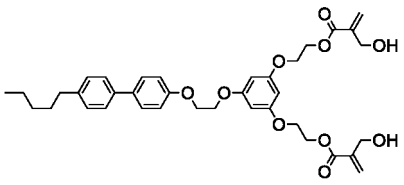
1γ-2-91



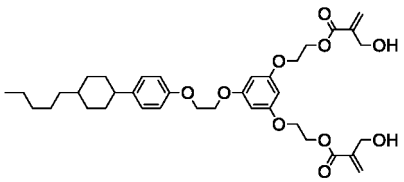
1γ-2-92



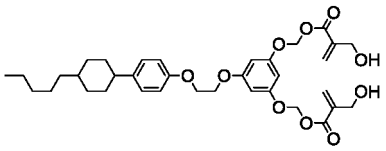
1γ-2-93



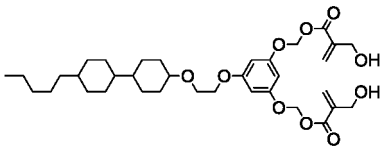
1γ-2-94



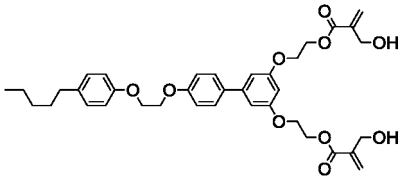
1γ-2-95



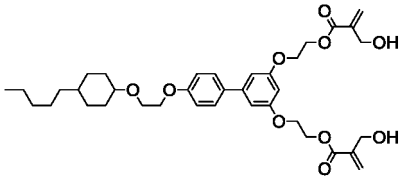
1γ-2-96



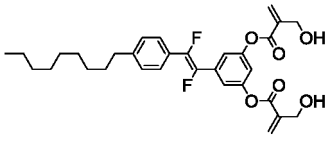
1γ-2-97



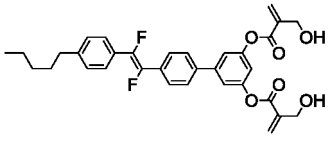
1γ-2-98



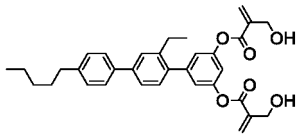
1γ-2-99

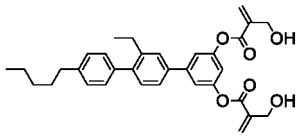


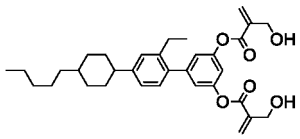
1γ-2-100

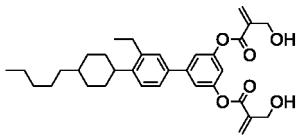


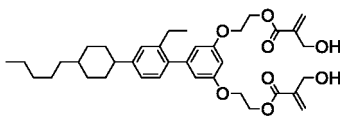
No.

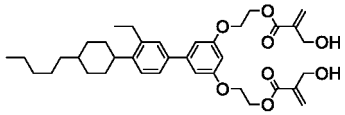
1γ-2-101 

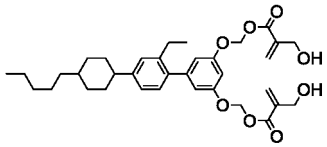
1γ-2-102 

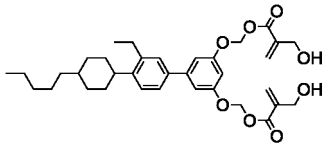
1γ-2-103 

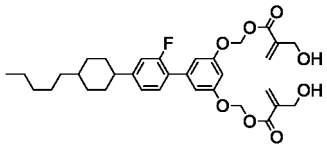
1γ-2-104 

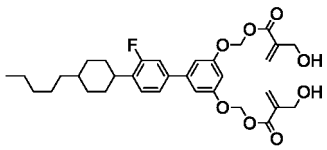
1γ-2-105 

1γ-2-106 

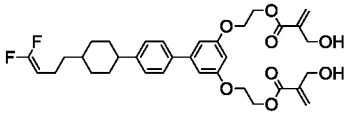
1γ-2-107 

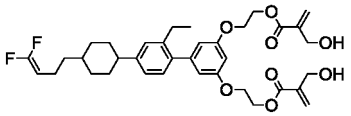
1γ-2-108 

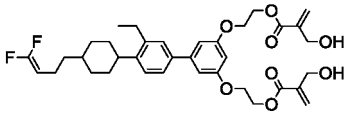
1γ-2-109 

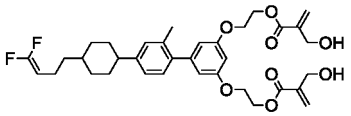
1γ-2-110 

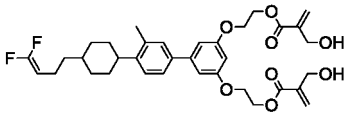
No.

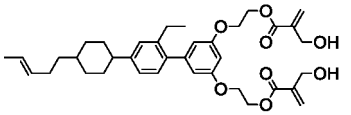
1γ-2-111 

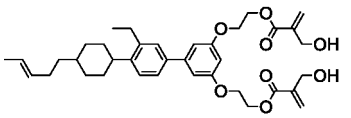
1γ-2-112 

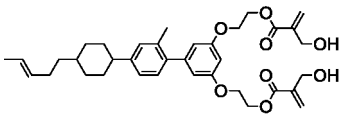
1γ-2-113 

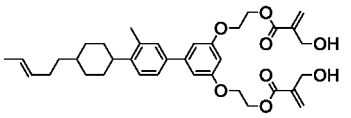
1γ-2-114 

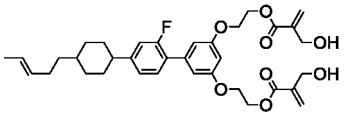
1γ-2-115 

1γ-2-116 

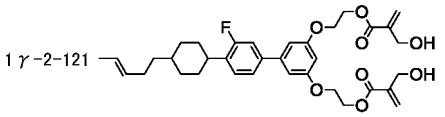
1γ-2-117 

1γ-2-118 

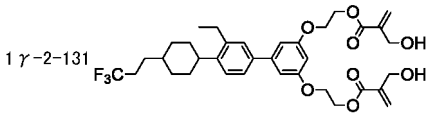
1γ-2-119 

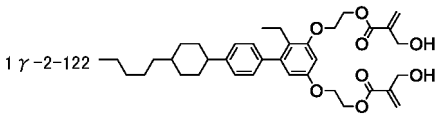
1γ-2-120 

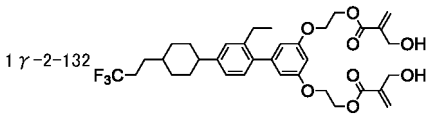
No.

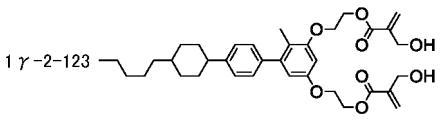


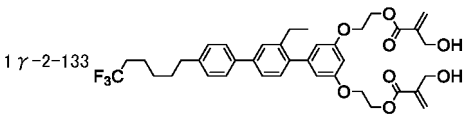
No.

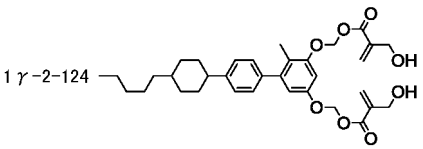


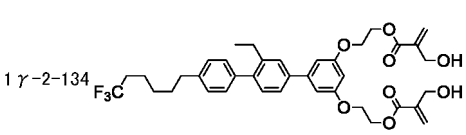


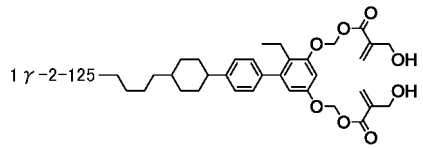


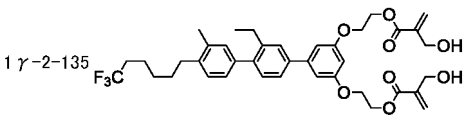


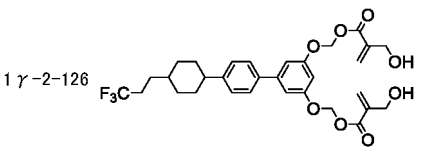


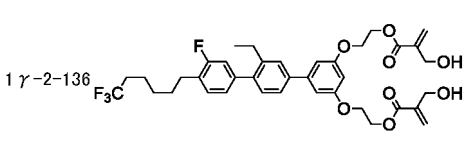


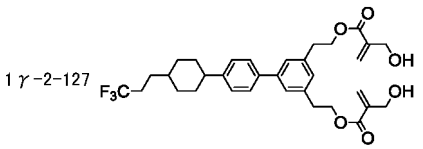


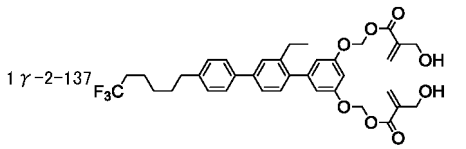


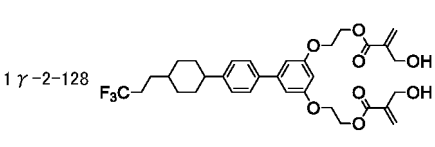


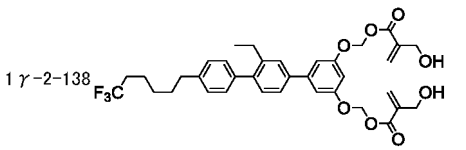


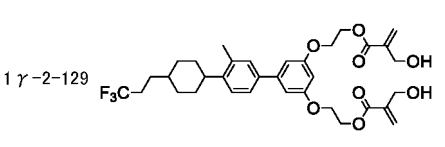


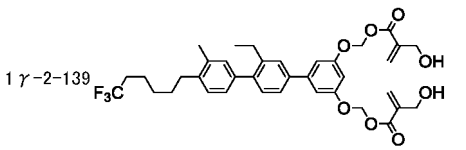


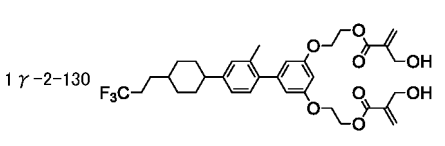


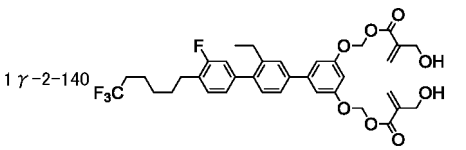




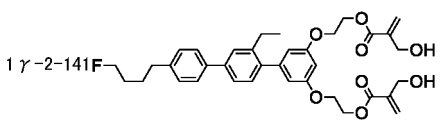




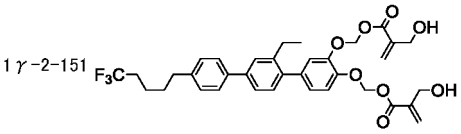


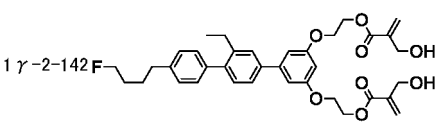


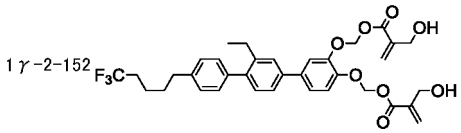
No.

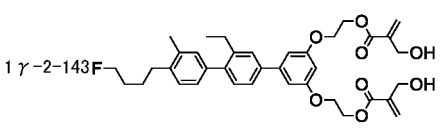


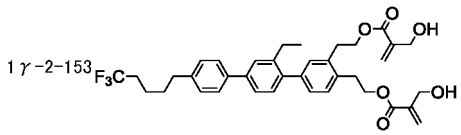
No.

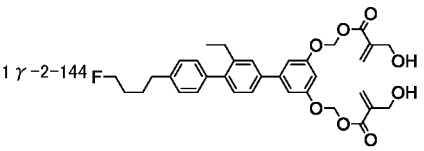


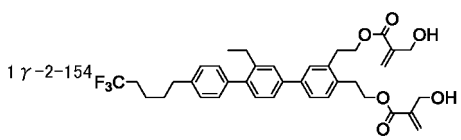


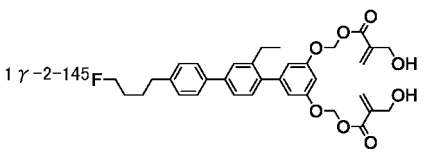


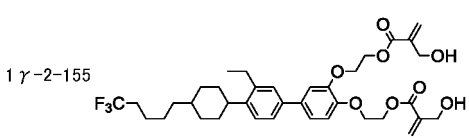


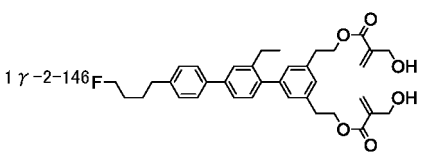


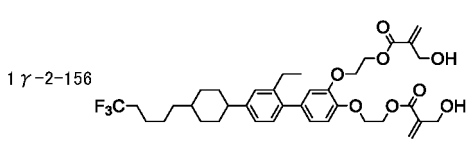


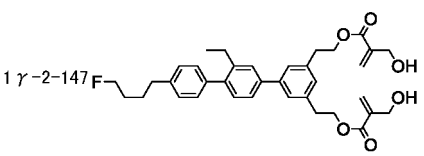


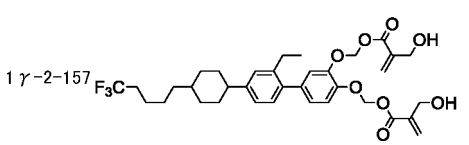


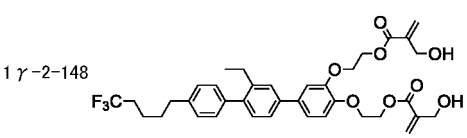


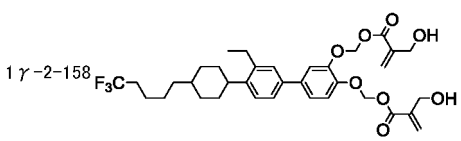


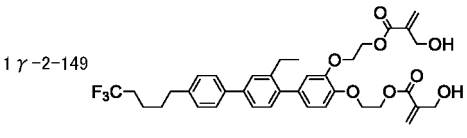


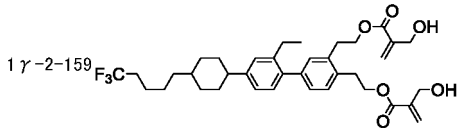


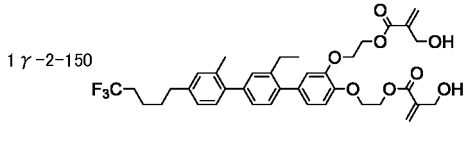


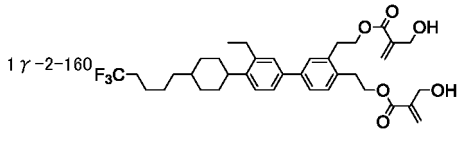




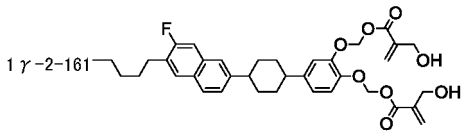




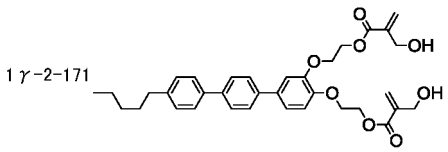


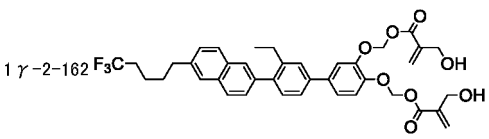


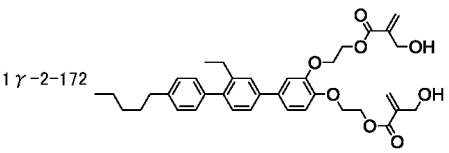
No.

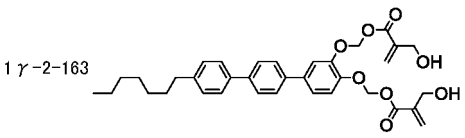


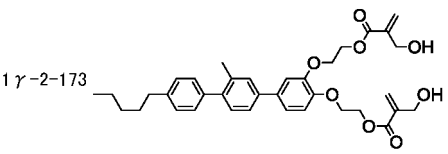
No.

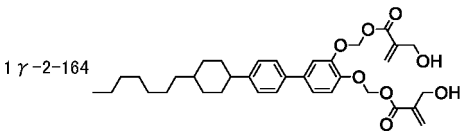


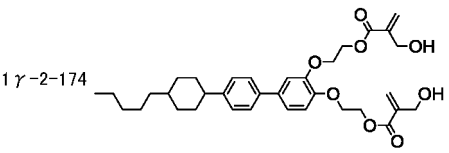


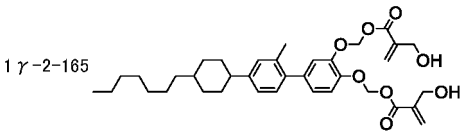


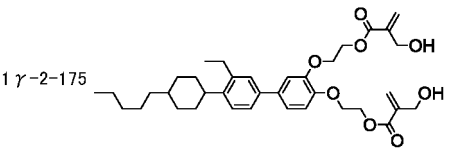


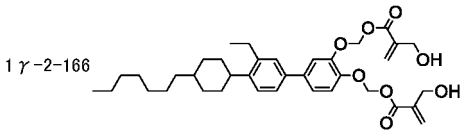


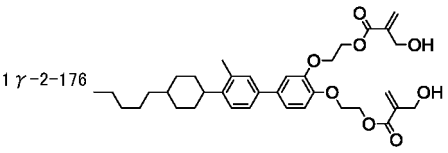


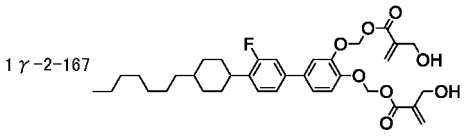


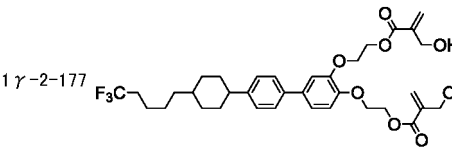


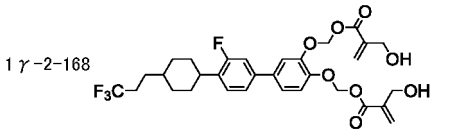


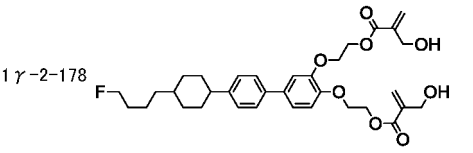


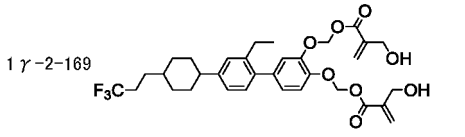


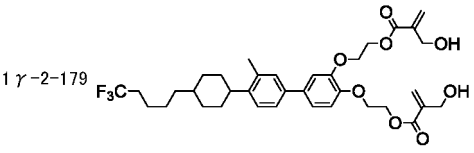


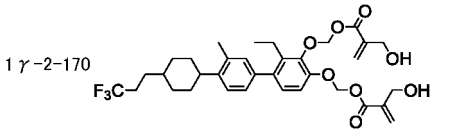


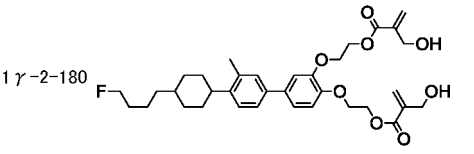




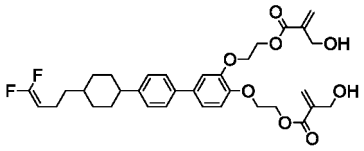


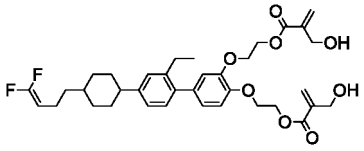


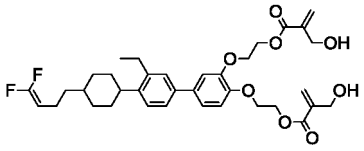


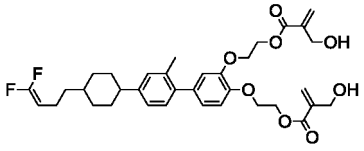


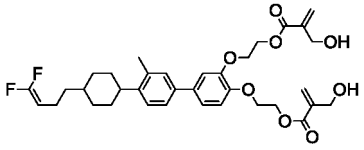
No.

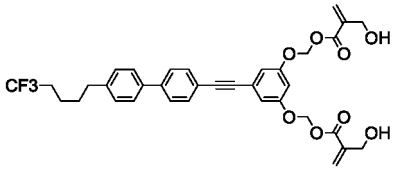
1γ-2-181 

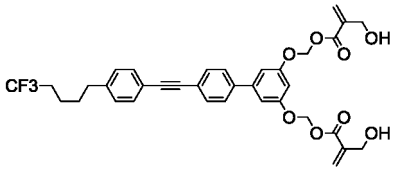
1γ-2-182 

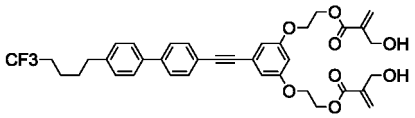
1γ-2-183 

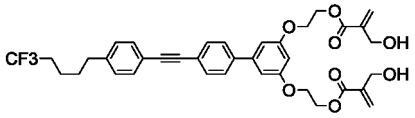
1γ-2-184 

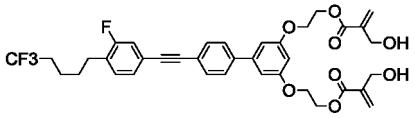
1γ-2-185 

1γ-2-186 

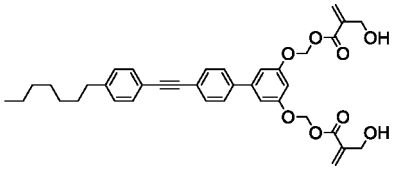
1γ-2-187 

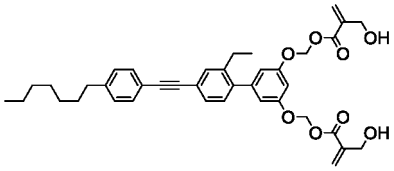
1γ-2-188 

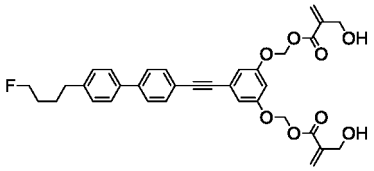
1γ-2-189 

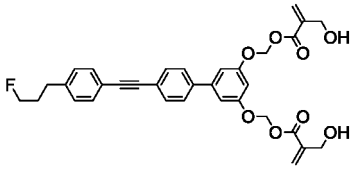
1γ-2-190 

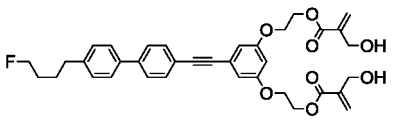
No.

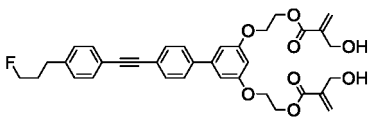
1γ-2-191 

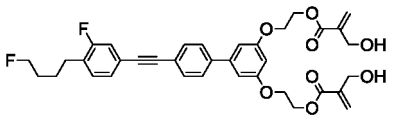
1γ-2-192 

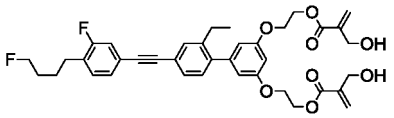
1γ-2-193 

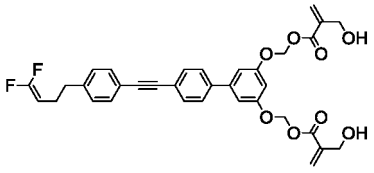
1γ-2-194 

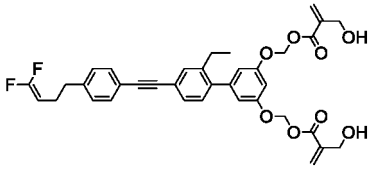
1γ-2-195 

1γ-2-196 

1γ-2-197 

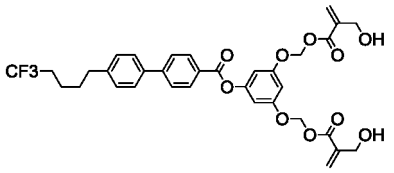
1γ-2-198 

1γ-2-199 

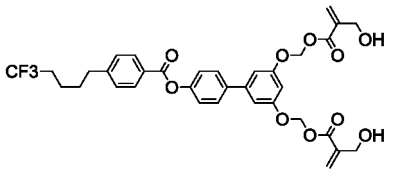
1γ-2-200 

No.

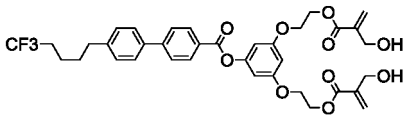
1γ-2-201



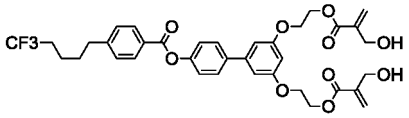
1γ-2-202



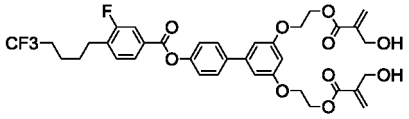
1γ-2-203



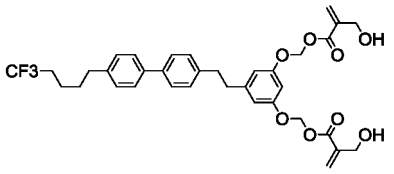
1γ-2-204



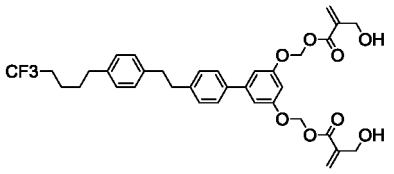
1γ-2-205



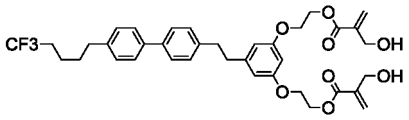
1γ-2-206



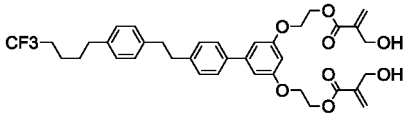
1γ-2-207



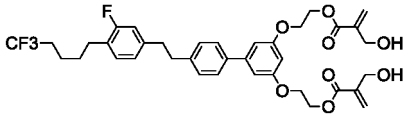
1γ-2-208



1γ-2-209

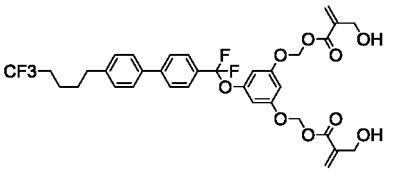


1γ-2-210

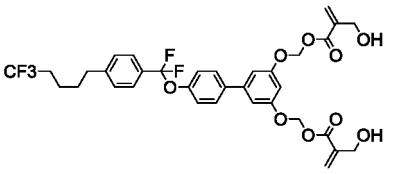


No.

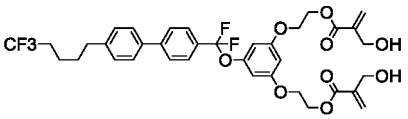
1γ-2-211



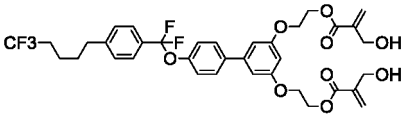
1γ-2-212



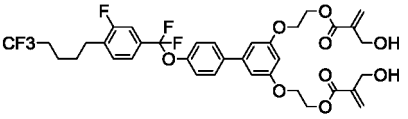
1γ-2-213



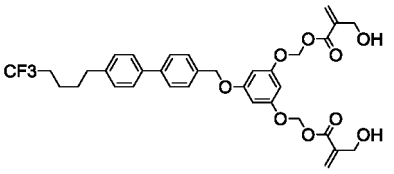
1γ-2-214



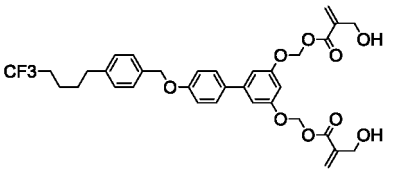
1γ-2-215



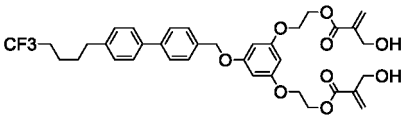
1γ-2-216



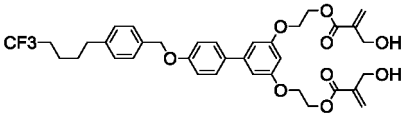
1γ-2-217



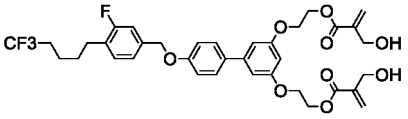
1γ-2-218



1γ-2-219

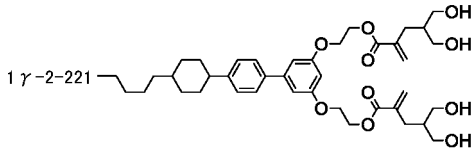


1γ-2-220

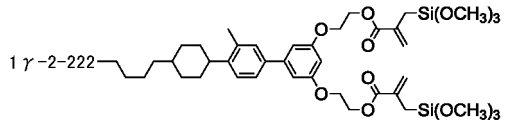


No.

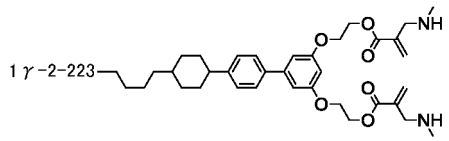
1γ-2-221



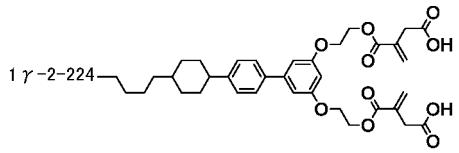
1γ-2-222



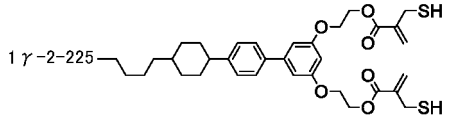
1γ-2-223



1γ-2-224

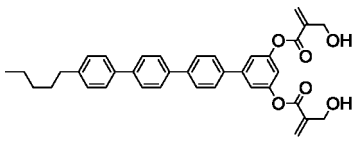


1γ-2-225

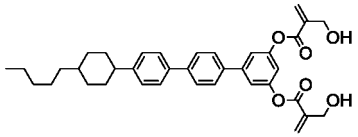


No.

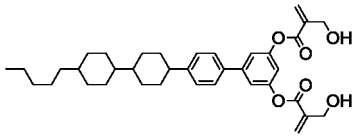
1γ-3-1



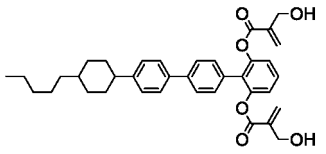
1γ-3-2



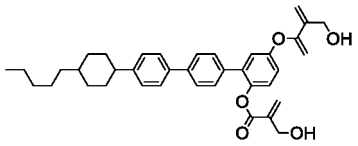
1γ-3-3



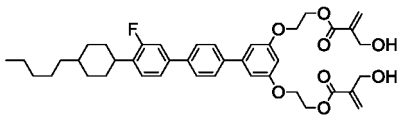
1γ-3-4



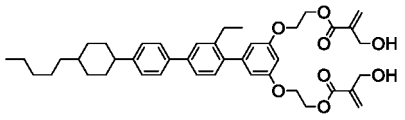
1γ-3-5



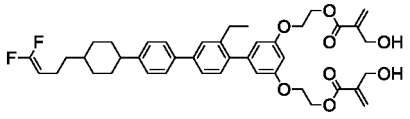
1γ-3-6



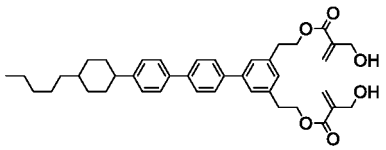
1γ-3-7



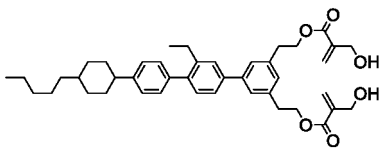
1γ-3-8



1γ-3-9

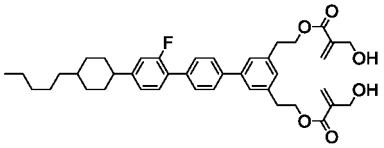


1γ-3-10

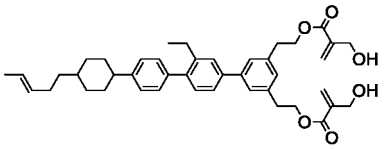


No.

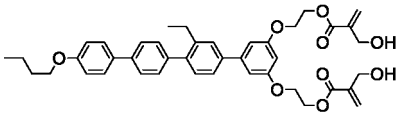
1γ-3-11



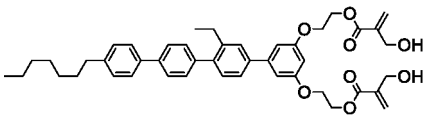
1γ-3-12



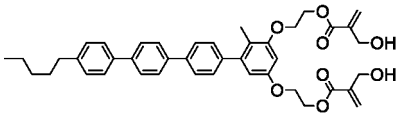
1γ-3-13



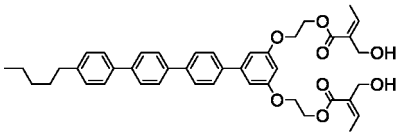
1γ-3-14



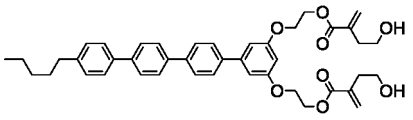
1γ-3-15



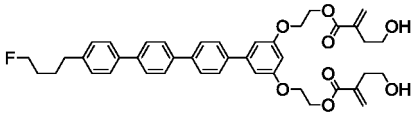
1γ-3-16



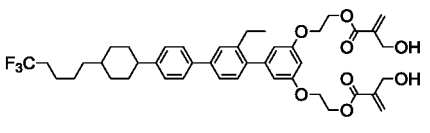
1γ-3-17



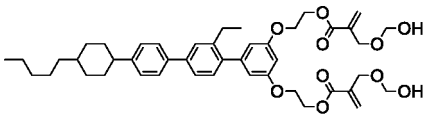
1γ-3-18



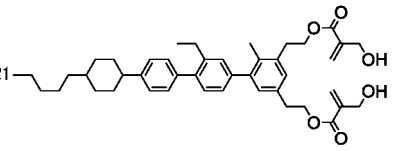
1γ-3-19

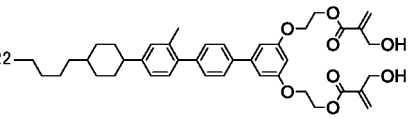


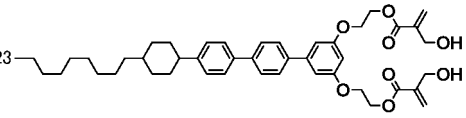
1γ-3-20

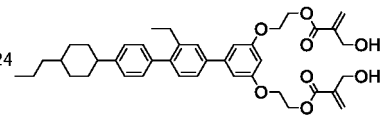


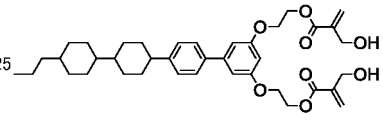
No.

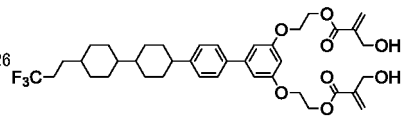
1γ-3-21 

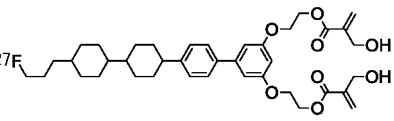
1γ-3-22 

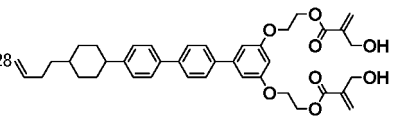
1γ-3-23 

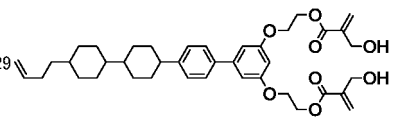
1γ-3-24 

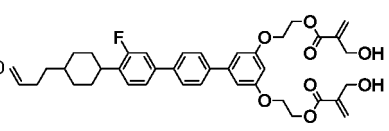
1γ-3-25 

1γ-3-26 

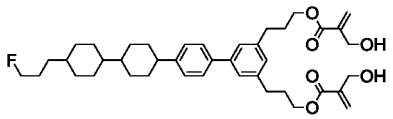
1γ-3-27 

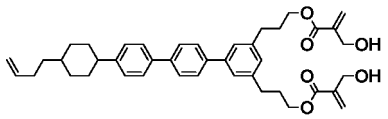
1γ-3-28 

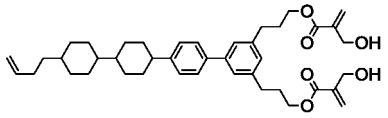
1γ-3-29 

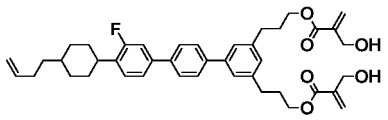
1γ-3-30 

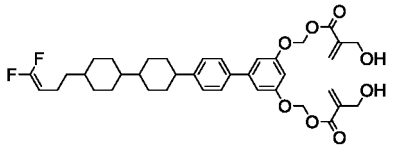
No.

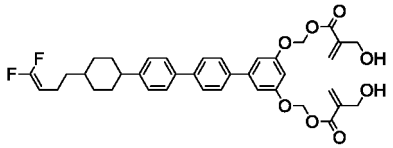
1γ-3-31 

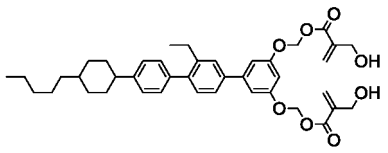
1γ-3-32 

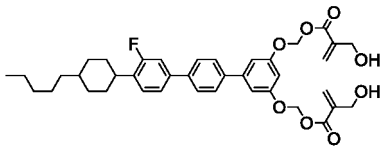
1γ-3-33 

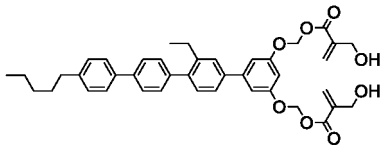
1γ-3-34 

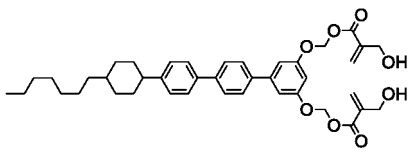
1γ-3-35 

1γ-3-36 

1γ-3-37 

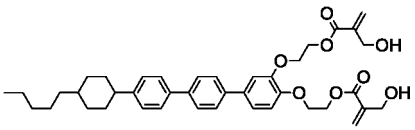
1γ-3-38 

1γ-3-39 

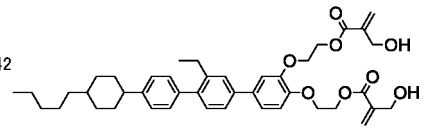
1γ-3-40 

No.

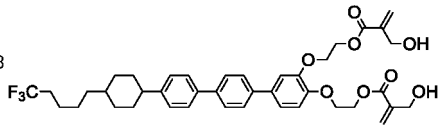
1γ-3-41



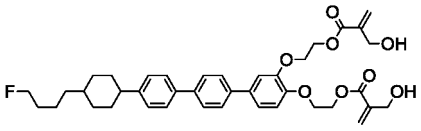
1γ-3-42



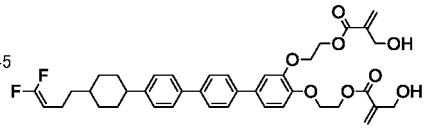
1γ-3-43



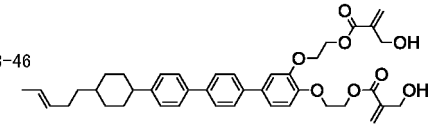
1γ-3-44



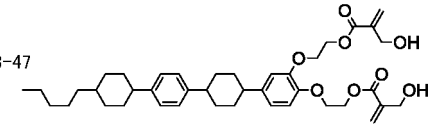
1γ-3-45



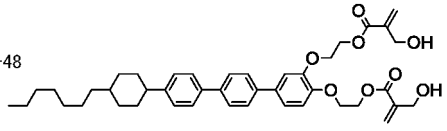
1γ-3-46



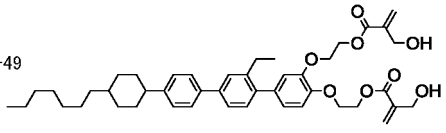
1γ-3-47



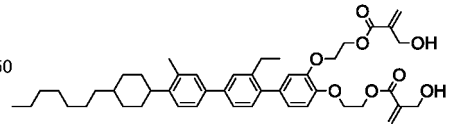
1γ-3-48



1γ-3-49

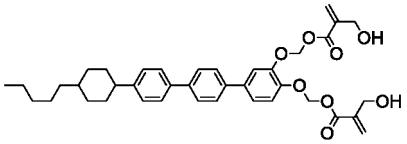


1γ-3-50

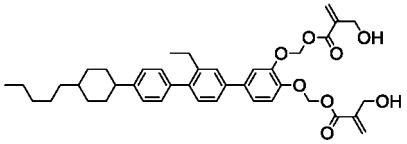


No.

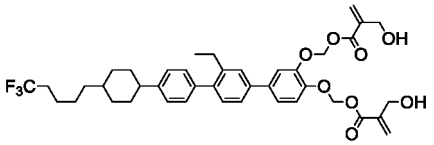
1γ-3-51



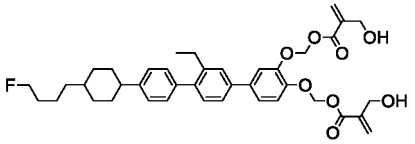
1γ-3-52



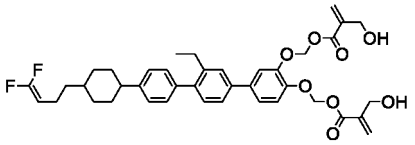
1γ-3-53



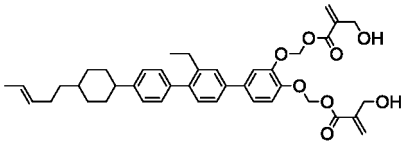
1γ-3-54



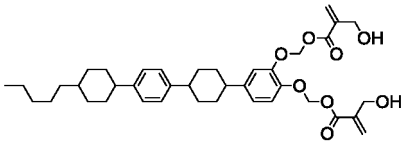
1γ-3-55



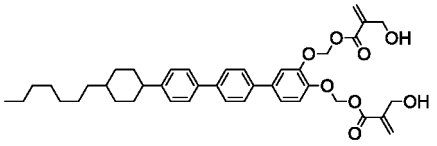
1γ-3-56



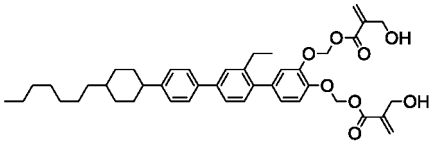
1γ-3-57



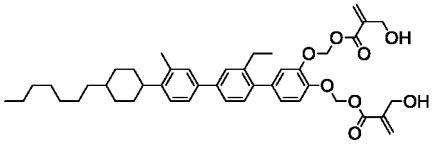
1γ-3-58



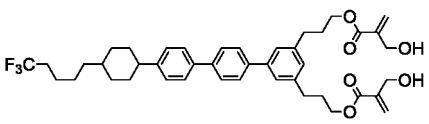
1γ-3-59

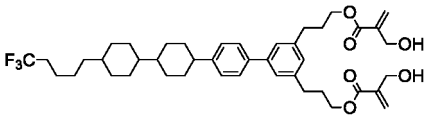


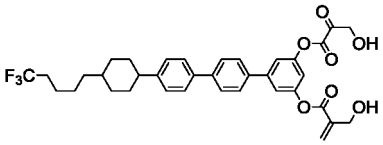
1γ-3-60

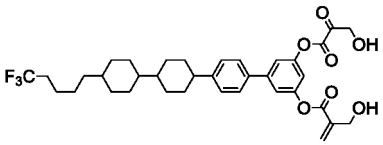


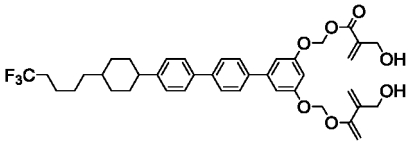
No.

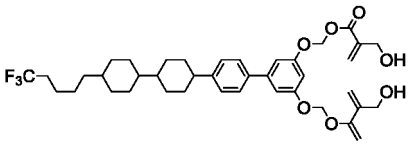
1γ-3-61 

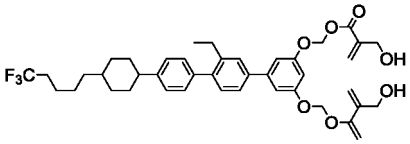
1γ-3-62 

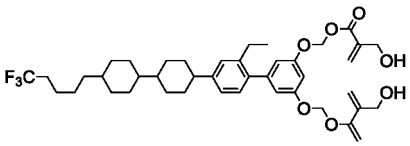
1γ-3-63 

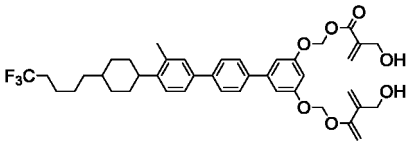
1γ-3-64 

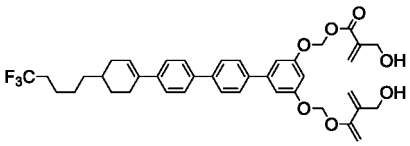
1γ-3-65 

1γ-3-66 

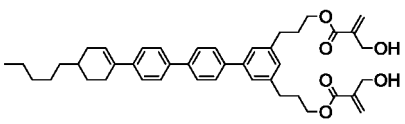
1γ-3-67 

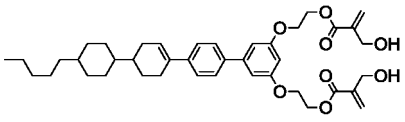
1γ-3-68 

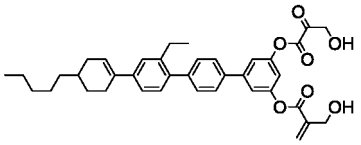
1γ-3-69 

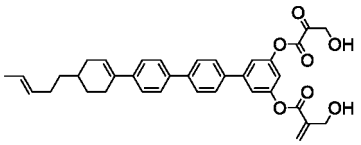
1γ-3-70 

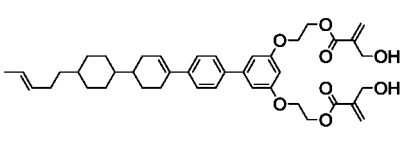
No.

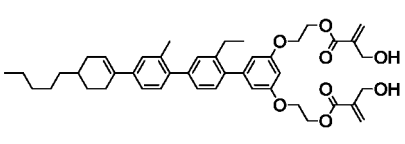
1γ-3-71 

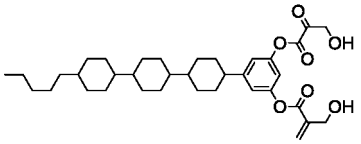
1γ-3-72 

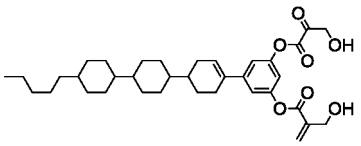
1γ-3-33 

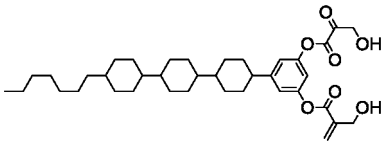
1γ-3-74 

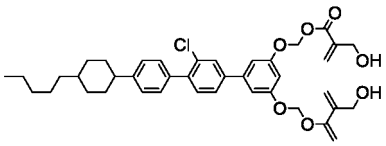
1γ-3-75 

1γ-3-76 

1γ-3-77 

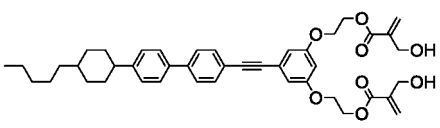
1γ-3-78 

1γ-3-79 

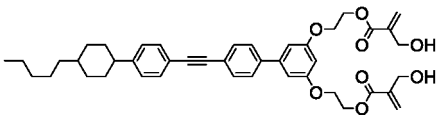
1γ-3-80 

No.

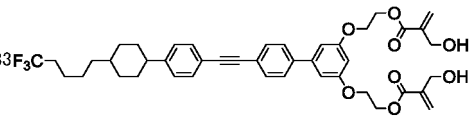
1γ-3-81



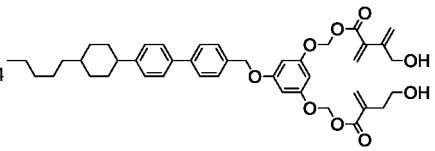
1γ-3-82



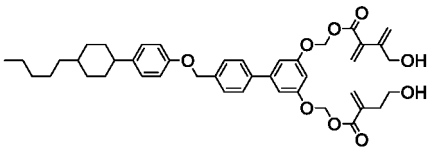
1γ-3-83



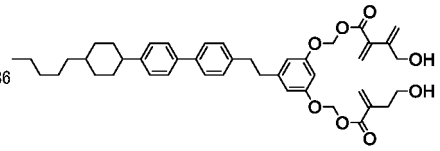
1γ-3-84



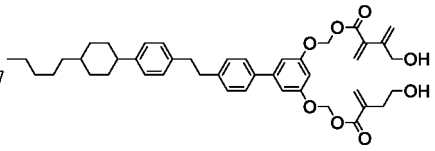
1γ-3-85



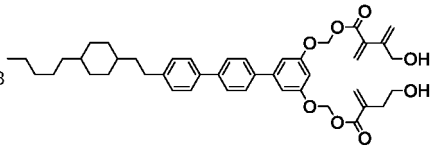
1γ-3-86



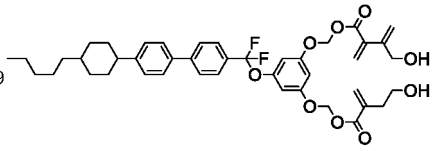
1γ-3-87



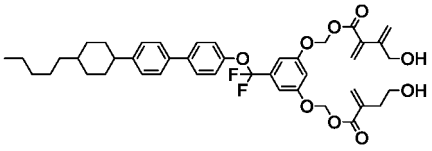
1γ-3-88



1γ-3-89

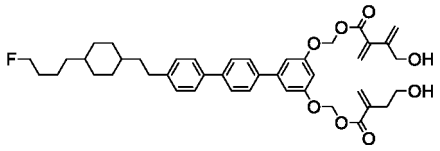


1γ-3-90

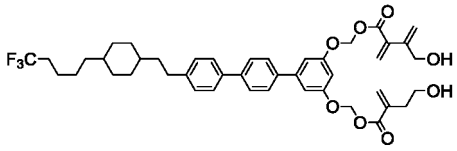


No.

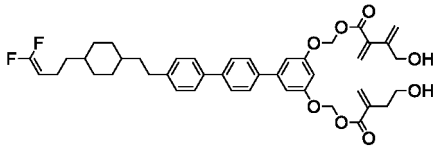
1γ-3-91



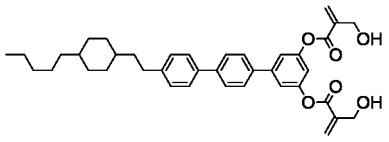
1γ-3-92



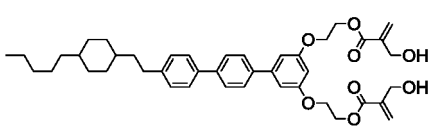
1γ-3-93



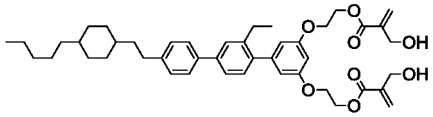
1γ-3-94



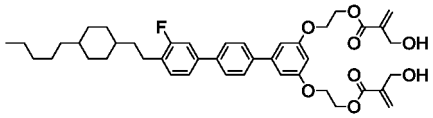
1γ-3-95



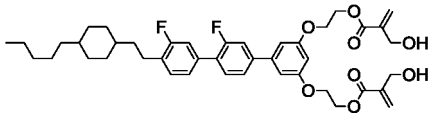
1γ-3-96



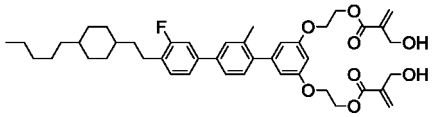
1γ-3-97



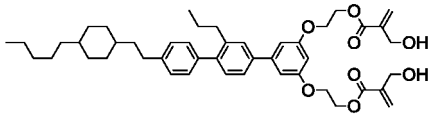
1γ-3-98



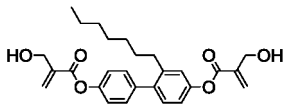
1γ-3-99

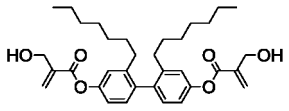


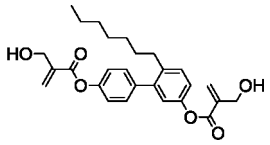
1γ-3-100

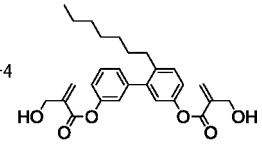


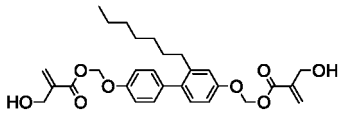
No.

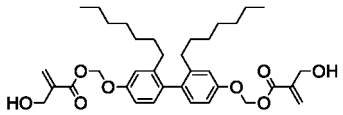
1γ-4-1 

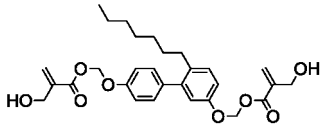
1γ-4-2 

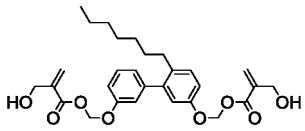
1γ-4-3 

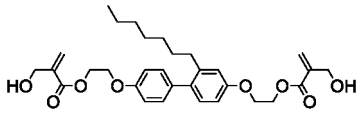
1γ-4-4 

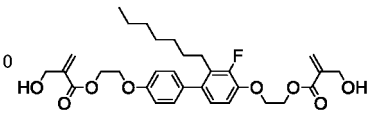
1γ-4-5 

1γ-4-6 

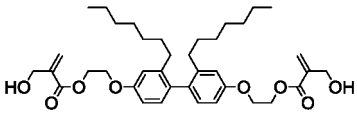
1γ-4-7 

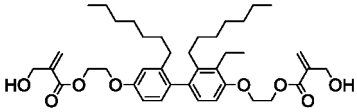
1γ-4-8 

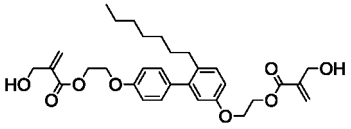
1γ-4-9 

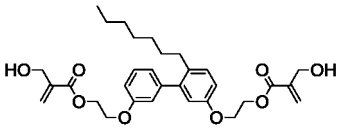
1γ-4-10 

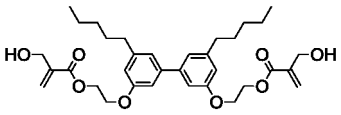
No.

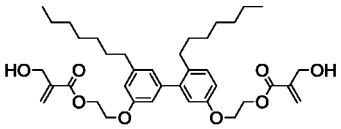
1γ-4-11 

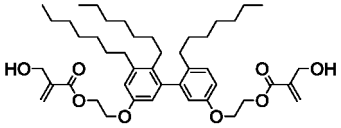
1γ-4-12 

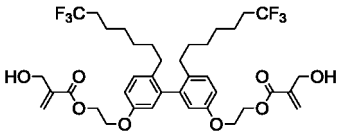
1γ-4-13 

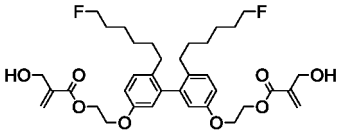
1γ-4-14 

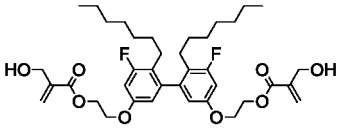
1γ-4-15 

1γ-4-16 

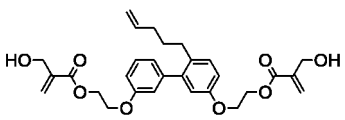
1γ-4-17 

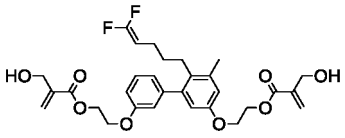
1γ-4-18 

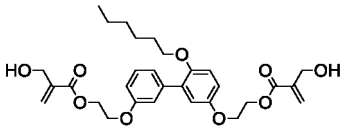
1γ-4-19 

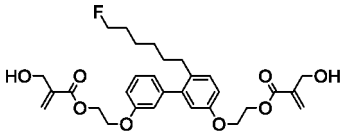
1γ-4-20 

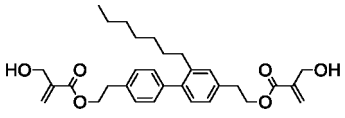
No.

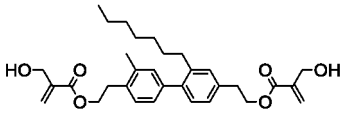
1γ-4-21 

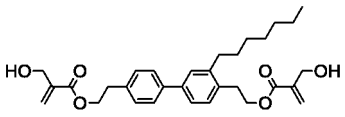
1γ-4-22 

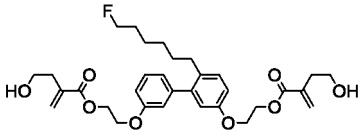
1γ-4-23 

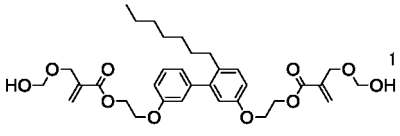
1γ-4-24 

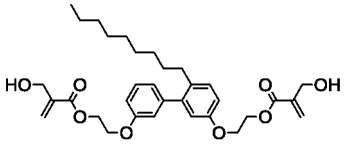
1γ-4-25 

1γ-4-26 

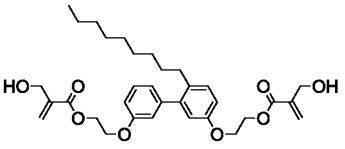
1γ-4-27 

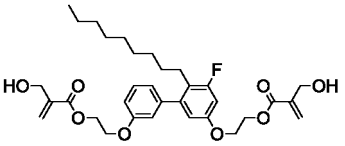
1γ-4-28 

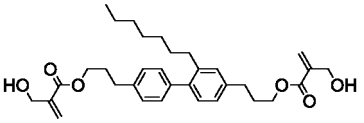
1γ-4-29 

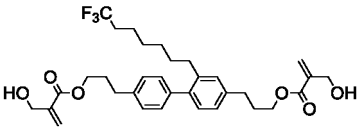
1γ-4-30 

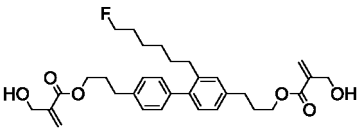
No.

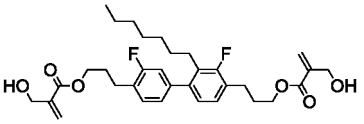
1γ-4-31 

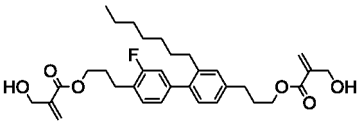
1γ-4-32 

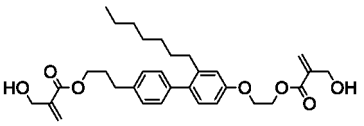
1γ-4-33 

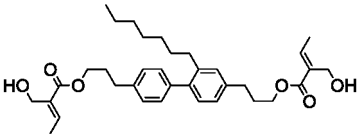
1γ-4-34 

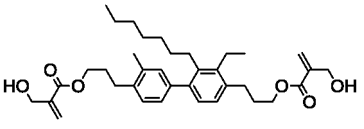
1γ-4-35 

1γ-4-36 

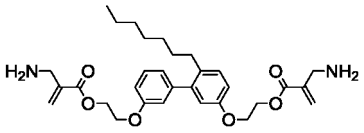
1γ-4-37 

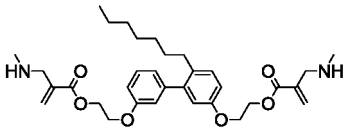
1γ-4-38 

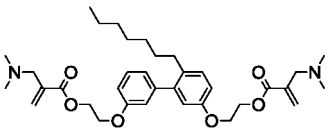
1γ-4-39 

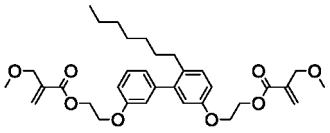
1γ-4-40 

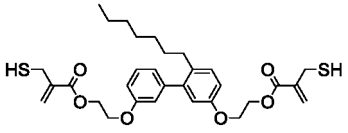
No.

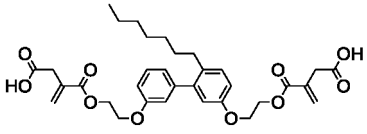
1γ-4-41 

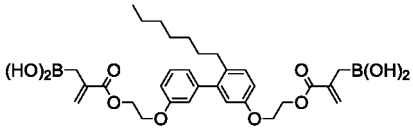
1γ-4-42 

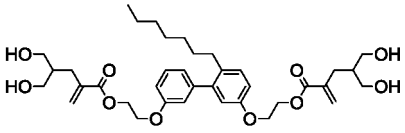
1γ-4-43 

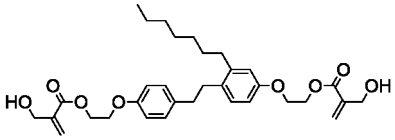
1γ-4-44 

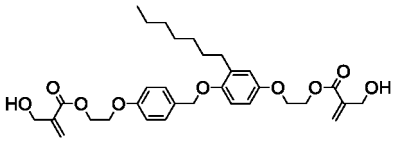
1γ-4-45 

1γ-4-46 

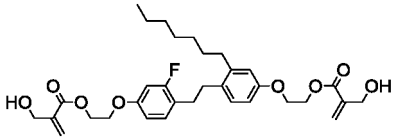
1γ-4-47 

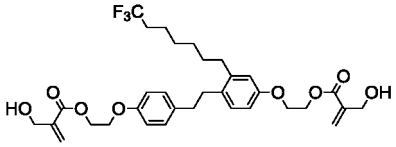
1γ-4-48 

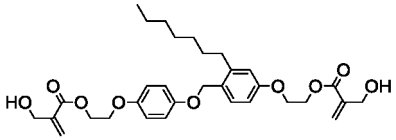
1γ-4-49 

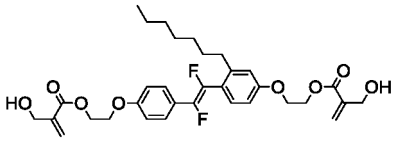
1γ-4-50 

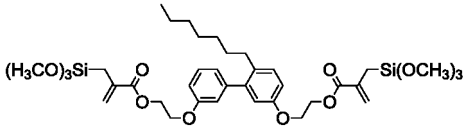
No.

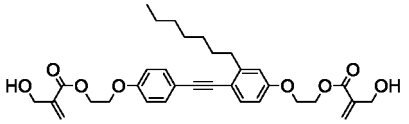
1γ-4-51 

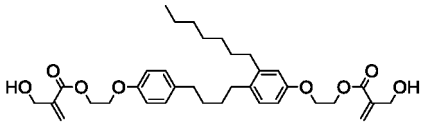
1γ-4-52 

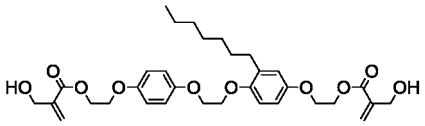
1γ-4-53 

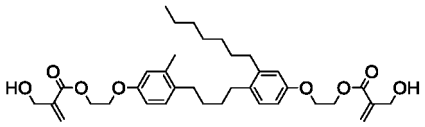
1γ-4-54 

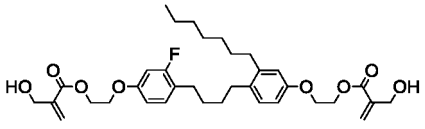
1γ-4-55 

1γ-4-56 

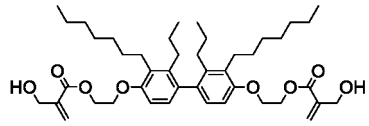
1γ-4-57 

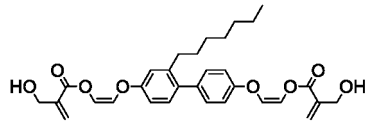
1γ-4-58 

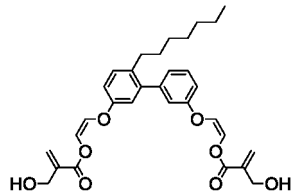
1γ-4-59 

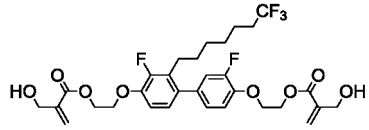
1γ-4-60 

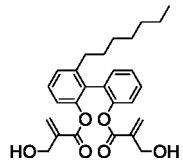
No.

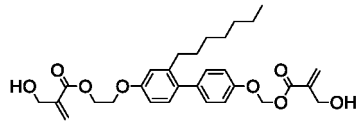
1γ-4-61 

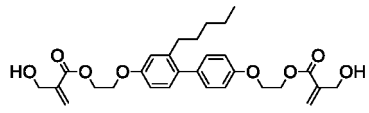
1γ-4-62 

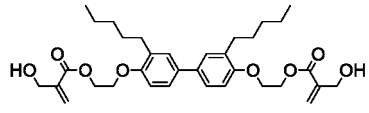
1γ-4-63 

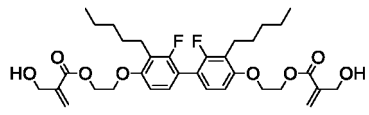
1γ-4-64 

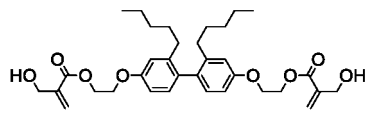
1γ-4-65 

1γ-4-66 

1γ-4-67 

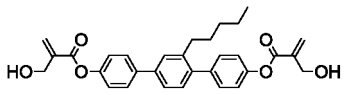
1γ-4-68 

1γ-4-69 

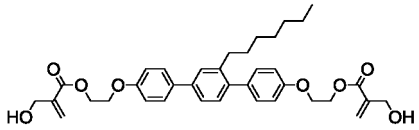
1γ-4-70 

No.

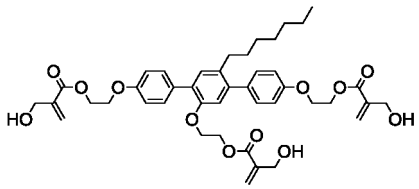
1γ-5-1



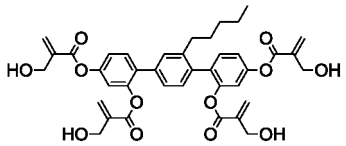
1γ-5-2



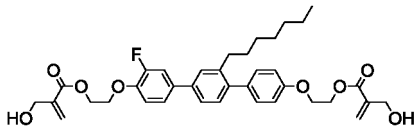
1γ-5-3



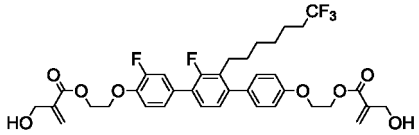
1γ-5-4



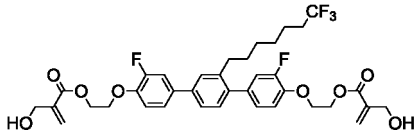
1γ-5-5



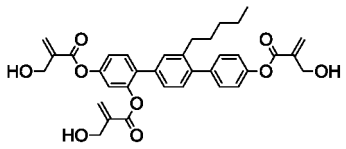
1γ-5-6



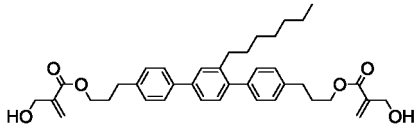
1γ-5-7



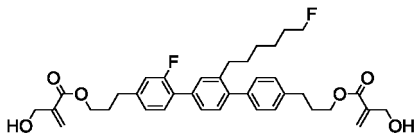
1γ-5-8



1γ-5-9

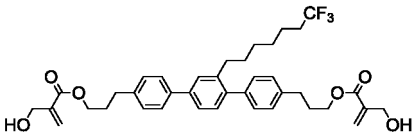


1γ-5-10

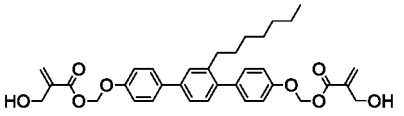


No.

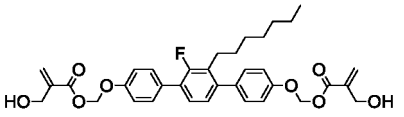
1γ-5-11



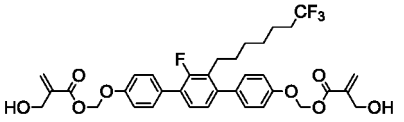
1γ-5-12



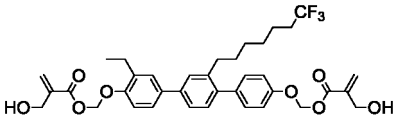
1γ-5-13



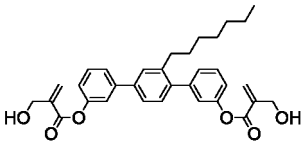
1γ-5-14



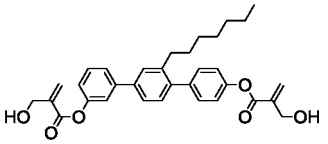
1γ-5-15



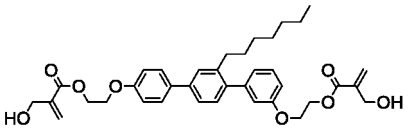
1γ-5-16



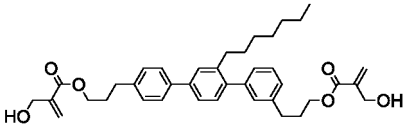
1γ-5-17



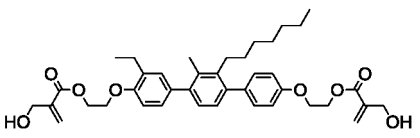
1γ-5-18



1γ-5-19

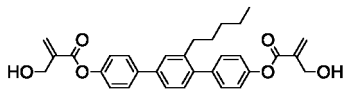


1γ-5-20

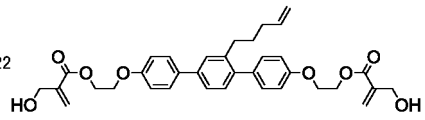


No.

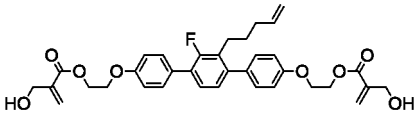
1γ-5-21



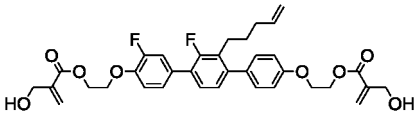
1γ-5-22



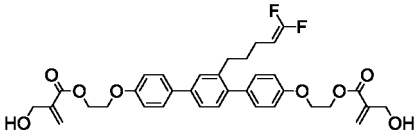
1γ-5-23



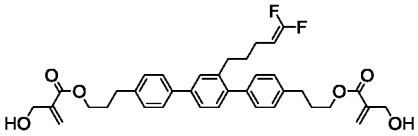
1γ-5-24



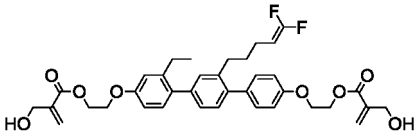
1γ-5-25



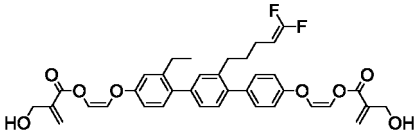
1γ-5-26



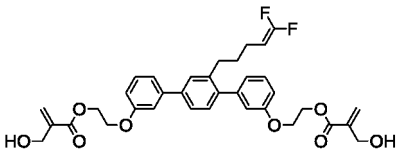
1γ-5-27



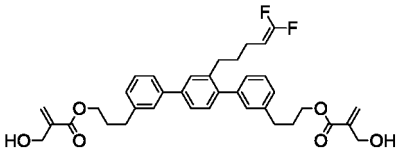
1γ-5-28



1γ-5-29

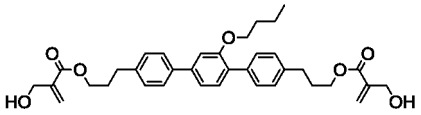


1γ-5-30

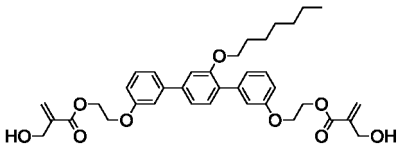


No.

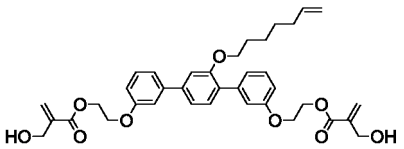
1γ-5-31



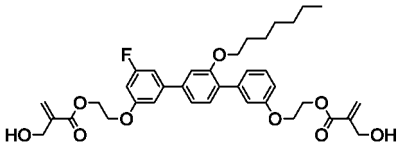
1γ-5-32



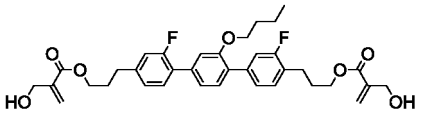
1γ-5-33



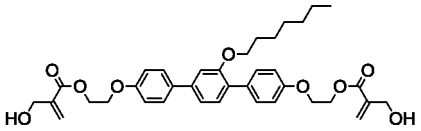
1γ-5-34



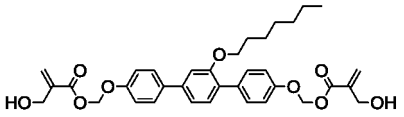
1γ-5-35



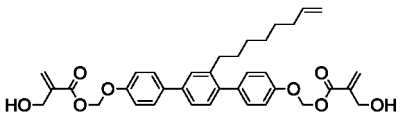
1γ-5-36



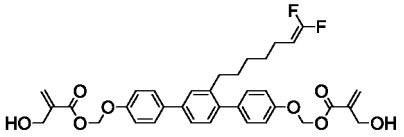
1γ-5-37



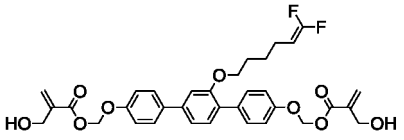
1γ-5-38



1γ-5-39

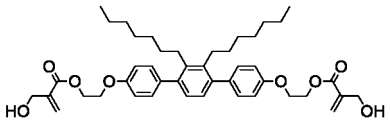


1γ-5-40

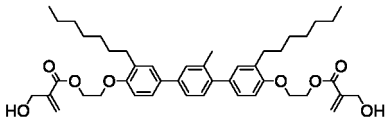


No.

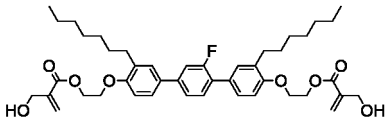
1γ-5-41



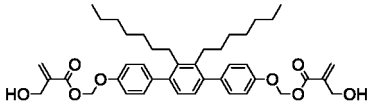
1γ-5-42



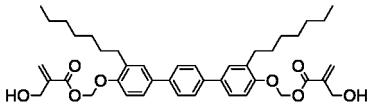
1γ-5-43



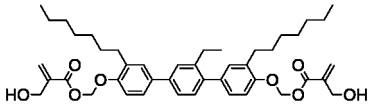
1γ-5-44



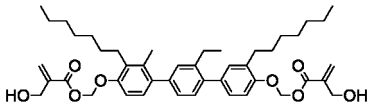
1γ-5-45



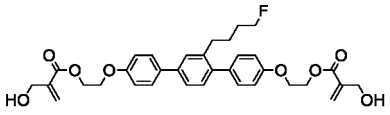
1γ-5-46



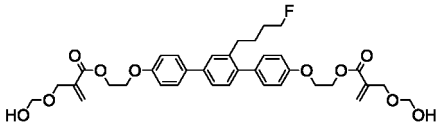
1γ-5-47



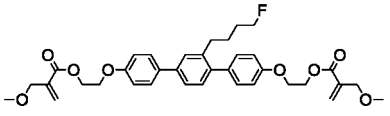
1γ-5-48



1γ-5-49

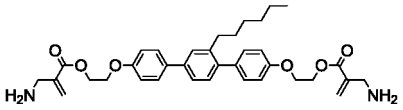


1γ-5-50

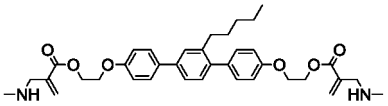


No.

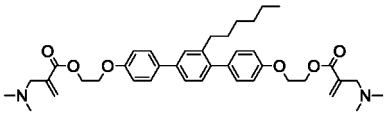
1γ-5-51



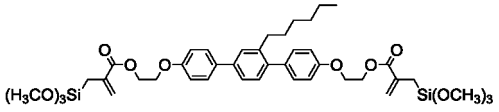
1γ-5-52



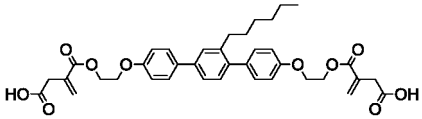
1γ-5-53



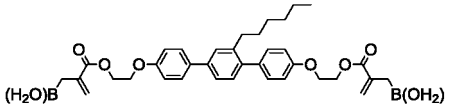
1γ-5-54



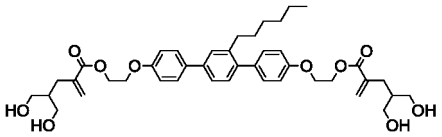
1γ-5-55



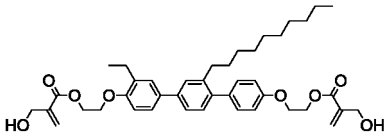
1γ-5-56



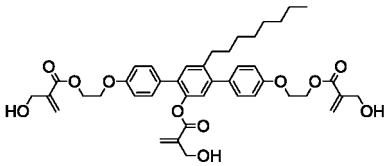
1γ-5-57



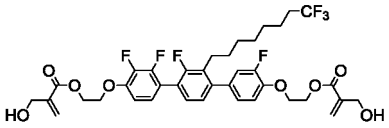
1γ-5-58



1γ-5-59

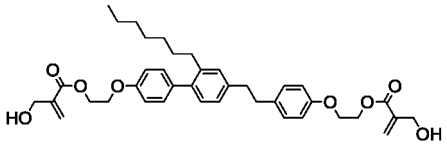


1γ-5-60

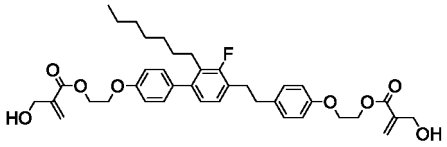


No.

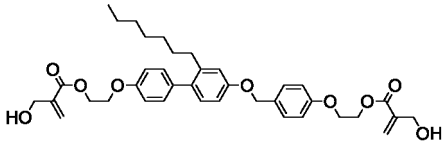
1γ-5-61



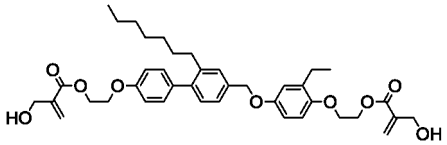
1γ-5-62



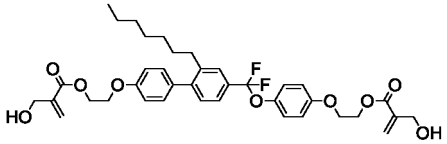
1γ-5-63



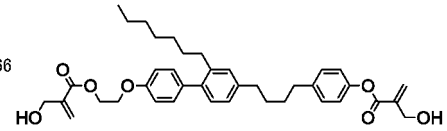
1γ-5-64



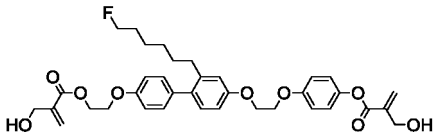
1γ-5-65



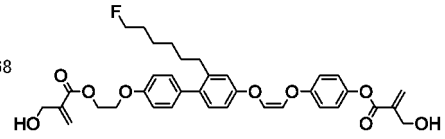
1γ-5-66



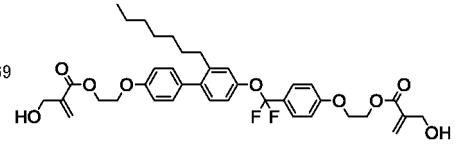
1γ-5-67



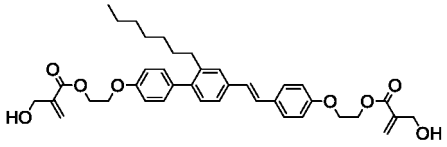
1γ-5-68



1γ-5-69

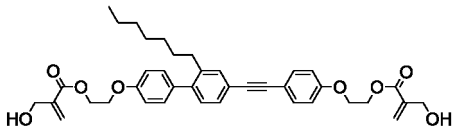


1γ-5-70

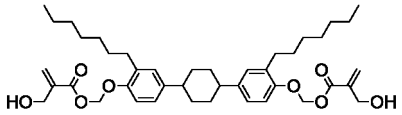


No.

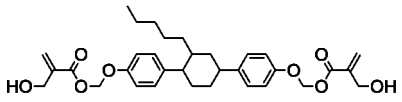
1γ-5-71



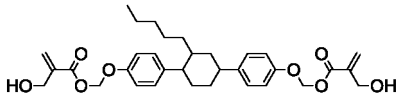
1γ-5-72



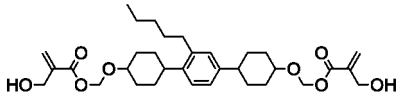
1γ-5-73



1γ-5-74

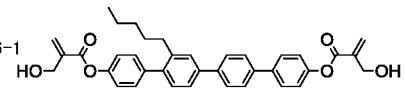


1γ-5-75

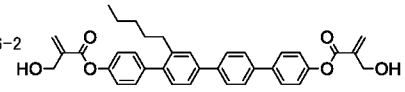


No.

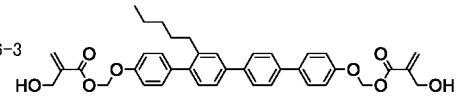
1γ-6-1



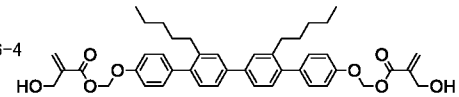
1γ-6-2



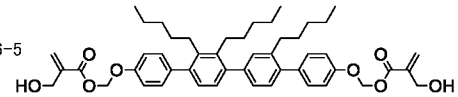
1γ-6-3



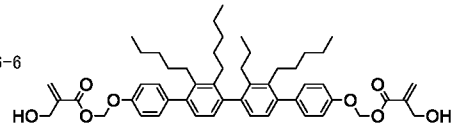
1γ-6-4



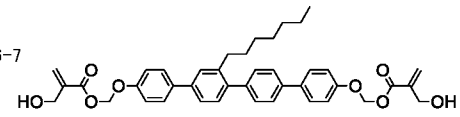
1γ-6-5



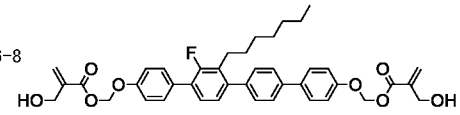
1γ-6-6



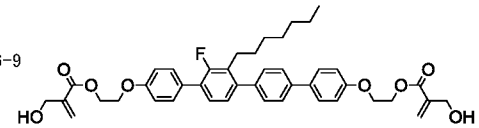
1γ-6-7



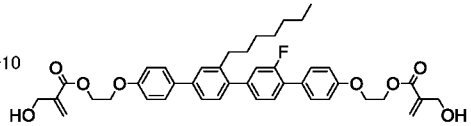
1γ-6-8



1γ-6-9

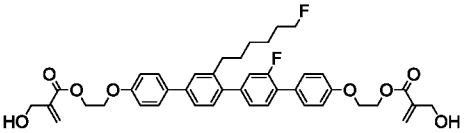


1γ-6-10

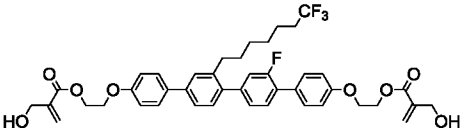


No.

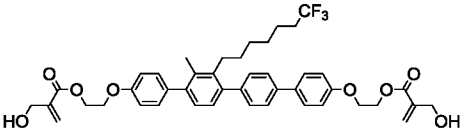
1γ-6-11



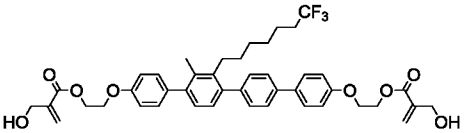
1γ-6-12



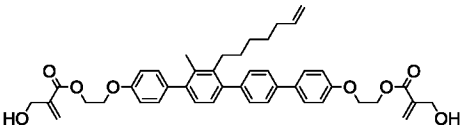
1γ-6-13



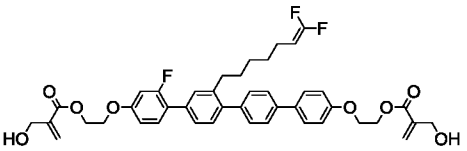
1γ-6-14



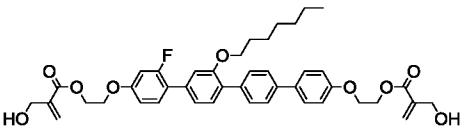
1γ-6-15



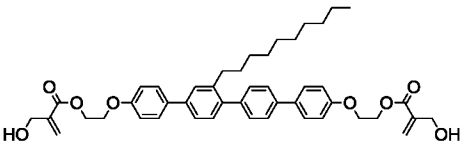
1γ-6-16



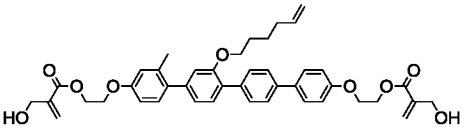
1γ-6-17



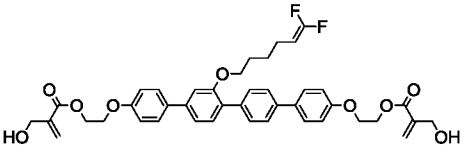
1γ-6-18



1γ-6-19

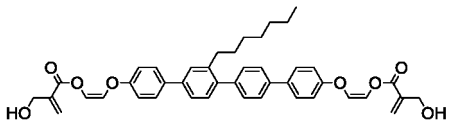


1γ-6-20

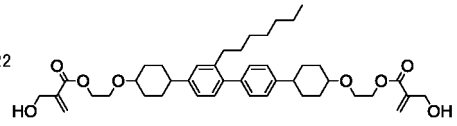


No.

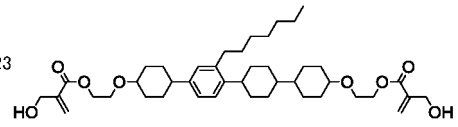
1γ-6-21



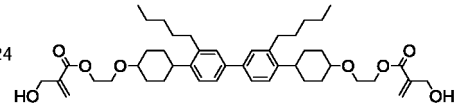
1γ-6-22



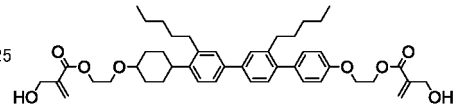
1γ-6-23



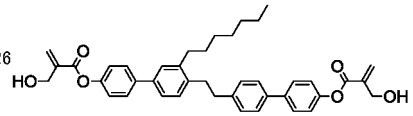
1γ-6-24



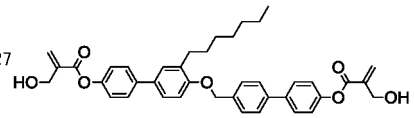
1γ-6-25



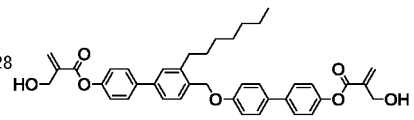
1γ-6-26



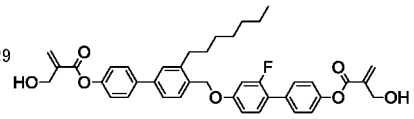
1γ-6-27



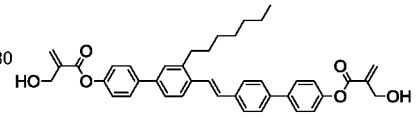
1γ-6-28



1γ-6-29

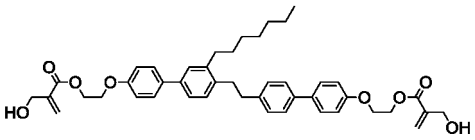


1γ-6-30

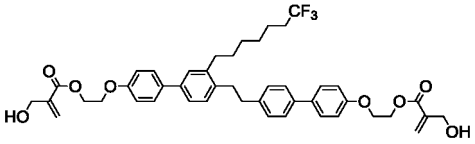


No.

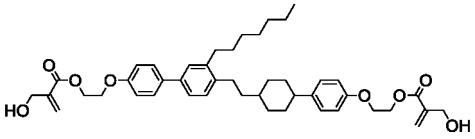
1γ-6-31



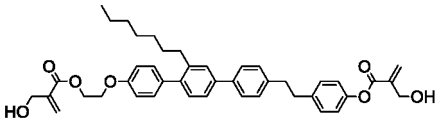
1γ-6-32



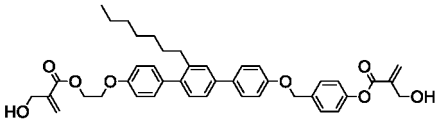
1γ-6-33



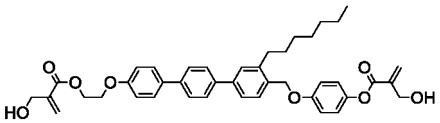
1γ-6-34



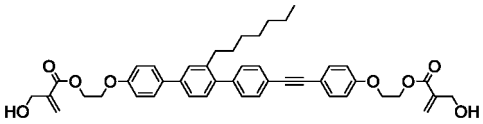
1γ-6-35



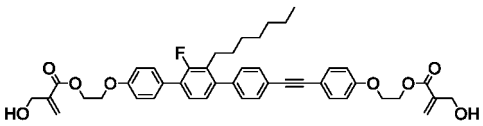
1γ-6-36



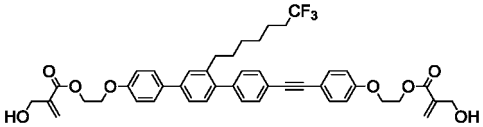
1γ-6-37



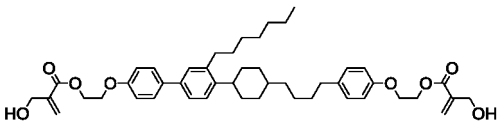
1γ-6-38



1γ-6-39

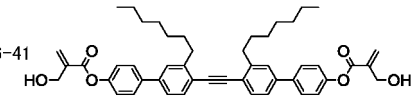


1γ-6-40

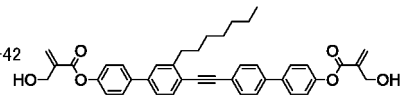


No.

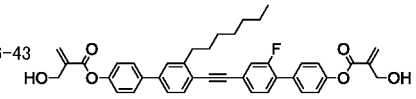
1γ-6-41



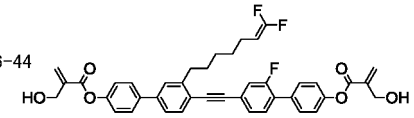
1γ-6-42



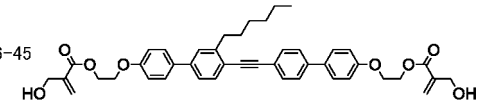
1γ-6-43



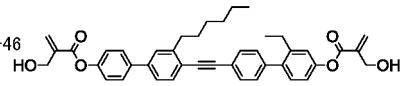
1γ-6-44



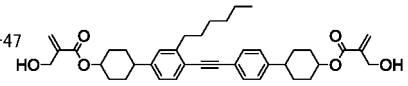
1γ-6-45



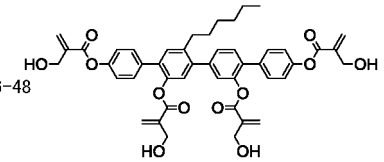
1γ-6-46



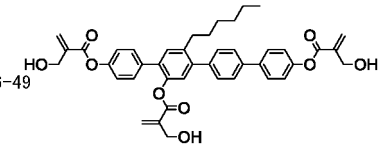
1γ-6-47



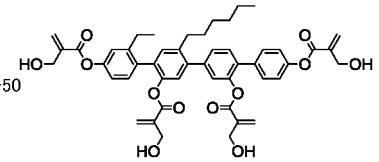
1γ-6-48



1γ-6-49

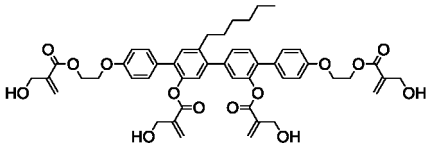


1γ-6-50

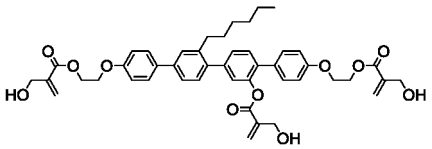


No.

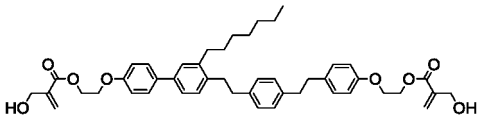
1γ-6-51



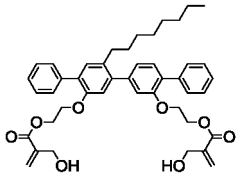
1γ-6-52



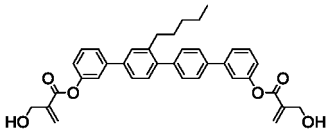
1γ-6-53



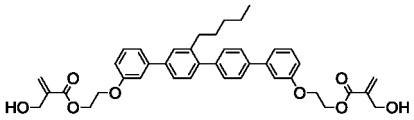
1γ-6-54



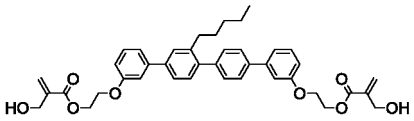
1γ-6-55



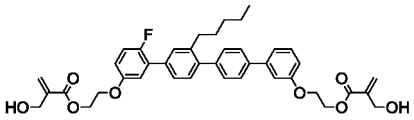
1γ-6-56



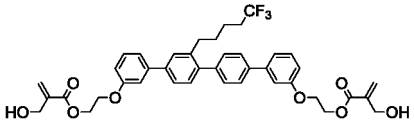
1γ-6-57



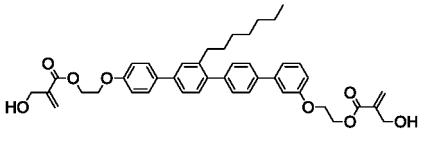
1γ-6-58



1γ-6-59



1γ-6-60



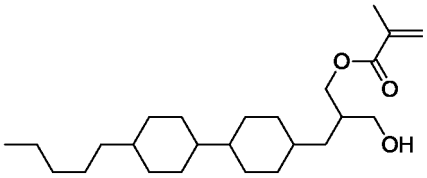
【０６５０】

［１７．化合物（１δ）の例示］

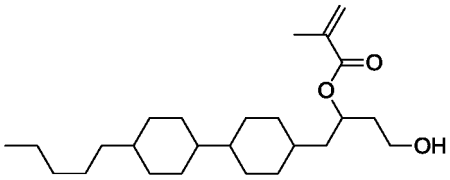
合成例に記載した合成法に準じて、以下の化合物（１δ－１－１）～（１δ－１－１３）を合成することが可能である。

No.

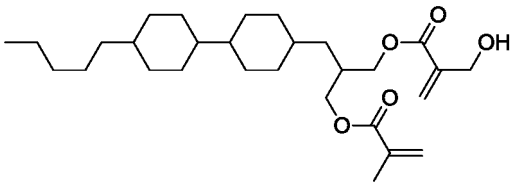
1δ-1-1



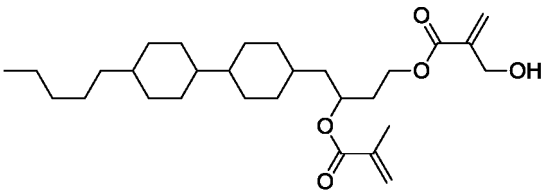
1δ-1-2



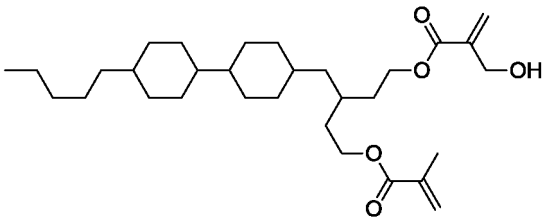
1δ-1-3



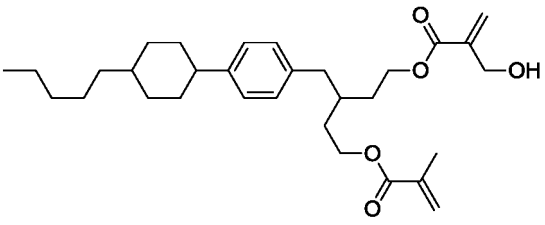
1δ-1-4



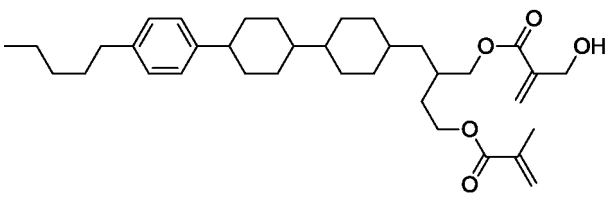
1δ-1-5



1δ-1-6

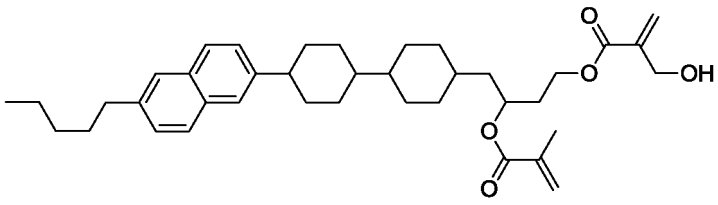


1δ-1-7

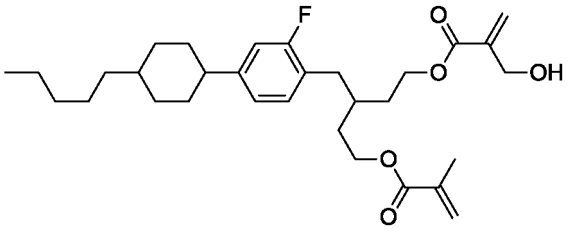


No.

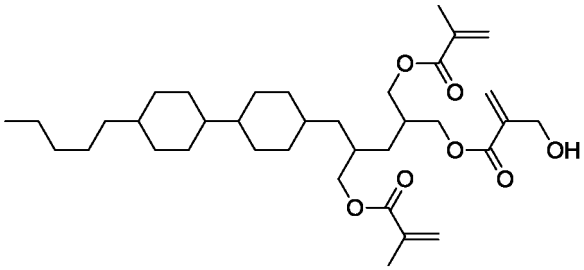
1δ-1-8



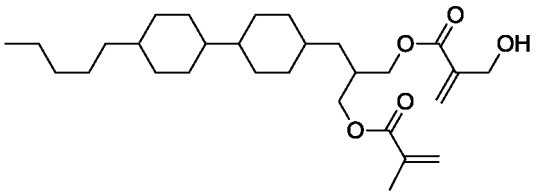
1δ-1-9



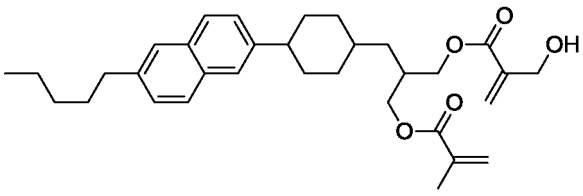
1δ-1-10



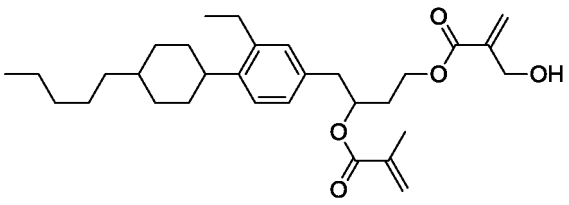
1δ-1-11



1δ-1-12



1δ-1-13



【０６５１】

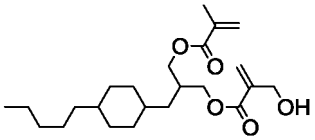
［１８．化合物（１ε）の例示］

合成例に記載した合成法に準じて、以下の化合物（１ε－１－１）から（１ε－１－２

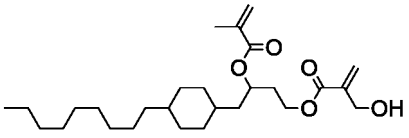
０）、化合物（１ε－２－１）から（１ε－２－１８０）、化合物（１ε－３－１）から（１ε－３－１４０）、化合物（１ε－４－１）から（１ε－４－１３４）、（１ε－５－１）から（１ε－５－２０）、化合物（１ε－６－１）から（１ε－６－１８０）、化合物（１ε－７－１）から（１ε－７－１４０）、化合物（１ε－８－１）から（１ε－８－１３４）、化合物（１ε－９－１）から（１ε－９－４０）、化合物（１ε－１０－１）から（１ε－１０－２００）、化合物（１ε－１１－１）から（１ε－１１－１４０）、および化合物（１ε－１２－１）から（１ε－１２－１００）を合成することが可能である。

No.

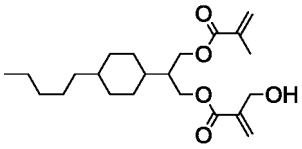
1ε-1-1



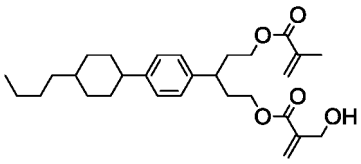
1ε-1-2



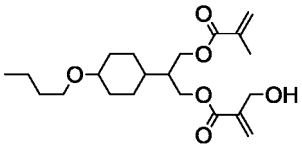
1ε-1-3



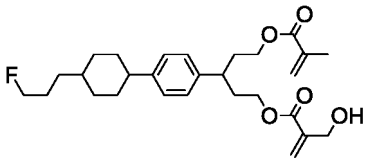
1ε-1-4



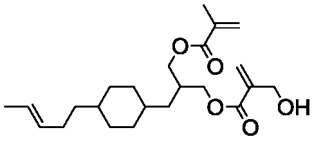
1ε-1-5



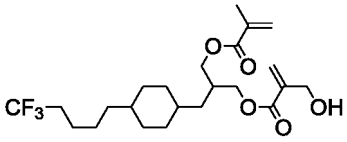
1ε-1-6



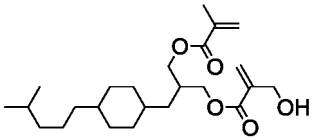
1ε-1-7



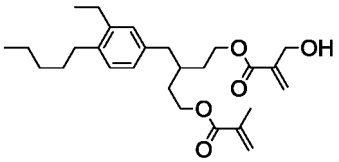
1ε-1-8



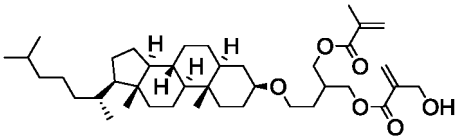
1ε-1-9



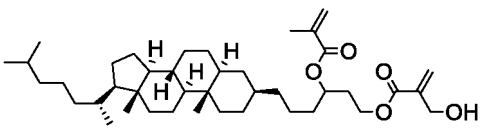
1ε-1-10



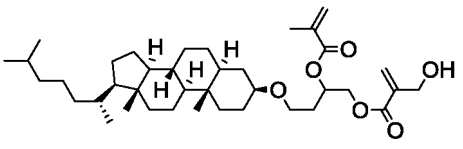
1ε-1-11



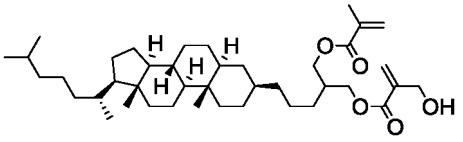
1ε-1-12



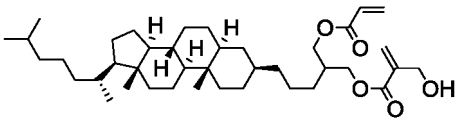
1ε-1-13



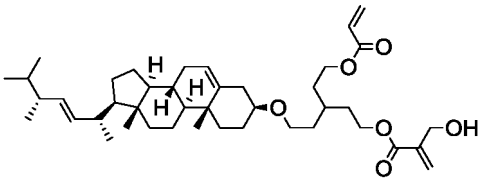
1ε-1-14



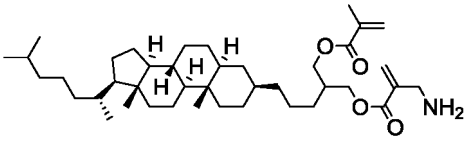
1ε-1-15



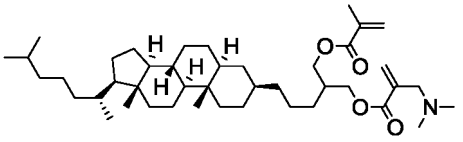
1ε-1-16



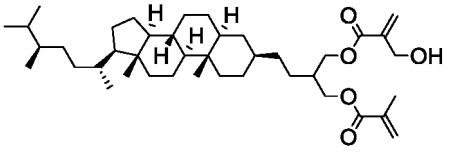
1ε-1-17



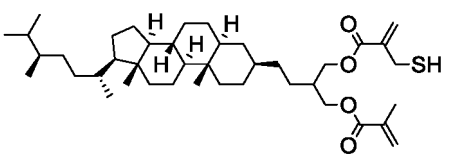
1ε-1-18



1ε-1-19

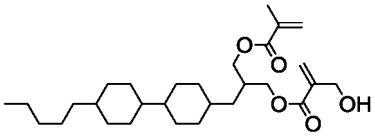


1ε-1-20

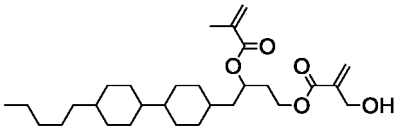


No.

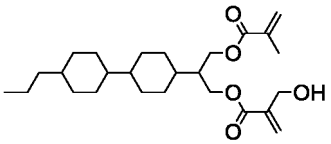
1ε-2-1



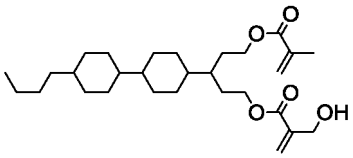
1ε-2-2



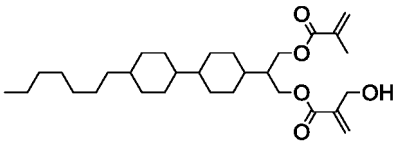
1ε-2-3



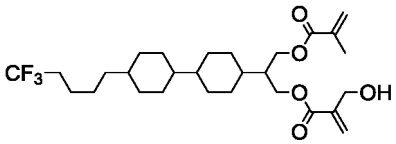
1ε-2-4



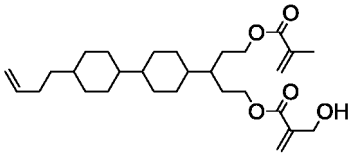
1ε-2-5



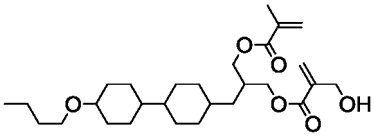
1ε-2-6



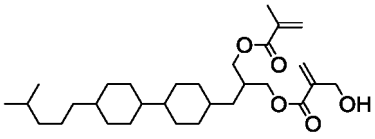
1ε-2-7



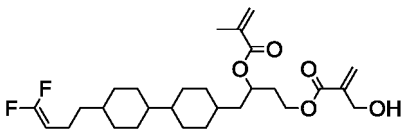
1ε-2-8



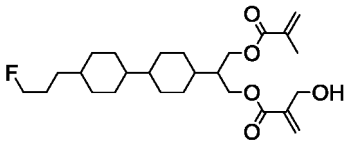
1ε-2-9



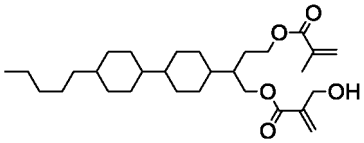
1ε-2-10



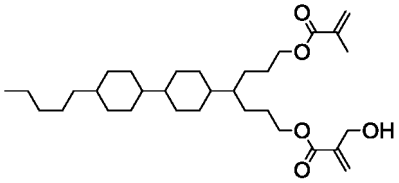
1ε-2-11



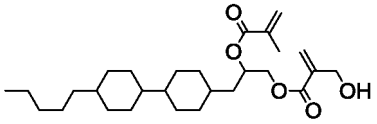
1ε-2-12



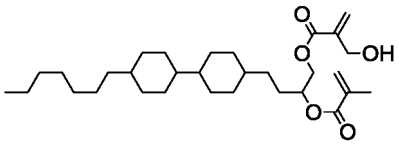
1ε-2-13



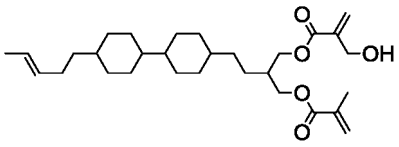
1ε-2-14



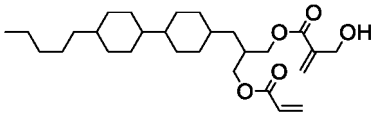
1ε-2-15



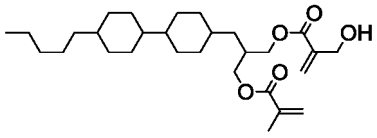
1ε-2-16



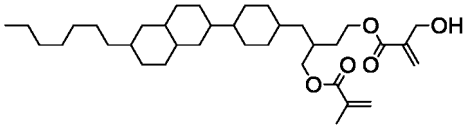
1ε-2-17



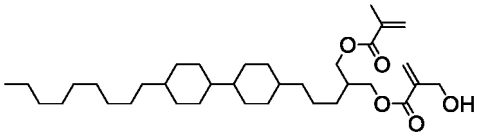
1ε-2-18



1ε-2-19

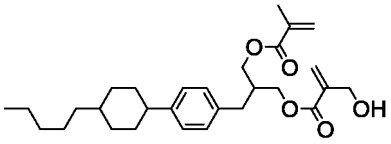


1ε-2-20

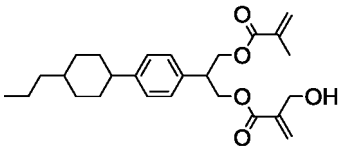


No.

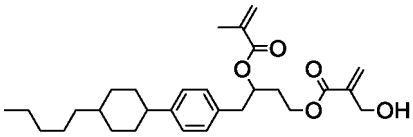
1ε-2-21



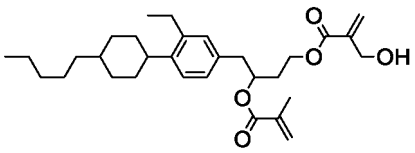
1ε-2-22



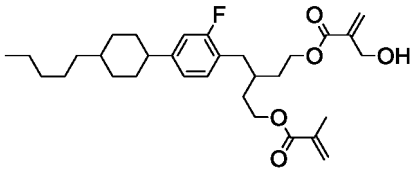
1ε-2-23



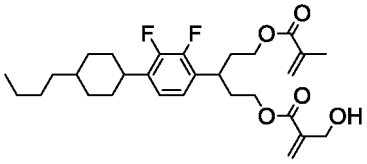
1ε-2-24



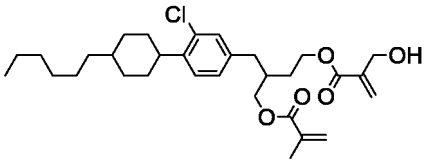
1ε-2-25



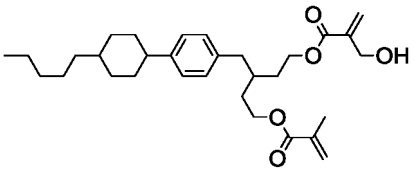
1ε-2-26



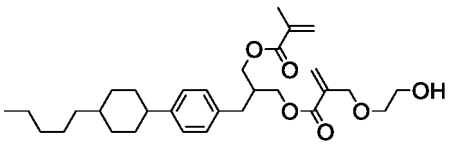
1ε-2-27



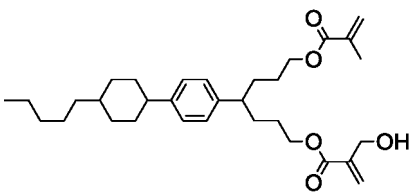
1ε-2-28



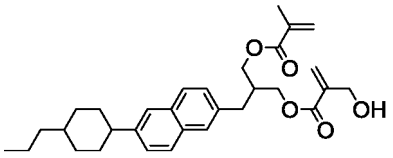
1ε-2-29



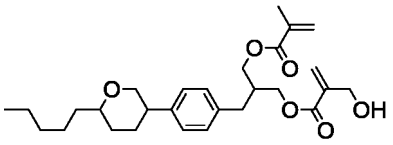
1ε-2-30



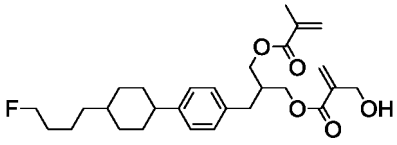
1ε-2-31



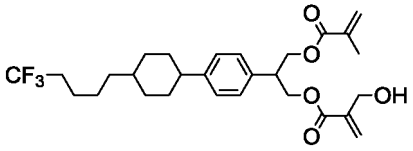
1ε-2-32



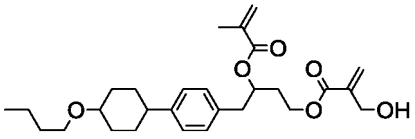
1ε-2-33



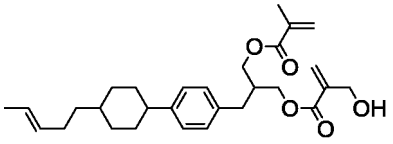
1ε-2-34



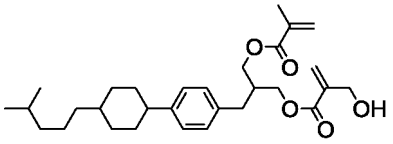
1ε-2-35



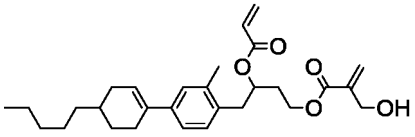
1ε-2-36



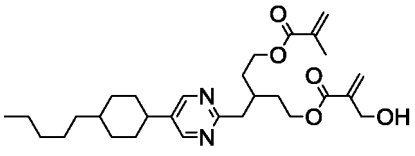
1ε-2-37



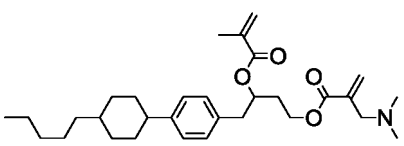
1ε-2-38



1ε-2-39

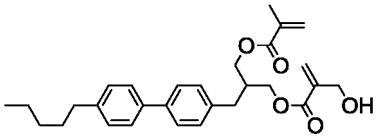


1ε-2-40

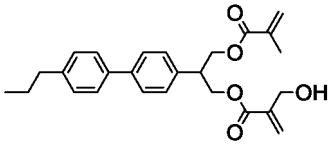


No.

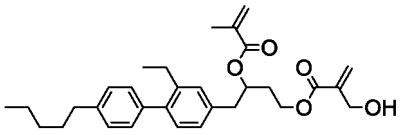
1ε-2-41



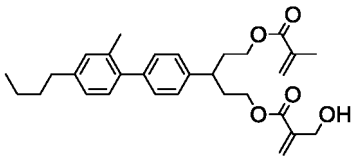
1ε-2-42



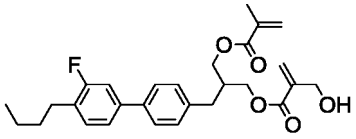
1ε-2-43



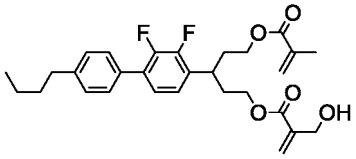
1ε-2-44



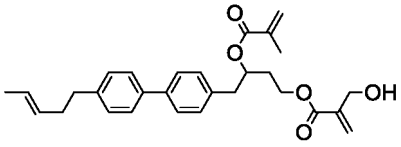
1ε-2-45



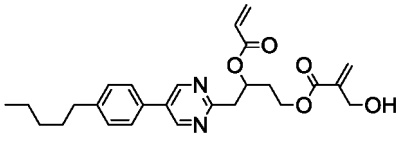
1ε-2-46



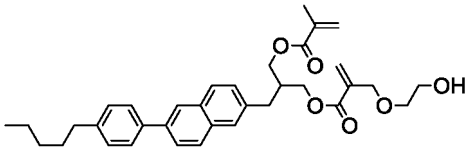
1ε-2-47



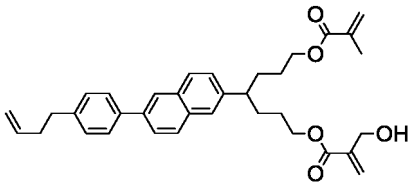
1ε-2-48



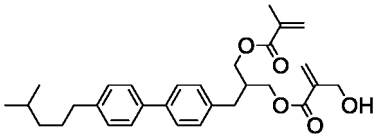
1ε-2-49



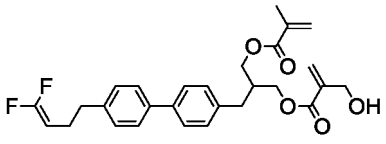
1ε-2-50



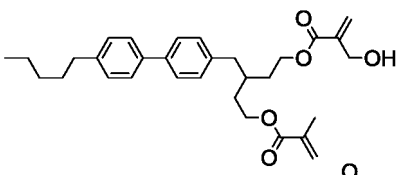
1ε-2-51



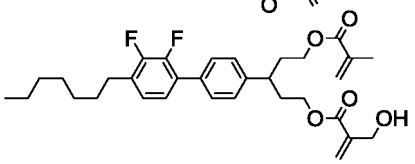
1ε-2-52



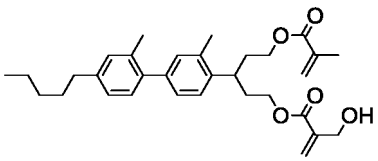
1ε-2-53



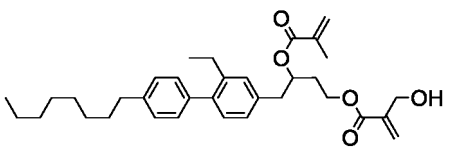
1ε-2-54



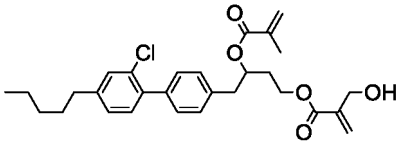
1ε-2-55



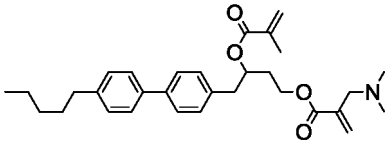
1ε-2-56



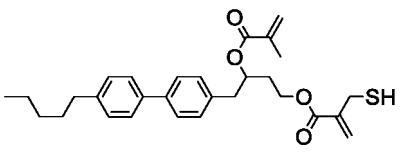
1ε-2-57



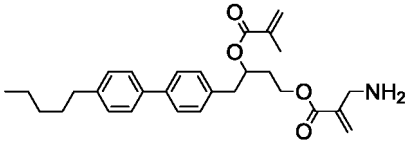
1ε-2-58



1ε-2-59

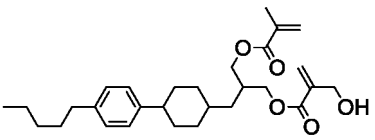


1ε-2-60

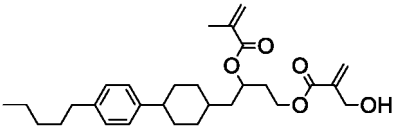


No.

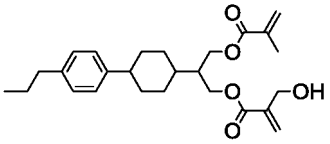
1ε-2-61



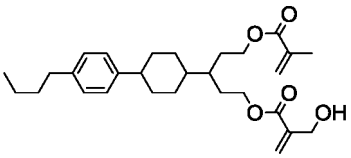
1ε-2-62



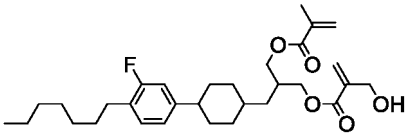
1ε-2-63



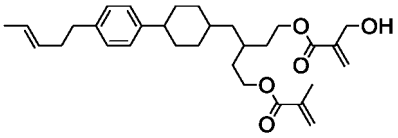
1ε-2-64



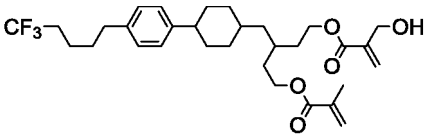
1ε-2-65



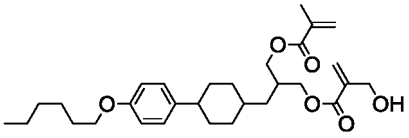
1ε-2-66



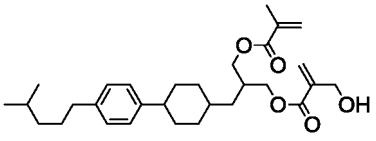
1ε-2-67



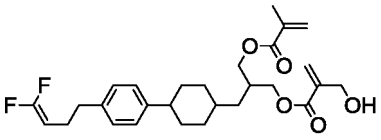
1ε-2-68



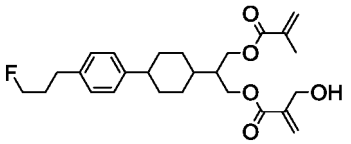
1ε-2-69



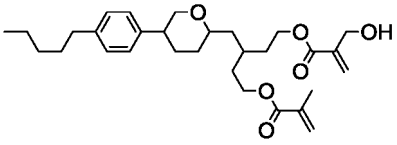
1ε-2-70



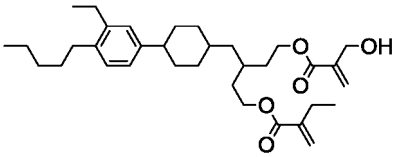
1ε-2-71



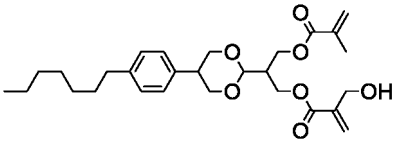
1ε-2-72



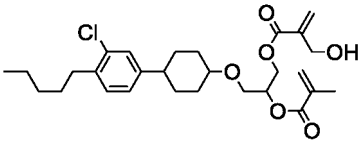
1ε-2-73



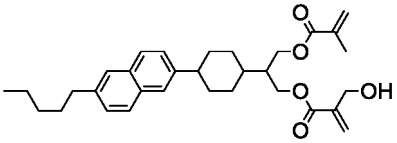
1ε-2-74



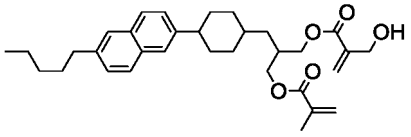
1ε-2-75



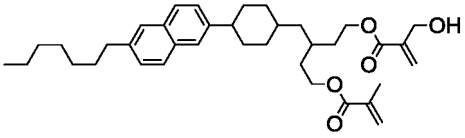
1ε-2-76



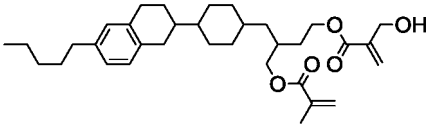
1ε-2-77



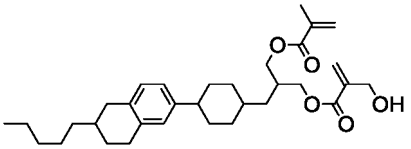
1ε-2-78



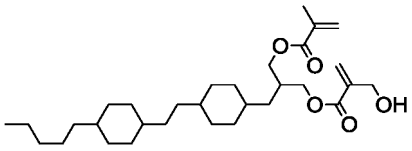
1ε-2-79

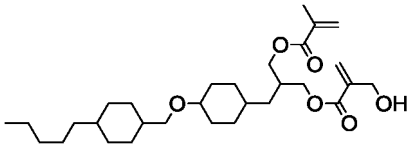


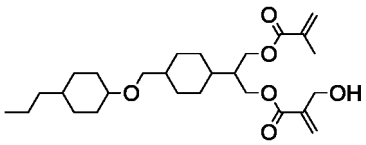
1ε-2-80

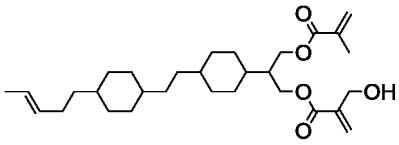


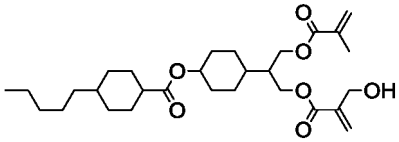
No.

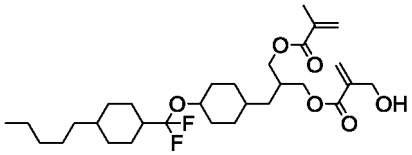
1ε-2-81 

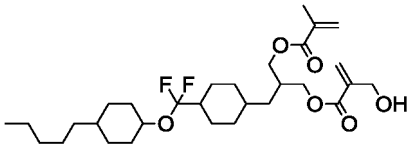
1ε-2-82 

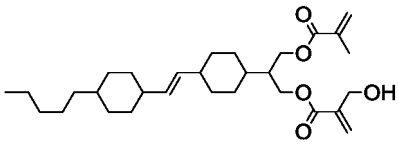
1ε-2-83 

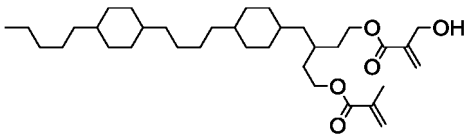
1ε-2-84 

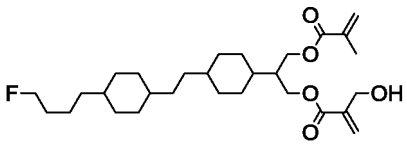
1ε-2-85 

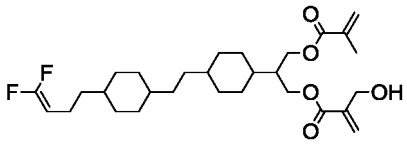
1ε-2-86 

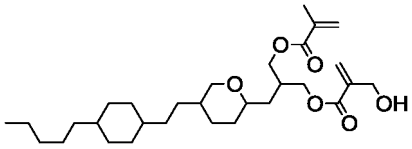
1ε-2-87 

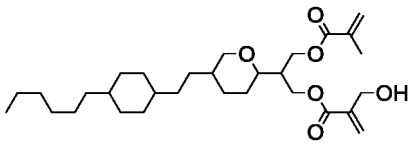
1ε-2-88 

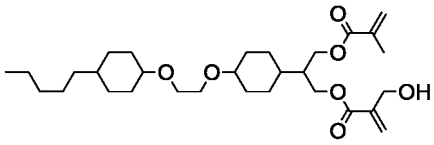
1ε-2-89 

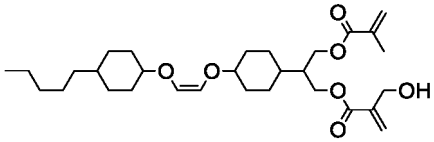
1ε-2-90 

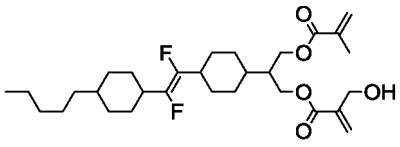
1ε-2-91 

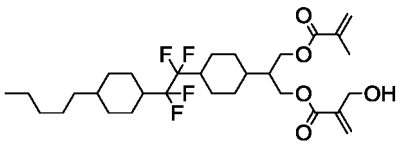
1ε-2-92 

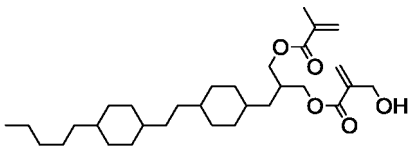
1ε-2-93 

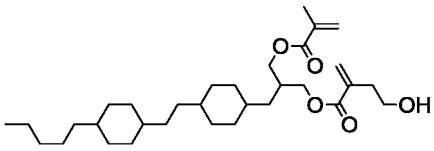
1ε-2-94 

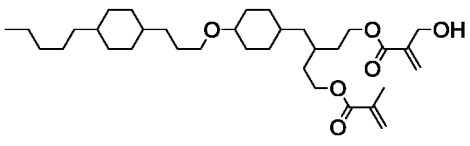
1ε-2-95 

1ε-2-96 

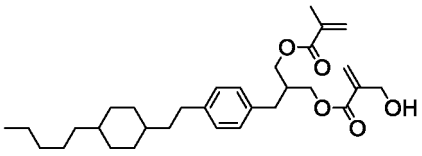
1ε-2-97 

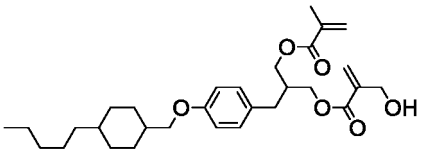
1ε-2-98 

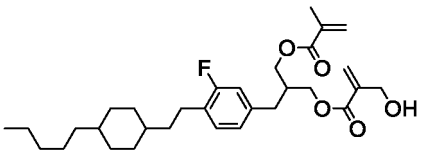
1ε-2-99 

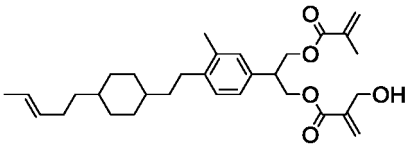
1ε-2-100 

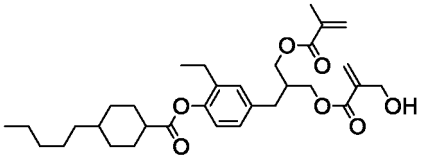
No.

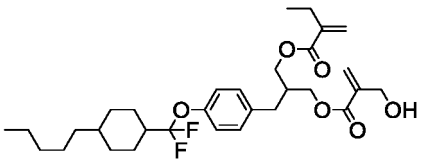
1ε-2-101 

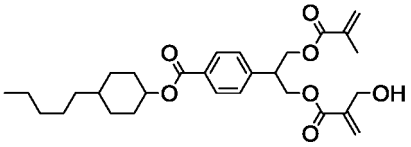
1ε-2-102 

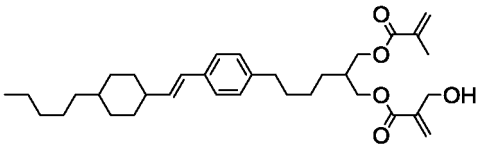
1ε-2-103 

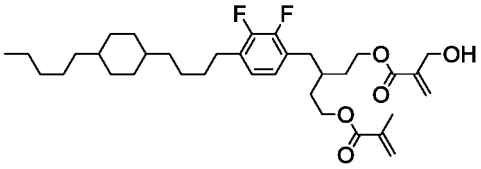
1ε-2-104 

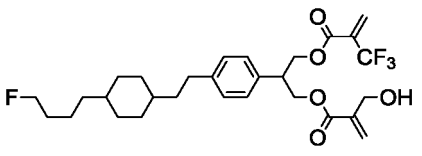
1ε-2-105 

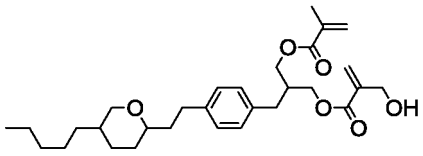
1ε-2-106 

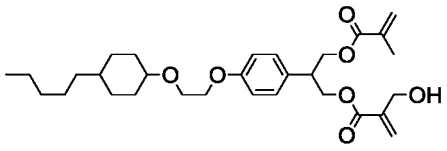
1ε-2-107 

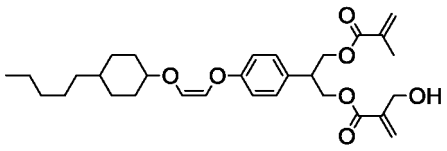
1ε-2-108 

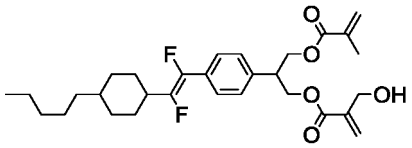
1ε-2-109 

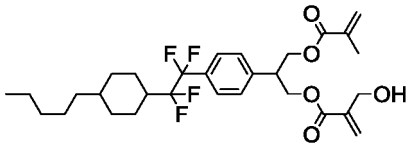
1ε-2-110 

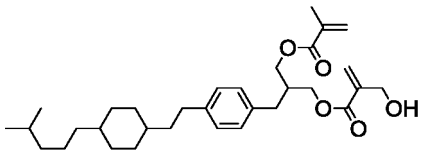
1ε-2-111 

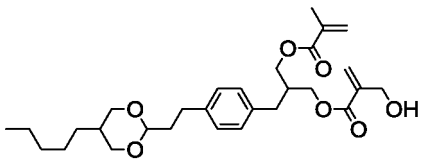
1ε-2-112 

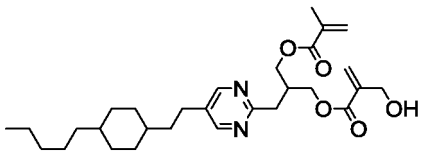
1ε-2-113 

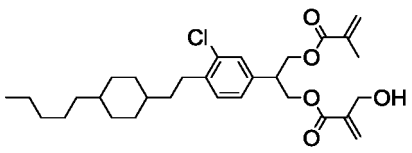
1ε-2-114 

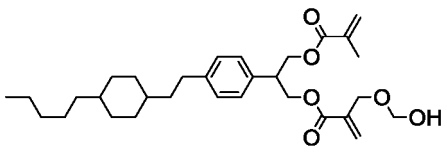
1ε-2-115 

1ε-2-116 

1ε-2-117 

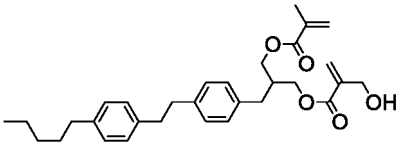
1ε-2-118 

1ε-2-119 

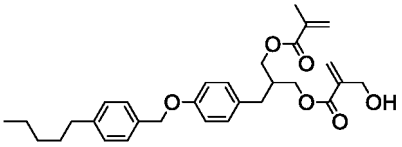
1ε-2-120 

No.

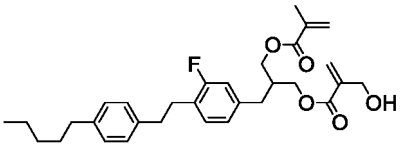
1ε-2-121



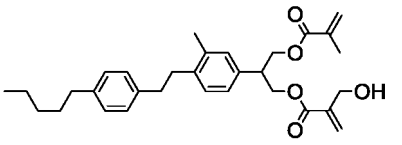
1ε-2-122



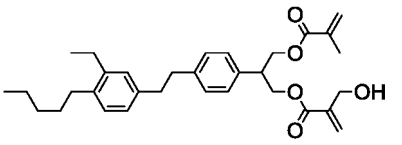
1ε-2-123



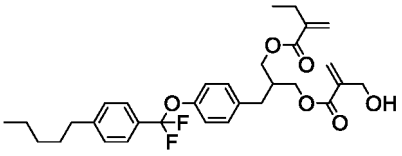
1ε-2-124



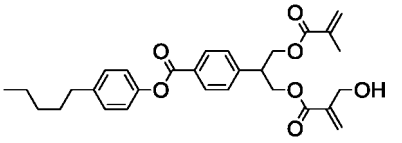
1ε-2-125



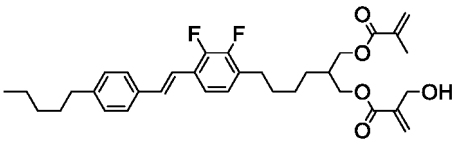
1ε-2-126



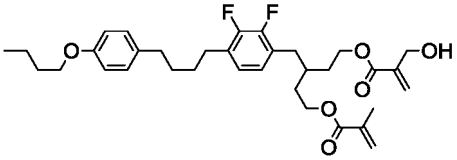
1ε-2-127



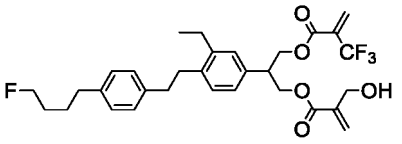
1ε-2-128



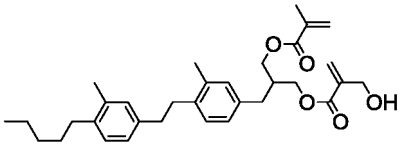
1ε-2-129



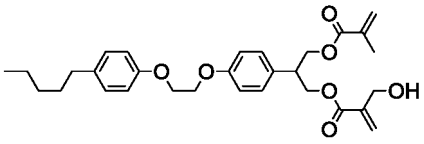
1ε-2-130



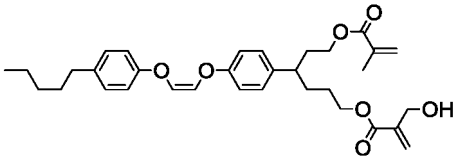
1ε-2-131



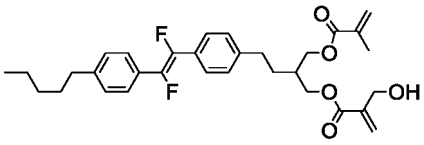
1ε-2-132



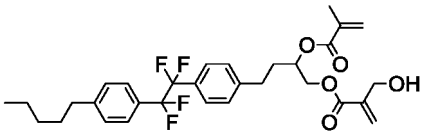
1ε-2-133



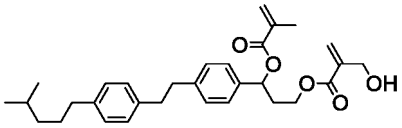
1ε-2-134



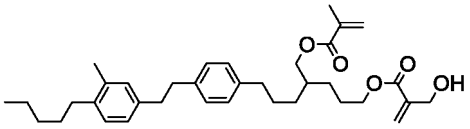
1ε-2-135



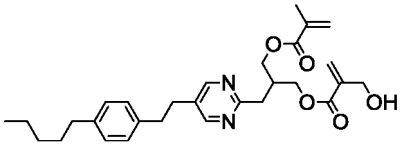
1ε-2-136



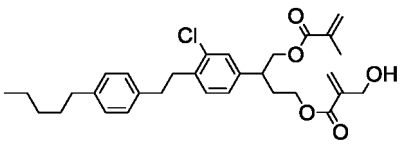
1ε-2-137



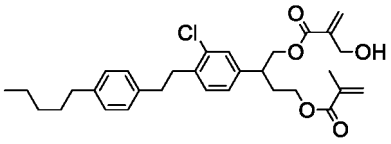
1ε-2-138



1ε-2-139

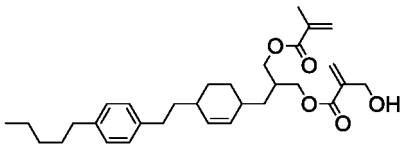


1ε-2-140

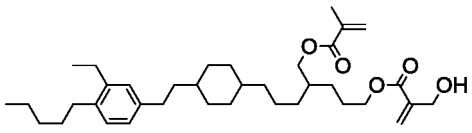


No.

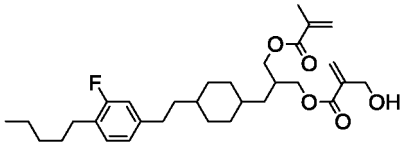
1ε-2-141



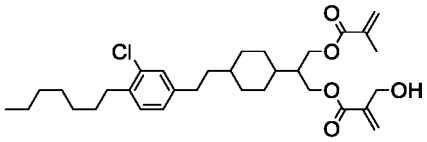
1ε-2-142



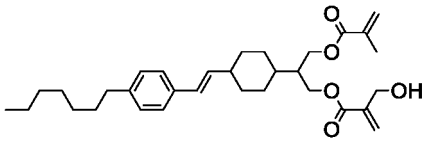
1ε-2-143



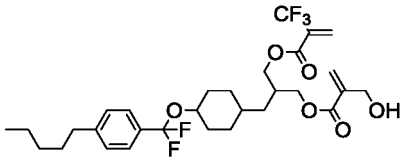
1ε-2-144



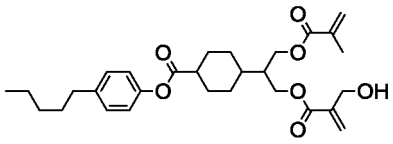
1ε-2-145



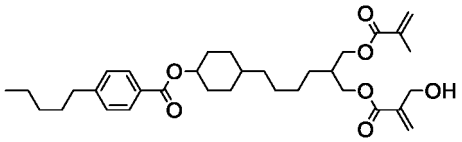
1ε-2-146



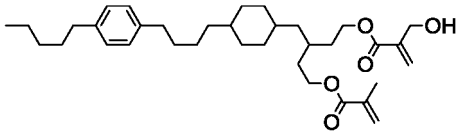
1ε-2-147



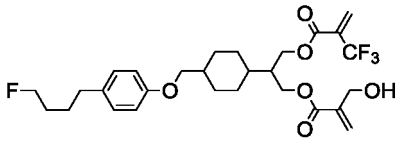
1ε-2-148



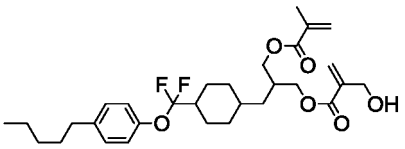
1ε-2-149



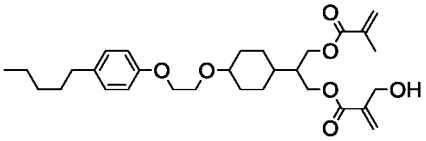
1ε-2-150



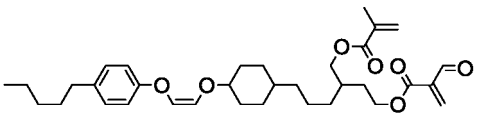
1ε-2-151



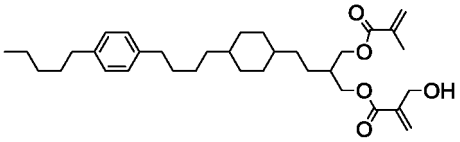
1ε-2-152



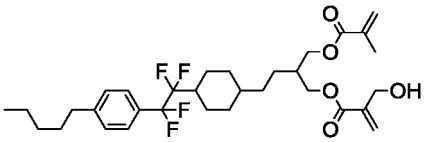
1ε-2-153



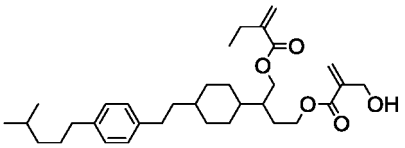
1ε-2-154



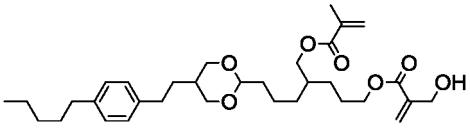
1ε-2-155



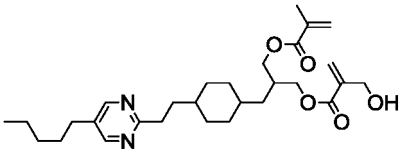
1ε-2-156



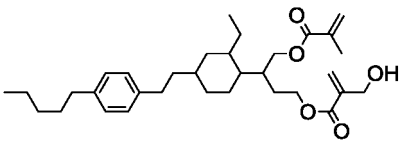
1ε-2-157



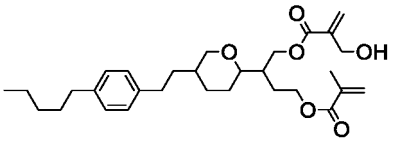
1ε-2-158



1ε-2-159

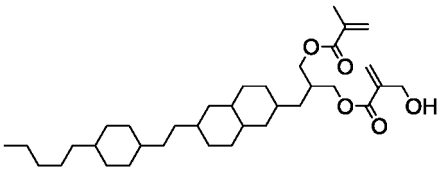


1ε-2-160

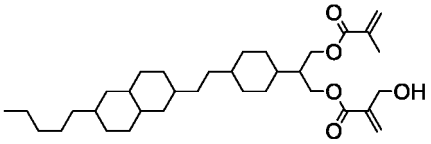


No.

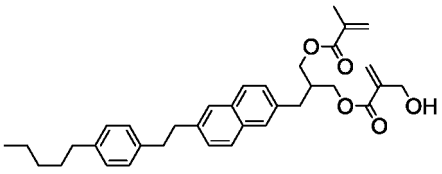
1ε-2-161



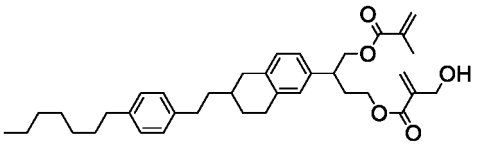
1ε-2-162



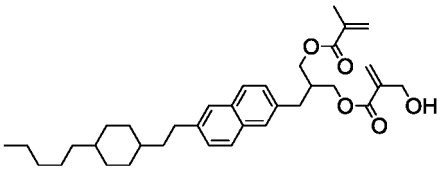
1ε-2-163



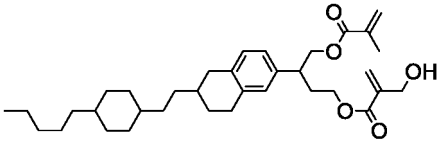
1ε-2-164



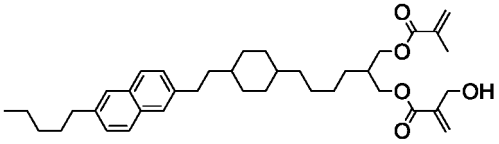
1ε-2-165



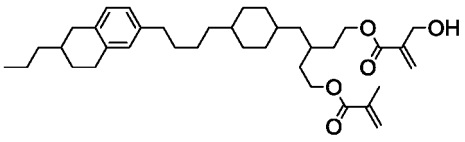
1ε-2-166



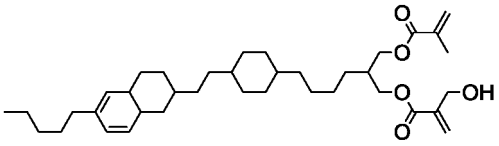
1ε-2-167



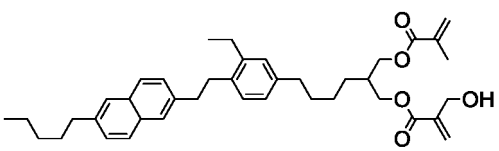
1ε-2-168



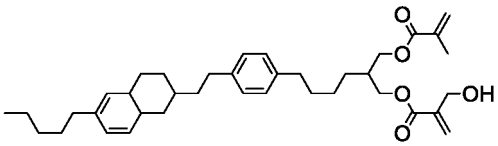
1ε-2-169



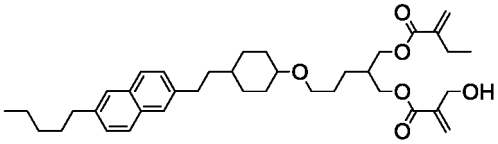
1ε-2-170



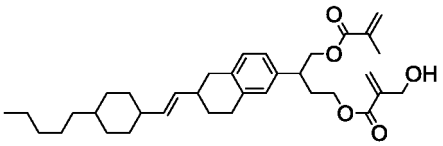
1ε-2-171



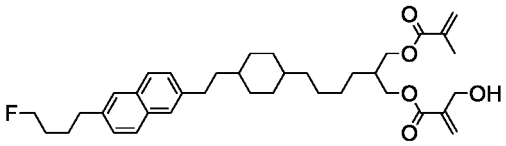
1ε-2-172



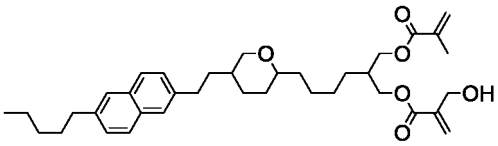
1ε-2-173



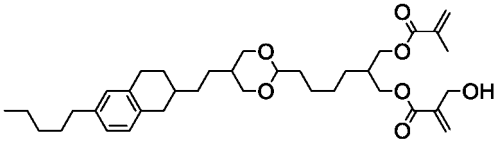
1ε-2-174



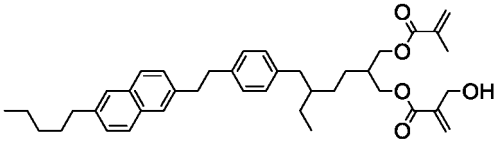
1ε-2-175



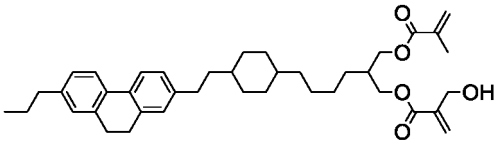
1ε-2-176



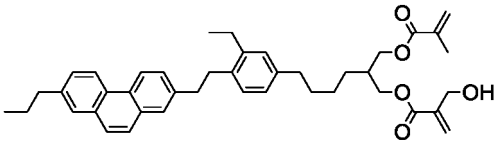
1ε-2-177



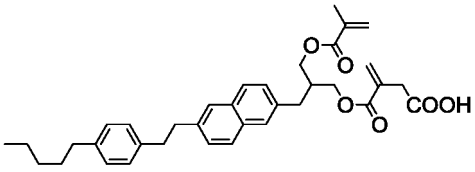
1ε-2-178



1ε-2-179

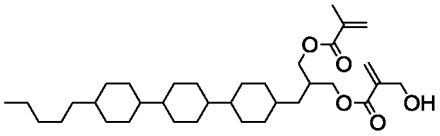


1ε-2-180

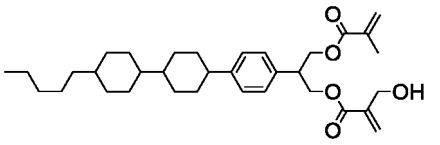


No.

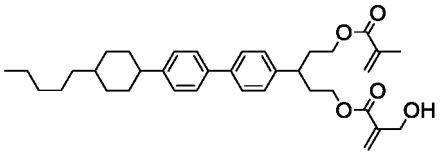
1ε-3-1



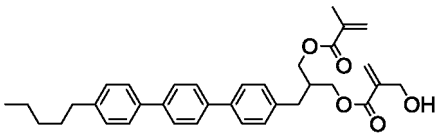
1ε-3-2



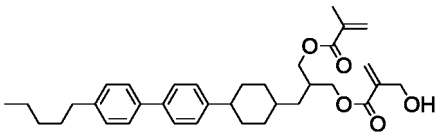
1ε-3-3



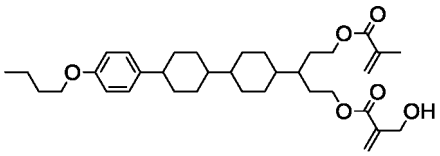
1ε-3-4



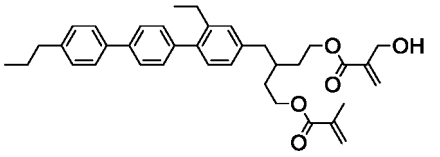
1ε-3-5



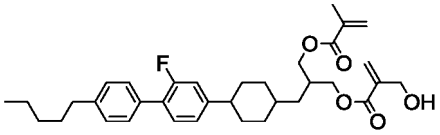
1ε-3-6



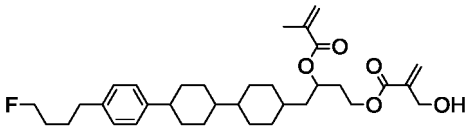
1ε-3-7



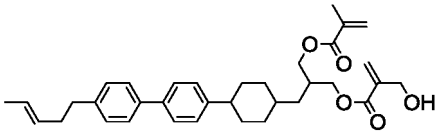
1ε-3-8



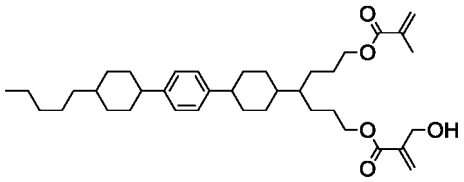
1ε-3-9



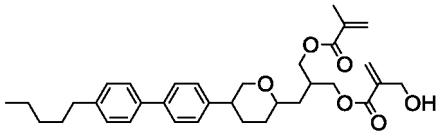
1ε-3-10



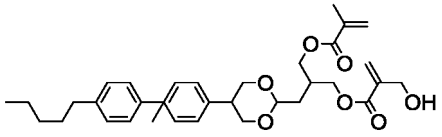
1ε-3-11



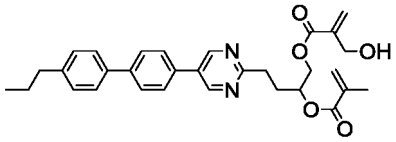
1ε-3-12



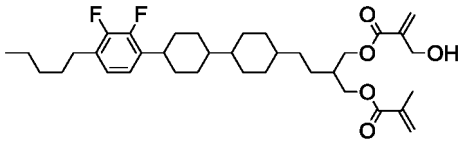
1ε-3-13



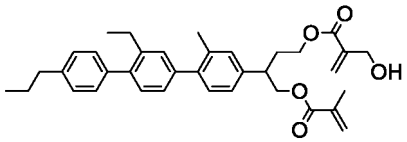
1ε-3-14



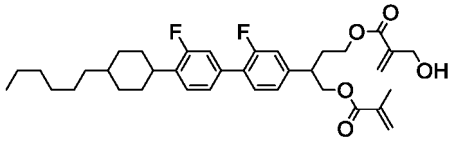
1ε-315



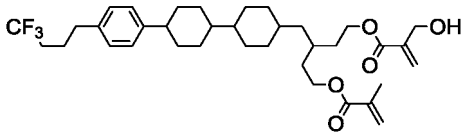
1ε-3-16



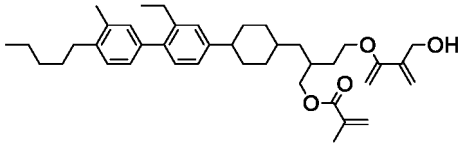
1ε-3-17



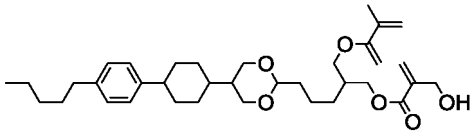
1ε-3-18



1ε-3-19

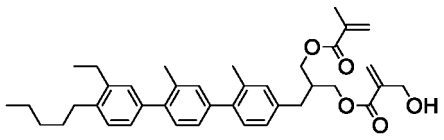


1ε-3-20

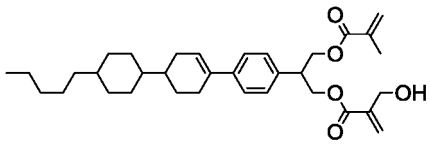


No.

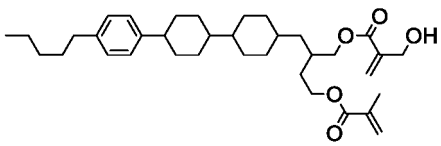
1ε-3-21



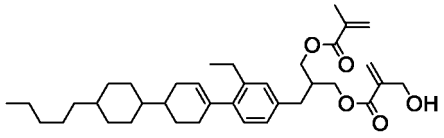
1ε-3-22



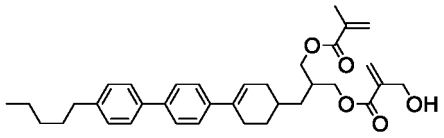
1ε-3-23



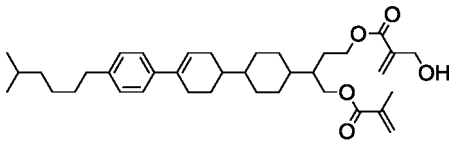
1ε-3-24



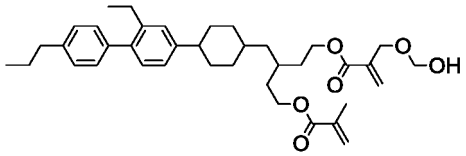
1ε-3-25



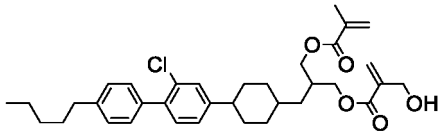
1ε-3-26



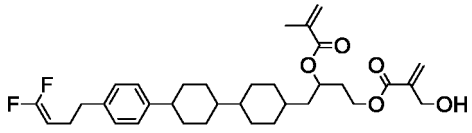
1ε-3-27



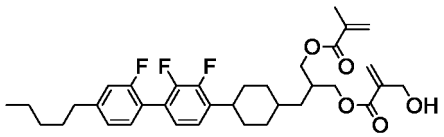
1ε-3-28



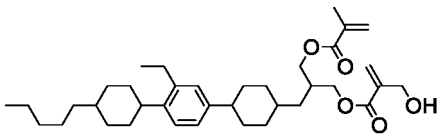
1ε-3-29



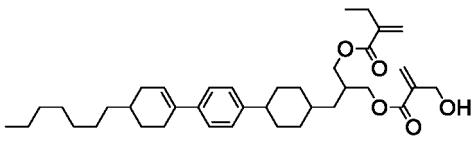
1ε-3-30



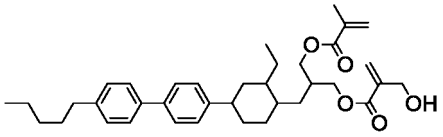
1ε-3-31



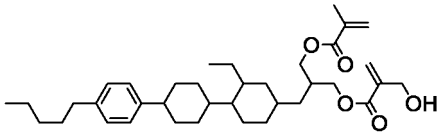
1ε-3-32



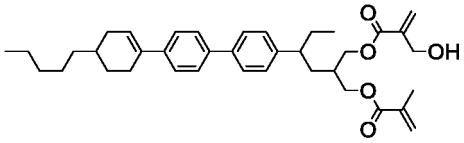
1ε-3-33



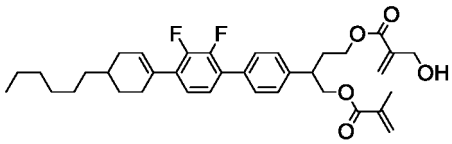
1ε-3-34



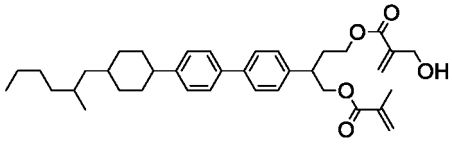
1ε-3-35



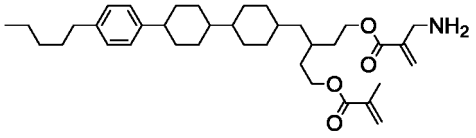
1ε-3-36



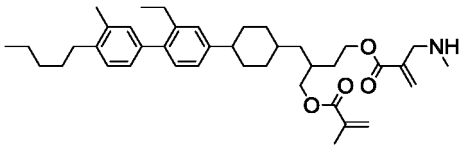
1ε-3-37



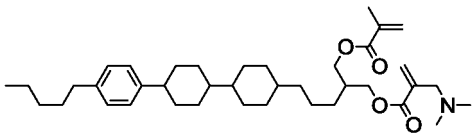
1ε-3-38



1ε-3-39

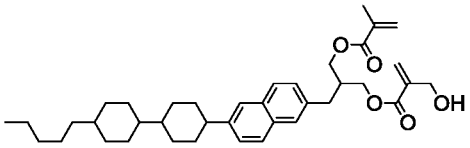


1ε-3-40

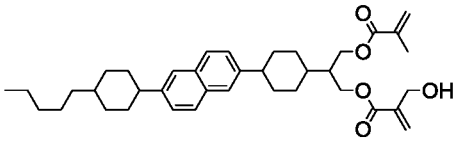


No.

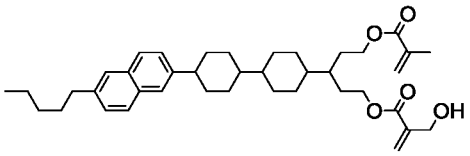
1ε-3-41



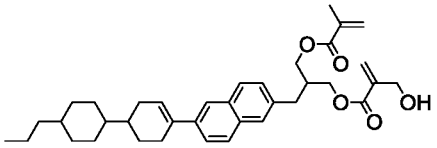
1ε-3-42



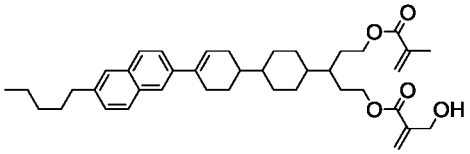
1ε-3-43



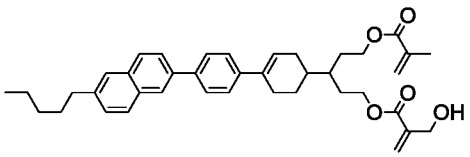
1ε-3-44



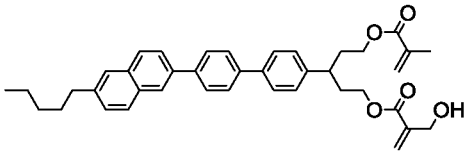
1ε-3-45



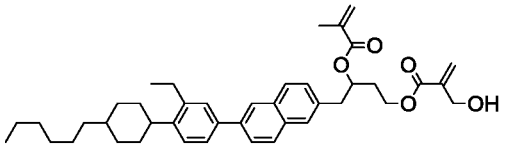
1ε-3-46



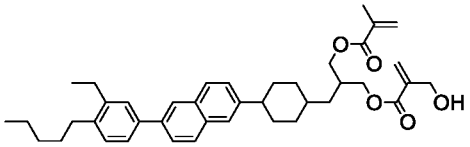
1ε-3-47



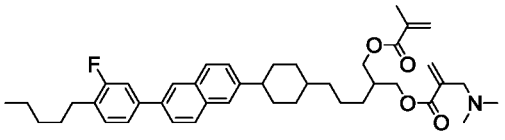
1ε-3-48



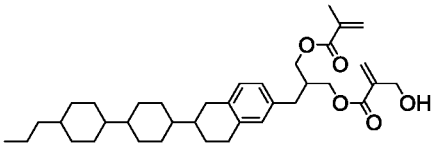
1ε-3-49



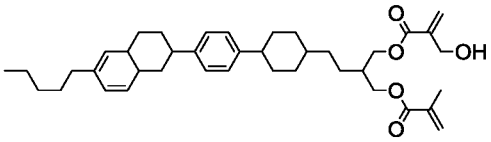
1ε-3-50



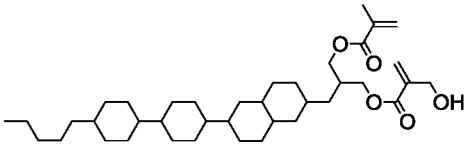
1ε-3-51



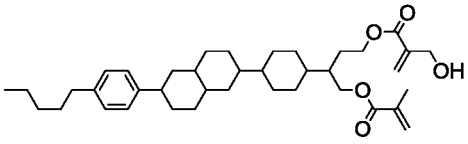
1ε-3-52



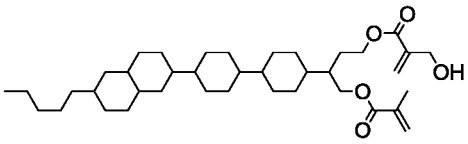
1ε-3-53



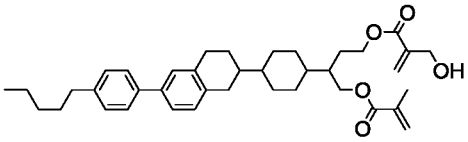
1ε-3-54



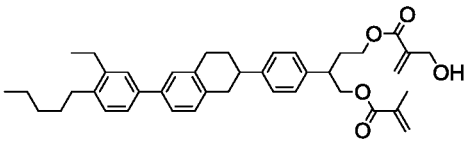
1ε-3-55



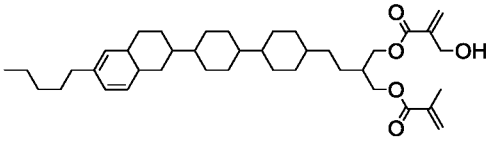
1ε-3-56



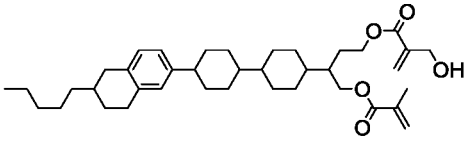
1ε-3-57



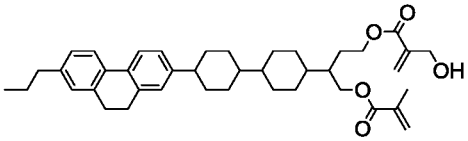
1ε-3-58



1ε-3-59

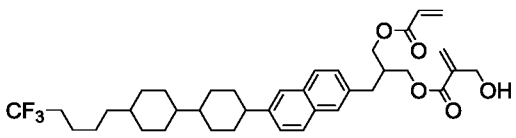


1ε-3-60

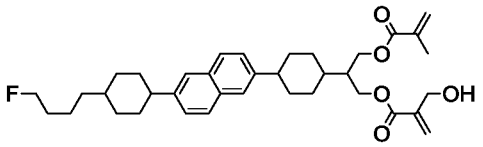


No.

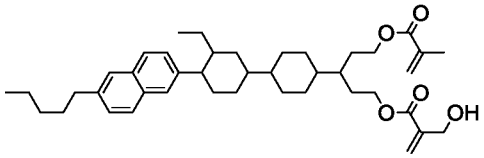
1ε-3-61



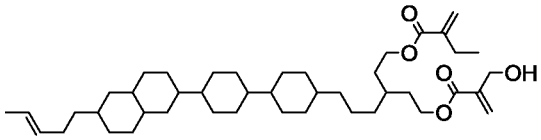
1ε-3-62



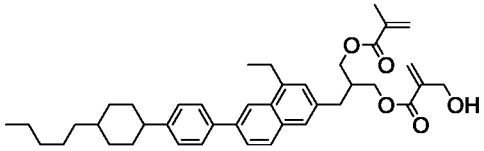
1ε-3-63



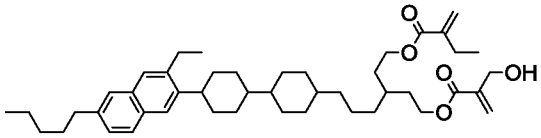
1ε-3-64



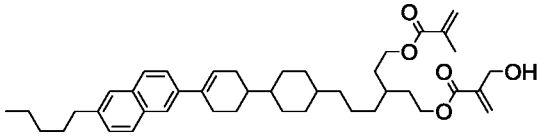
1ε-3-65



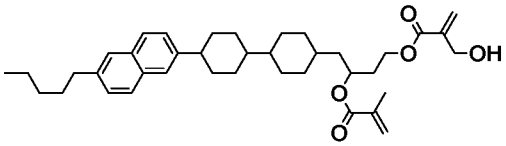
1ε-3-66



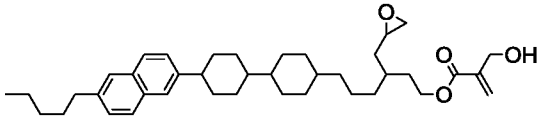
1ε-3-67



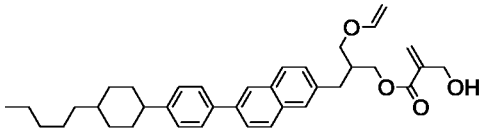
1ε-3-68



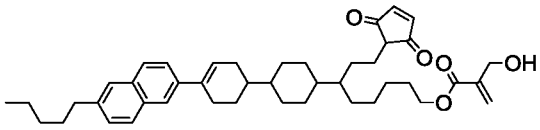
1ε-3-69



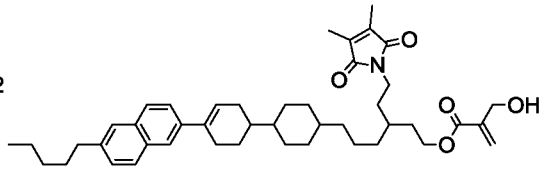
1ε-3-70



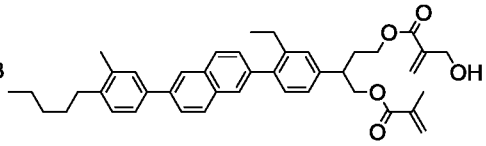
1ε-3-71



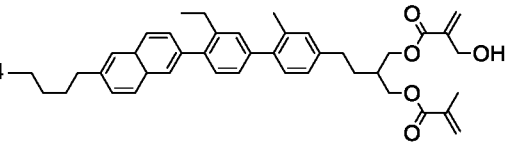
1ε-3-72



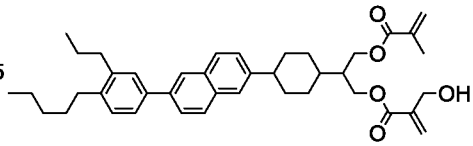
1ε-3-73



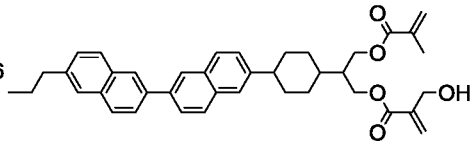
1ε-3-74



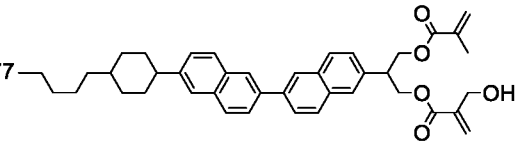
1ε-3-75



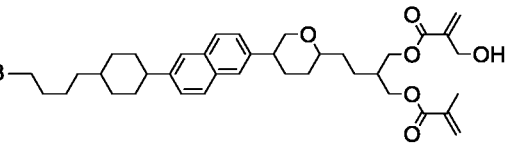
1ε-3-76



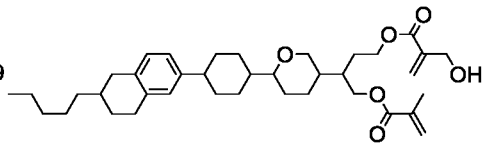
1ε-3-77



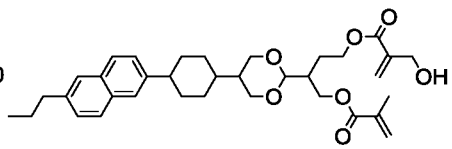
1ε-3-78



1ε-3-79

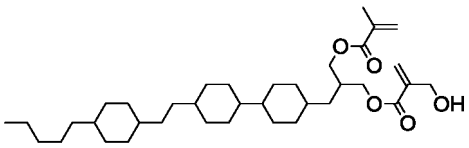


1ε-3-80

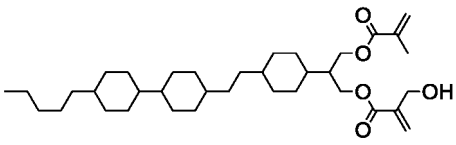


No.

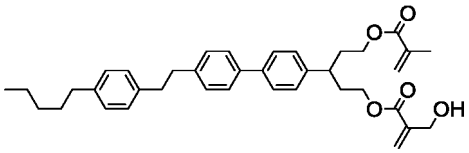
1ε-3-81



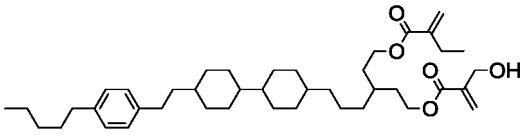
1ε-3-82



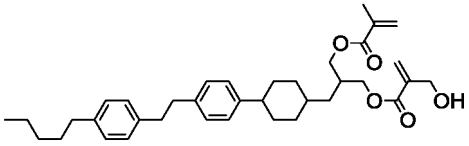
1ε-3-83



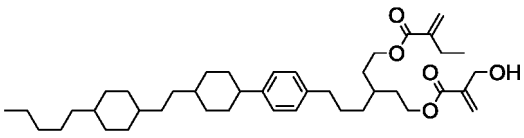
1ε-3-84



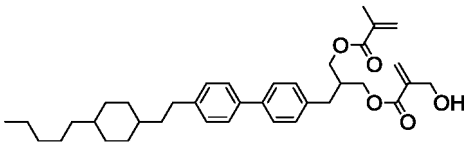
1ε-3-85



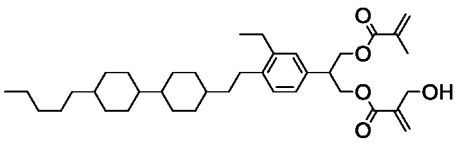
1ε-3-86



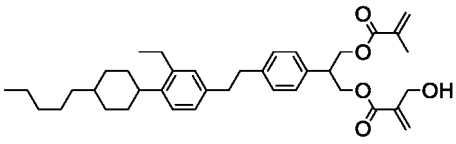
1ε-3-87



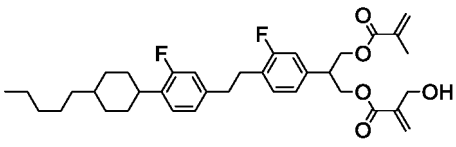
1ε-3-88



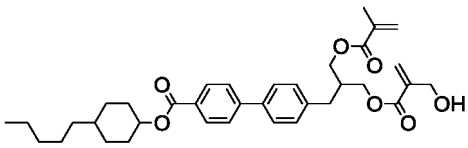
1ε-3-89



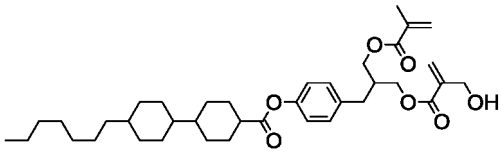
1ε-3-90



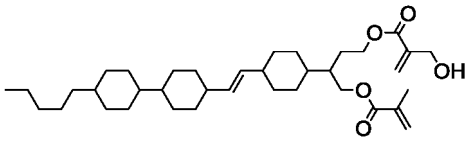
1ε-3-91



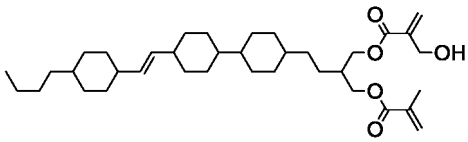
1ε-3-92



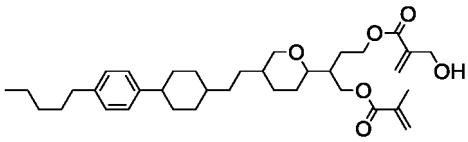
1ε-3-93



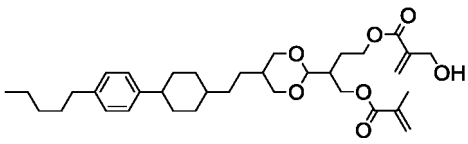
1ε-3-94



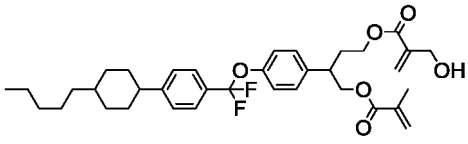
1ε-3-95



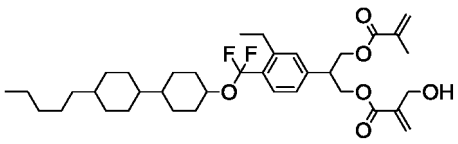
1ε-3-96



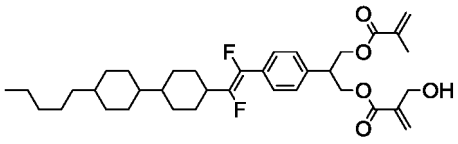
1ε-3-97



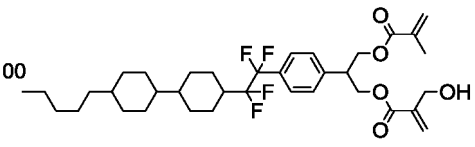
1ε-3-98



1ε-3-99

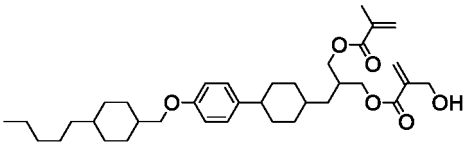


1ε-3-100

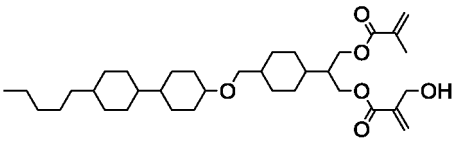


No.

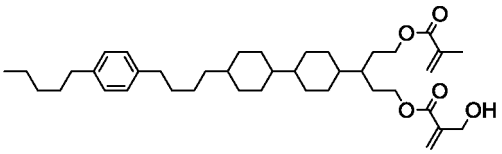
1ε-3-101



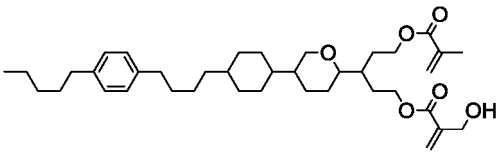
1ε-3-102



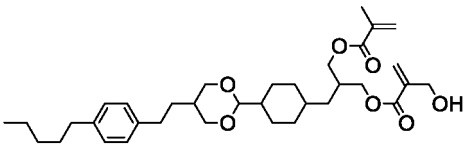
1ε-3-103



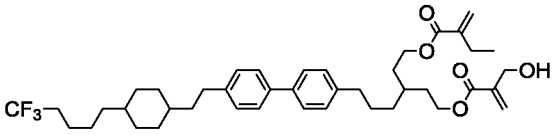
1ε-3-104



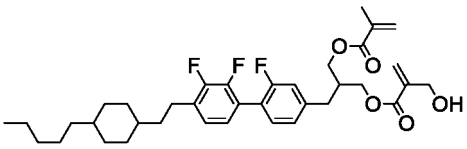
1ε-3-105



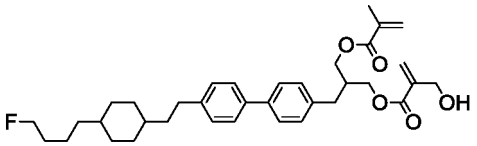
1ε-3-106



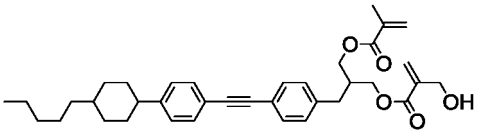
1ε-3-107



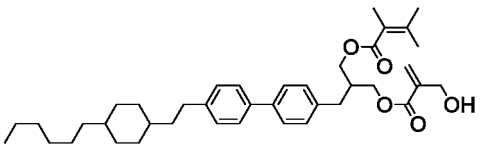
1ε-3-108



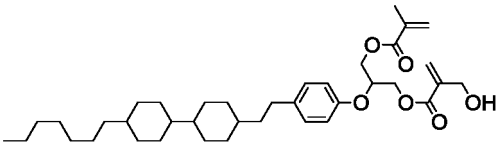
1ε-3-109



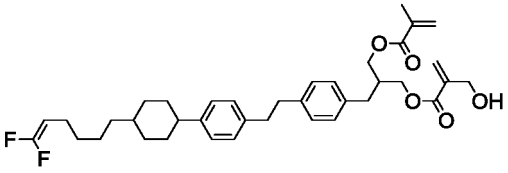
1ε-3-110



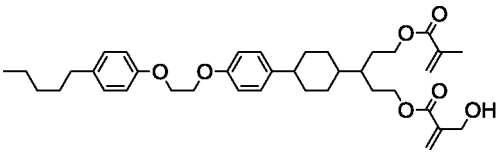
1ε-3-111



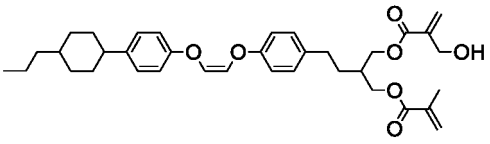
1ε-3-112



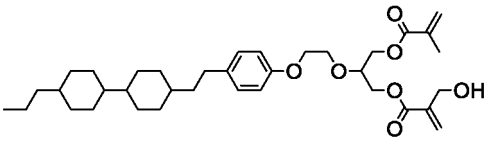
1ε-3-113



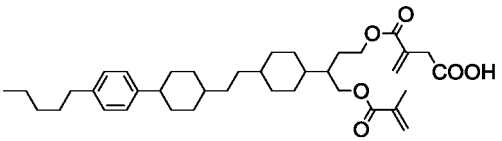
1ε-3-114



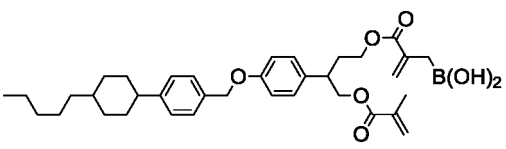
1ε-3-115



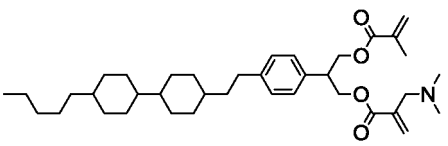
1ε-3-116



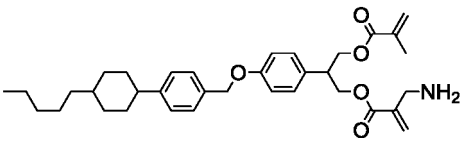
1ε-3-117



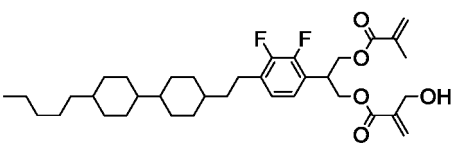
1ε-3-118



1ε-3-119

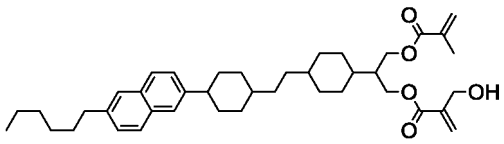


1ε-3-120

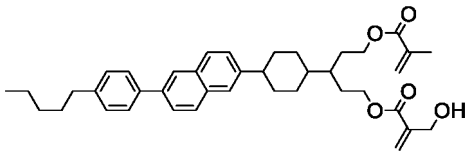


No.

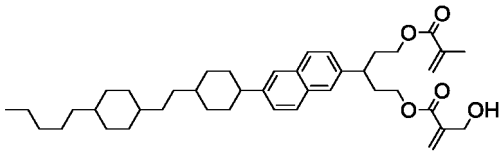
1ε-3-121



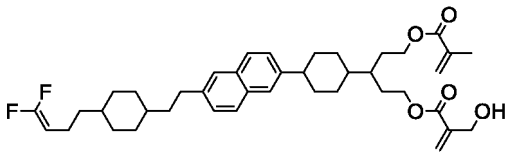
1ε-3-122



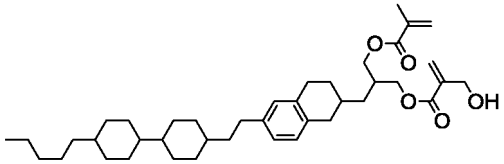
1ε-3-123



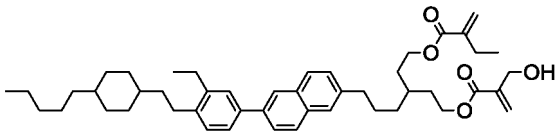
1ε-3-124



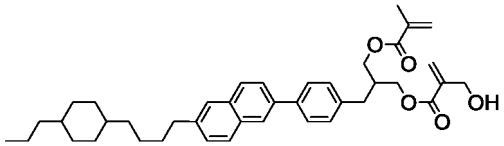
1ε-3-125



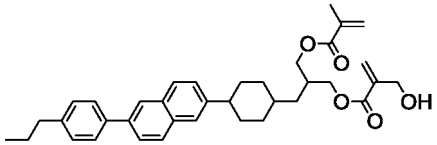
1ε-3-126



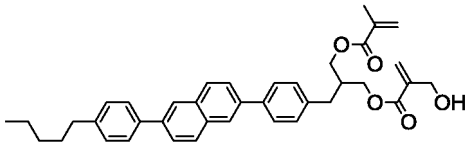
1ε-3-127



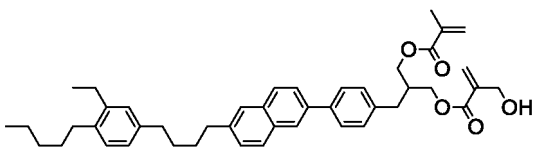
1ε-3-128



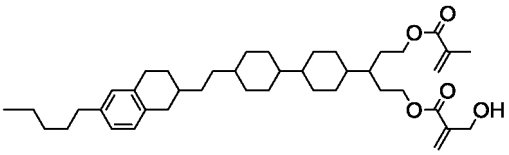
1ε-3-129



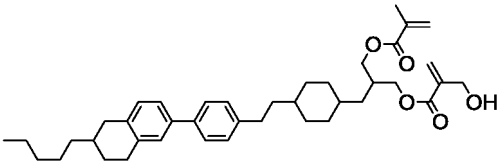
1ε-3-130



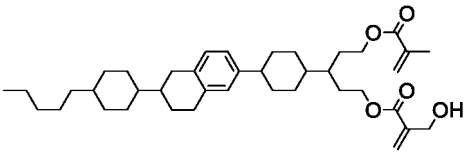
1ε-3-131



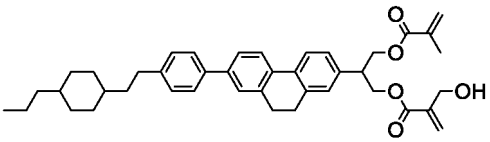
1ε-3-132



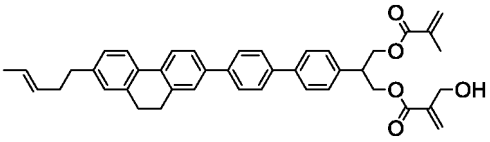
1ε-3-133



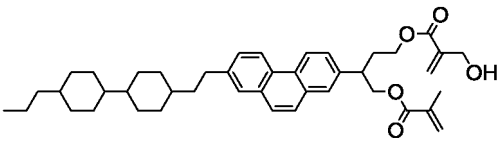
1ε-3-134



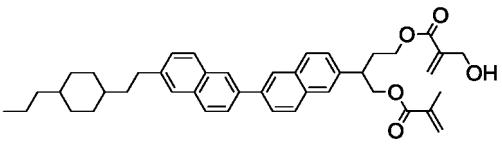
1ε-3-135



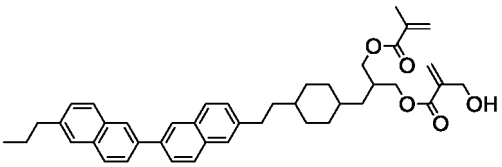
1ε-3-136



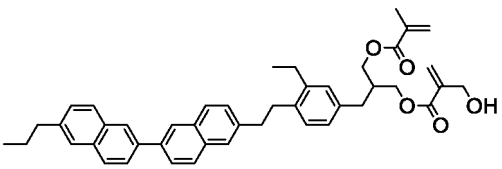
1ε-3-137



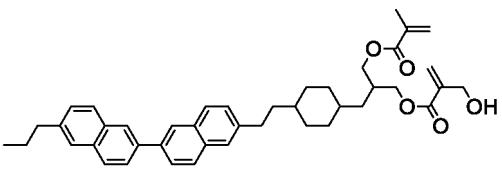
1ε-3-138



1ε-3-139

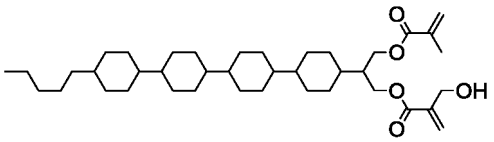


1ε-3-140

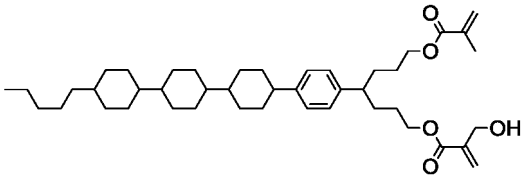


No.

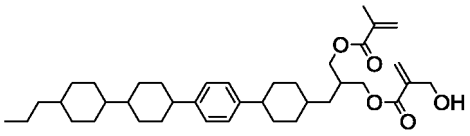
1ε-4-1



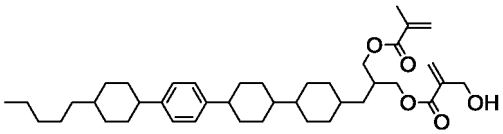
1ε-4-2



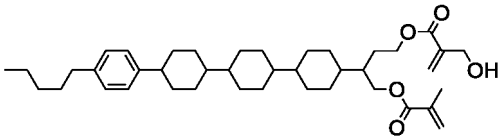
1ε-4-3



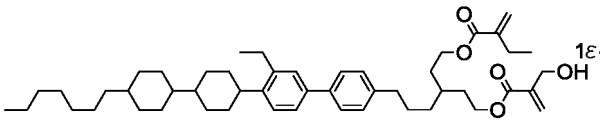
1ε-4-4



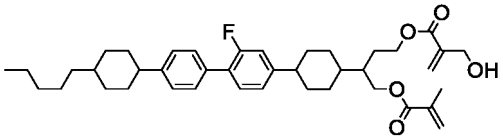
1ε-4-5



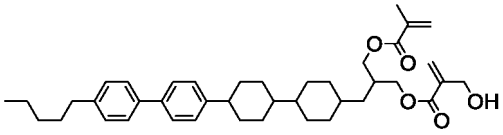
1ε-4-6



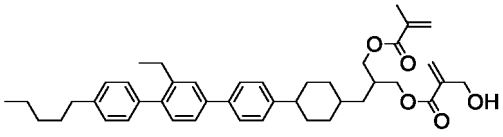
1ε-4-7



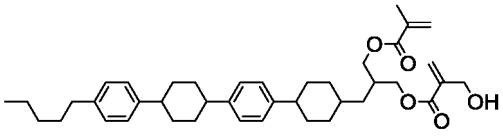
1ε-4-8



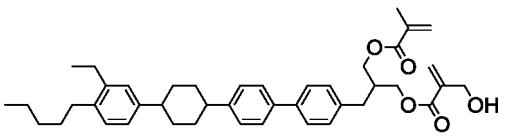
1ε-4-9



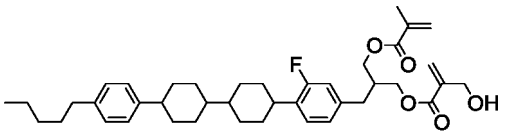
1ε-4-10



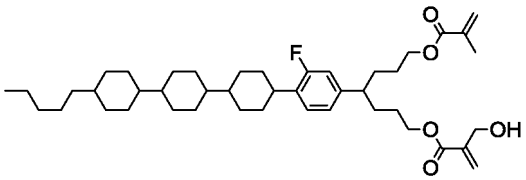
1ε-4-11



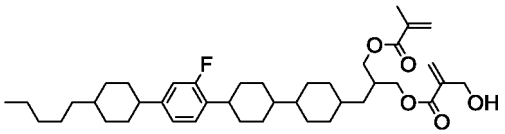
1ε-4-12



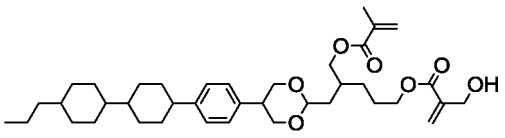
1ε-4-13



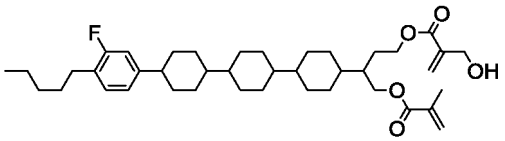
1ε-4-14



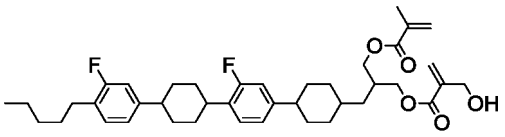
1ε-4-15



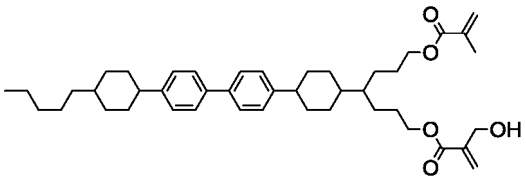
1ε-4-16



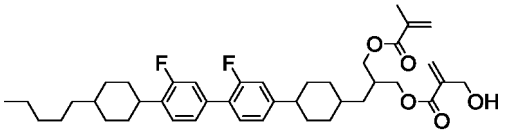
1ε-4-17



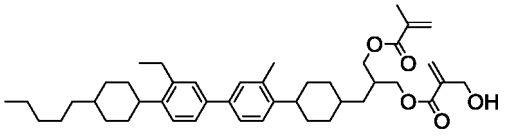
1ε-4-18



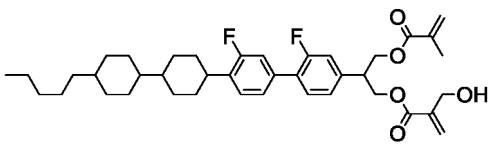
1ε-4-19

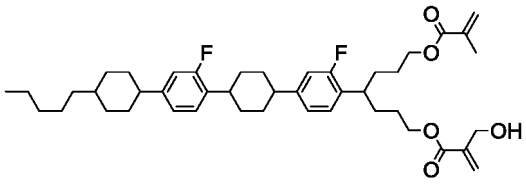


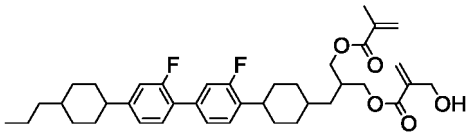
1ε-4-20

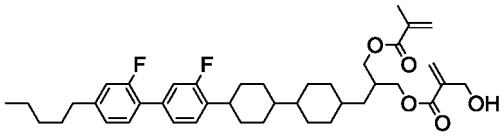


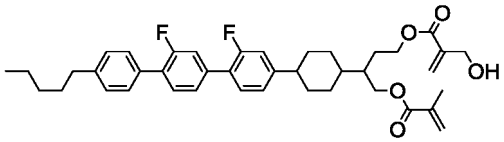
No.

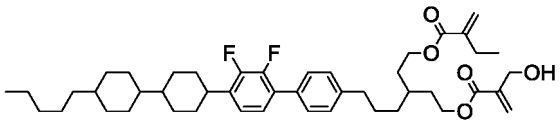
1ε-4-21 

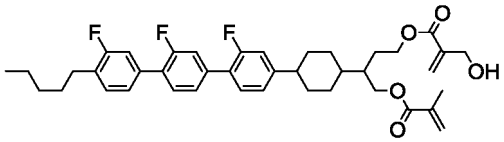
1ε-4-22 

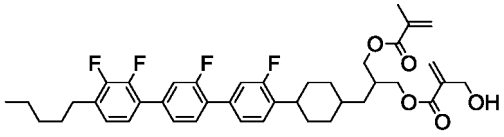
1ε-4-23 

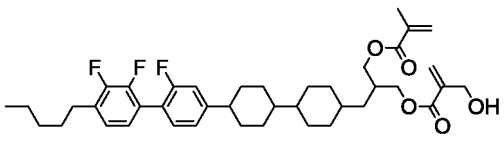
1ε-4-24 

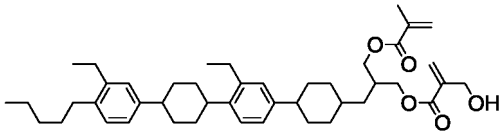
1ε-4-25 

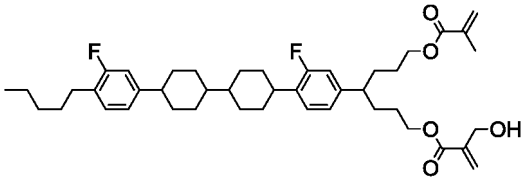
1ε-4-26 

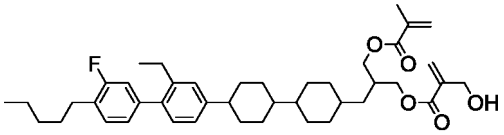
1ε-4-27 

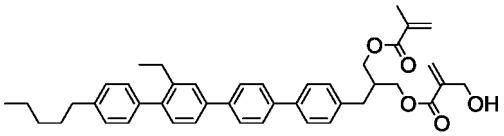
1ε-4-28 

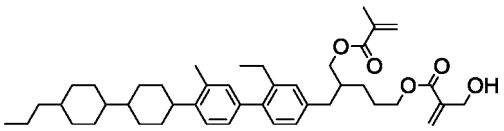
1ε-4-29 

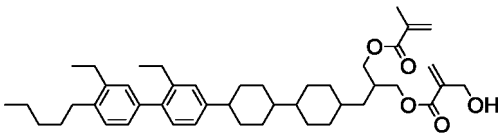
1ε-4-30 

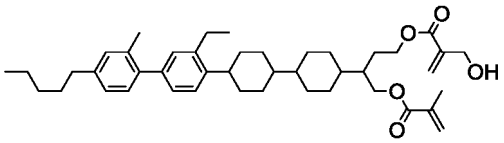
1ε-4-31 

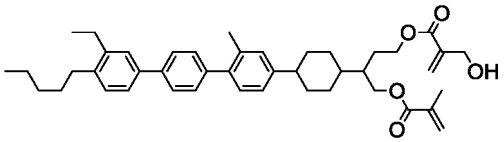
1ε-4-32 

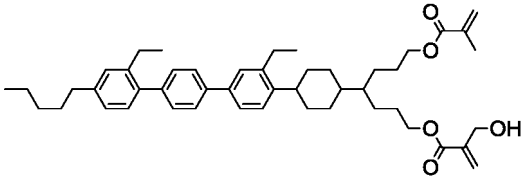
1ε-4-33 

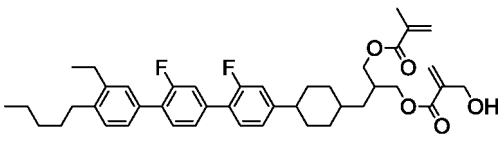
1ε-4-34 

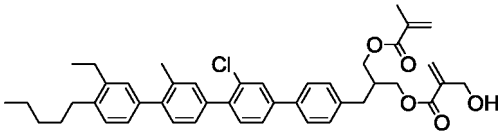
1ε-4-35 

1ε-4-36 

1ε-4-37 

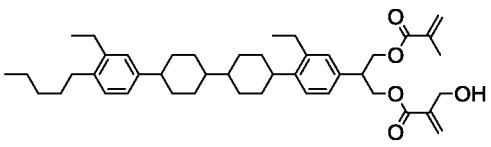
1ε-4-38 

1ε-4-39 

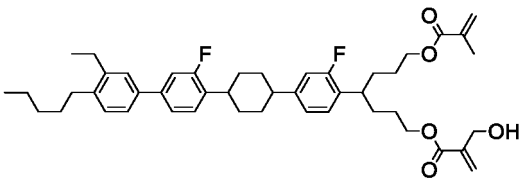
1ε-4-40 

No.

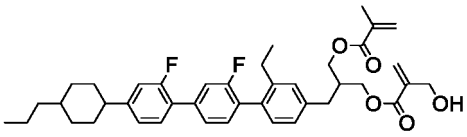
1ε-4-41



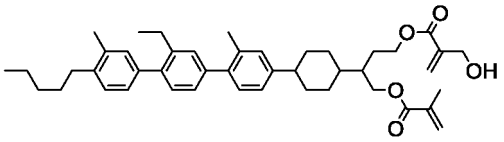
1ε-4-42



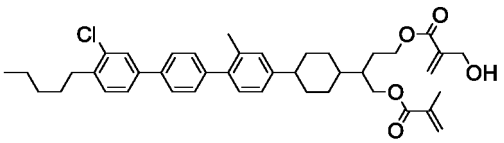
1ε-4-43



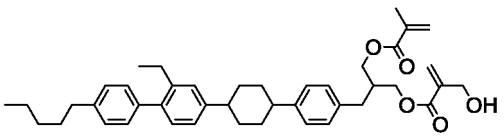
1ε-4-44



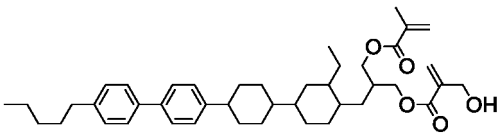
1ε-4-45



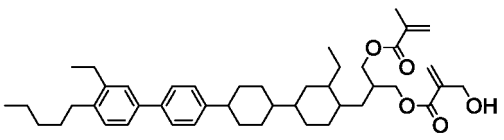
1ε-4-46



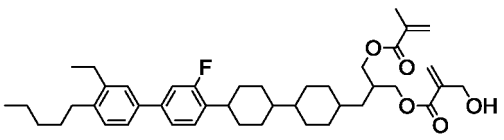
1ε-4-47



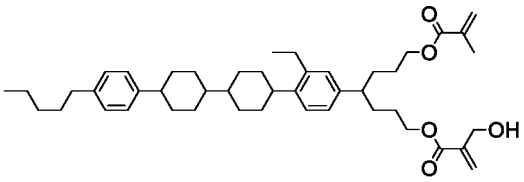
1ε-4-48



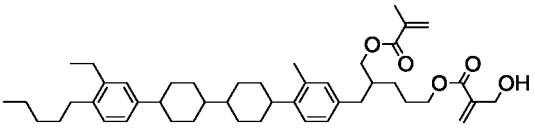
1ε-4-49



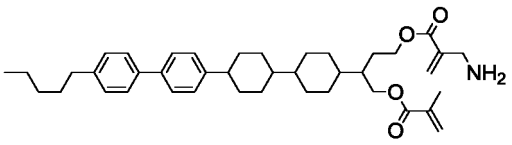
1ε-4-50



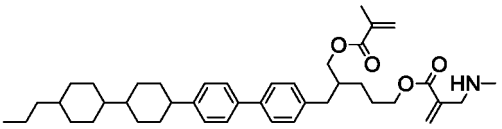
1ε-4-51



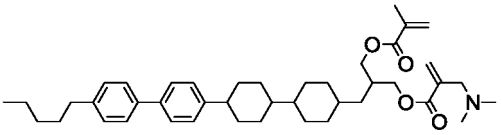
1ε-4-52



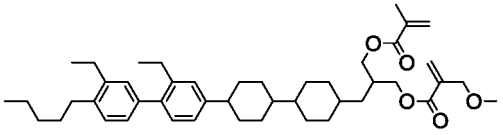
1ε-4-53



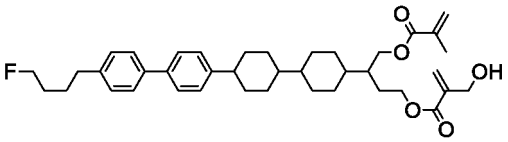
1ε-4-54



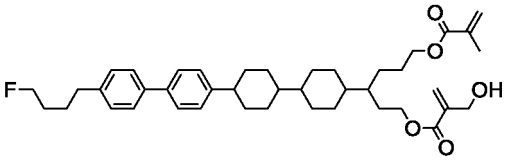
1ε-4-55



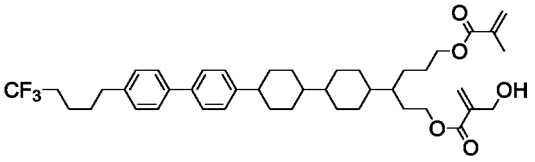
1ε-4-56



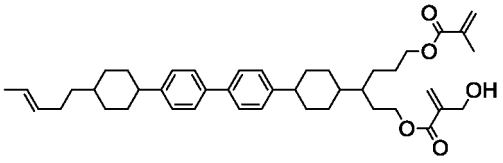
1ε-4-57



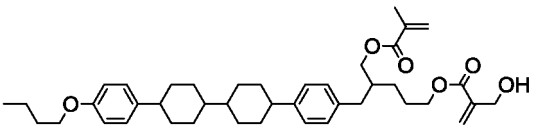
1ε-4-58



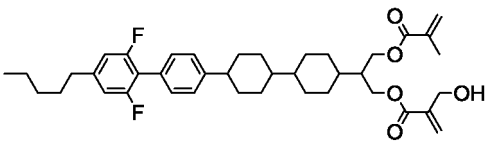
1ε-4-59

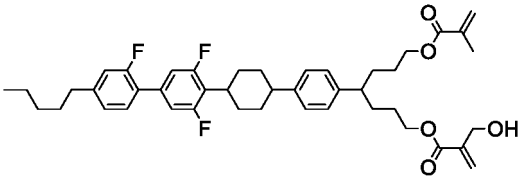


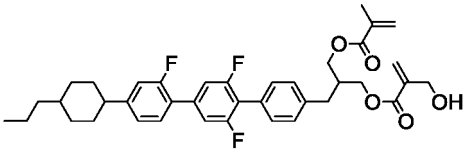
1ε-4-60

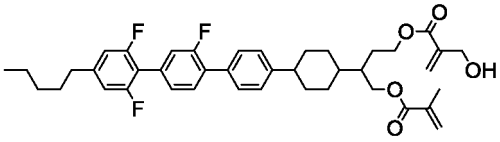


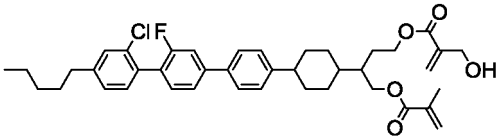
No.

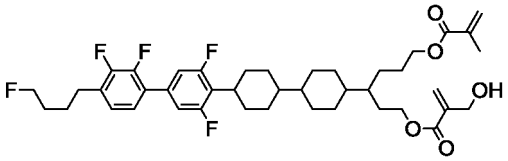
1ε-4-61 

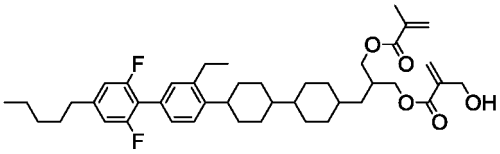
1ε-4-62 

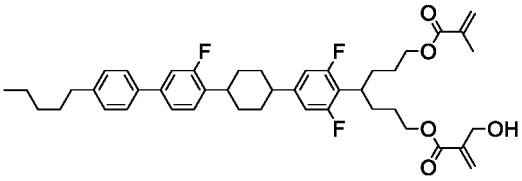
1ε-4-63 

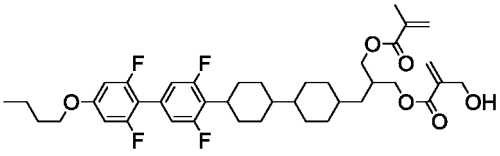
1ε-4-64 

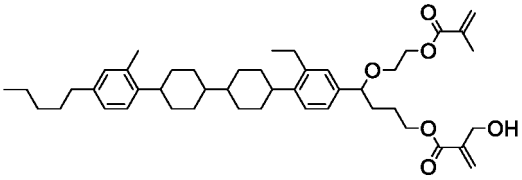
1ε-4-65 

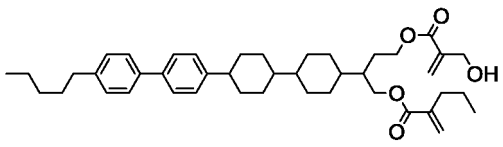
1ε-4-66 

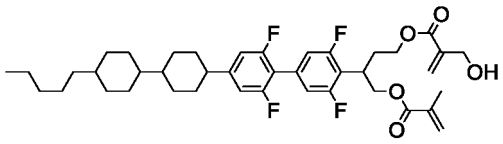
1ε-4-67 

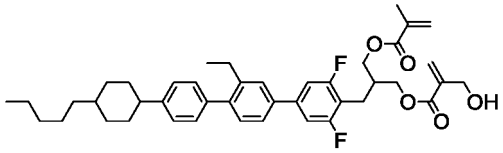
1ε-4-68 

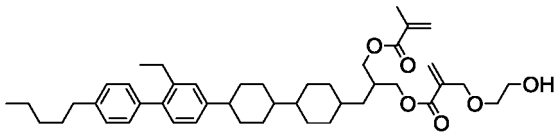
1ε-4-69 

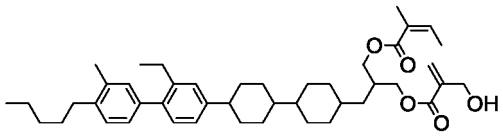
1ε-4-70 

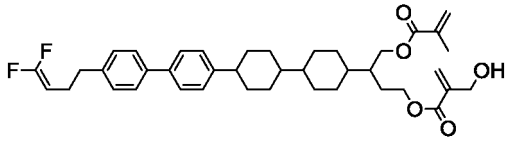
1ε-4-71 

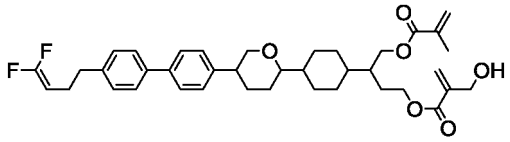
1ε-4-72 

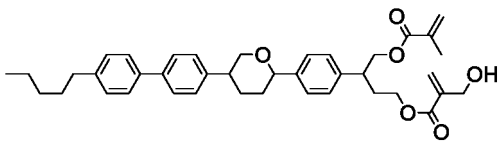
1ε-4-73 

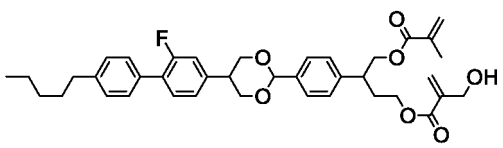
1ε-4-74 

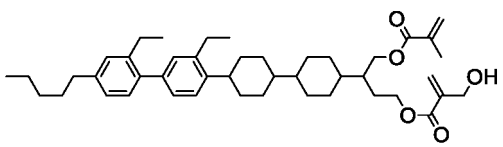
1ε-4-75 

1ε-4-76 

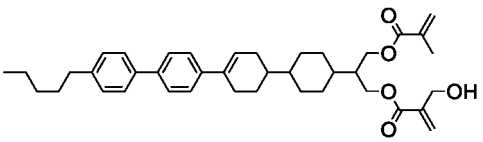
1ε-4-77 

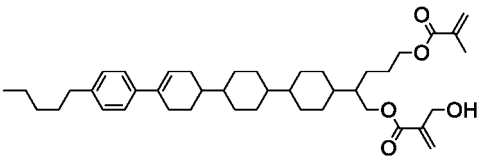
1ε-4-78 

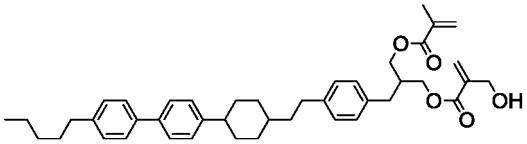
1ε-4-79 

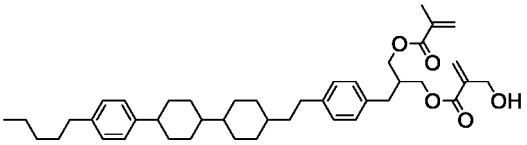
1ε-4-80 

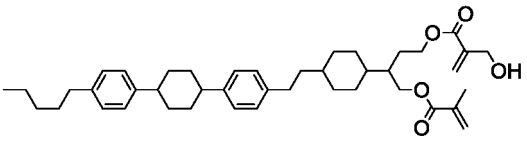
No.

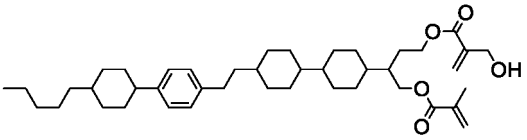
1ε-4-81 

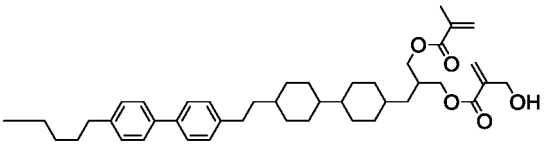
1ε-4-82 

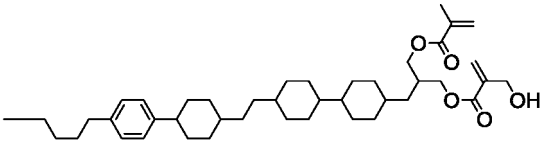
1ε-4-83 

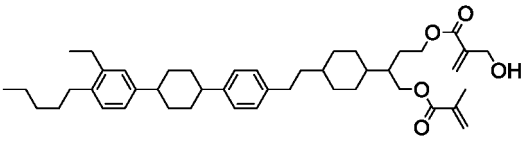
1ε-4-84 

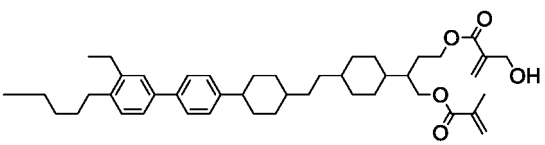
1ε-4-85 

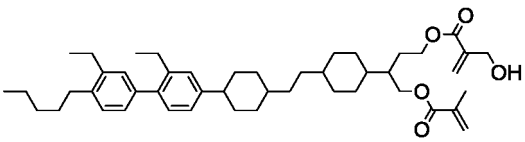
1ε-4-86 

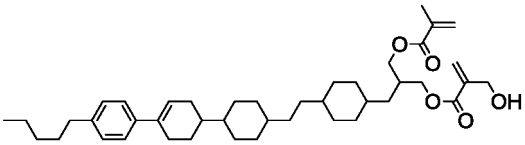
1ε-4-87 

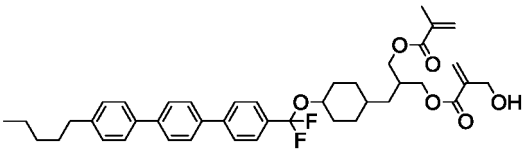
1ε-4-88 

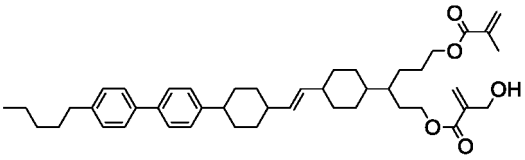
1ε-4-89 

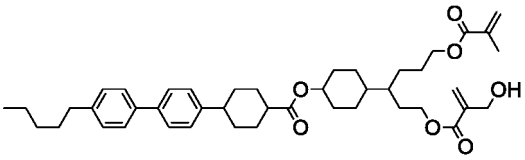
1ε-4-90 

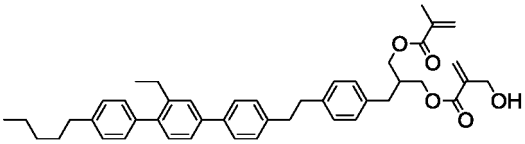
1ε-4-91 

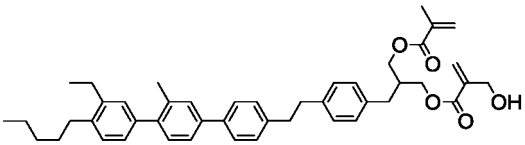
1ε-4-92 

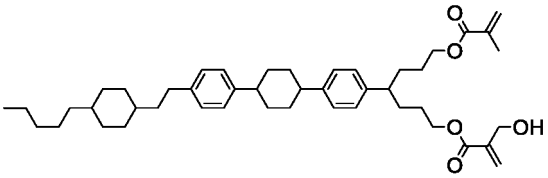
1ε-4-93 

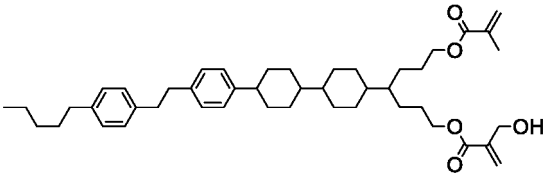
1ε-4-94 

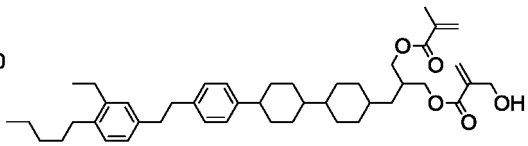
1ε-4-95 

1ε-4-96 

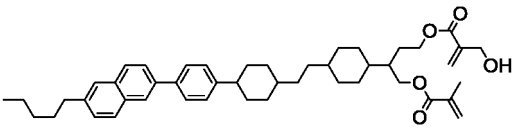
1ε-4-97 

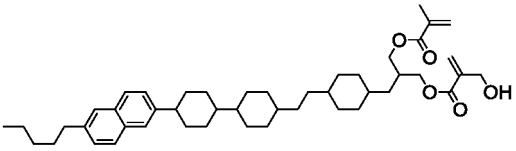
1ε-4-98 

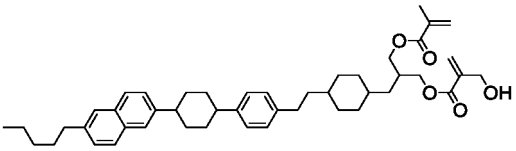
1ε-4-99 

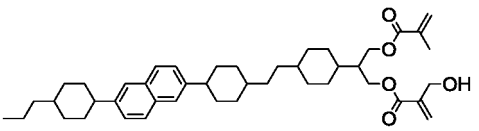
1ε-4-100 

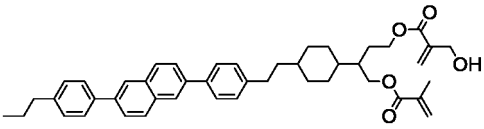
No.

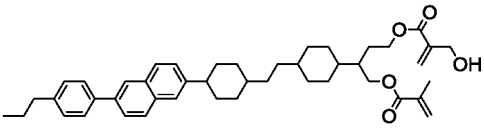
1ε-4-101 

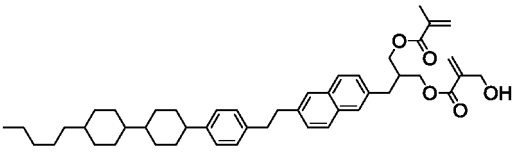
1ε-4-102 

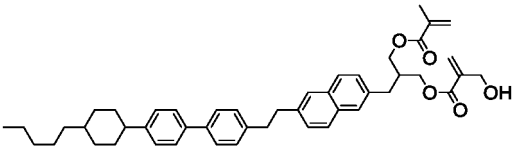
1ε-4-103 

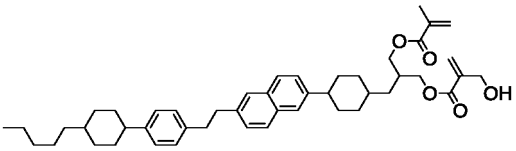
1ε-4-104 

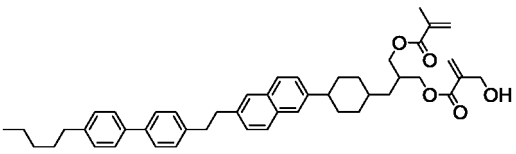
1ε-4-105 

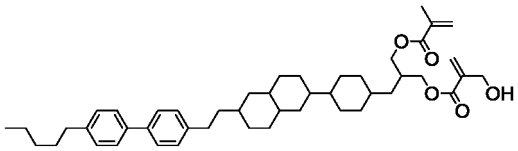
1ε-4-106 

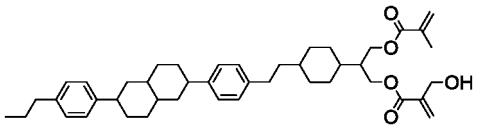
1ε-4-107 

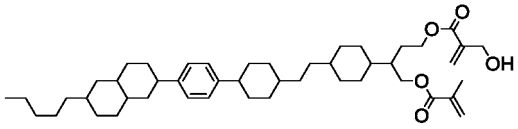
1ε-4-108 

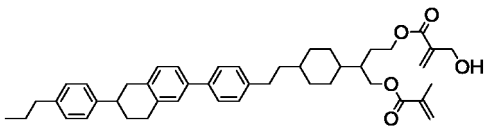
1ε-4-109 

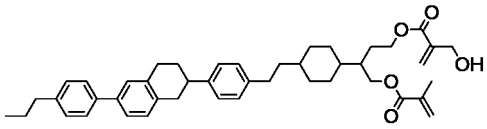
1ε-4-110 

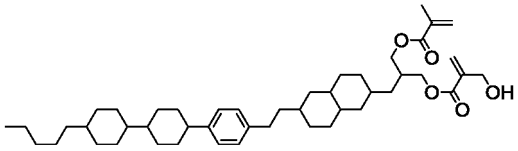
1ε-4-111 

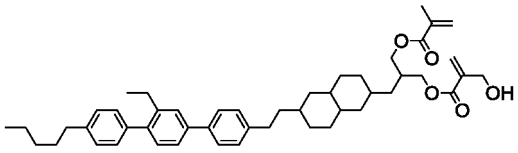
1ε-4-112 

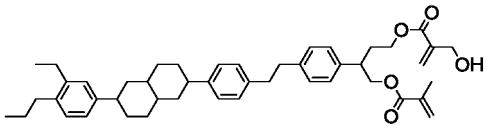
1ε-4-113 

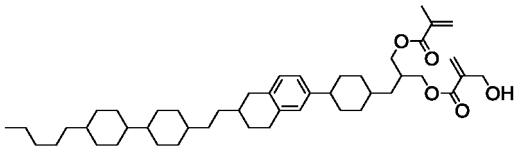
1ε-4-114 

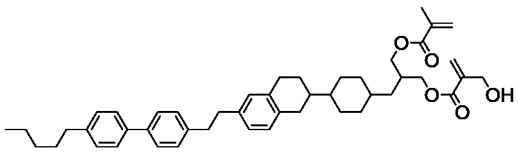
1ε-4-115 

1ε-4-116 

1ε-4-117 

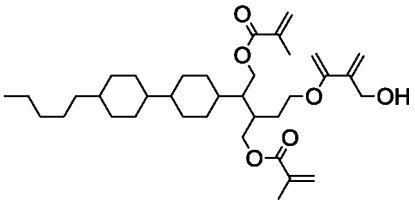
1ε-4-118 

1ε-4-119 

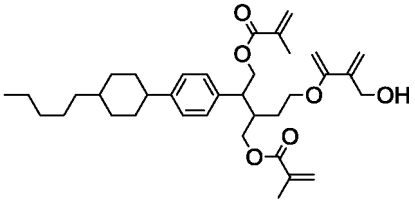
1ε-4-120 

No.

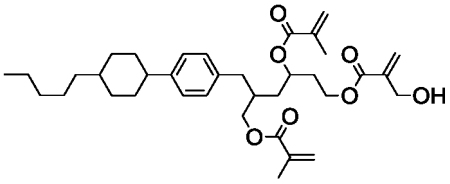
1ε-4-121



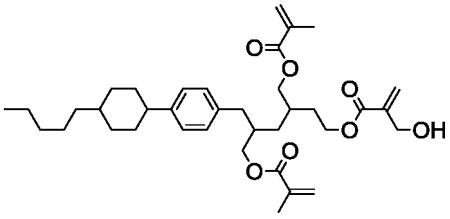
1ε-4-122



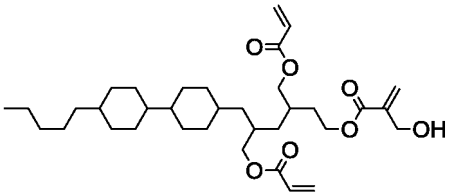
1ε-4-123



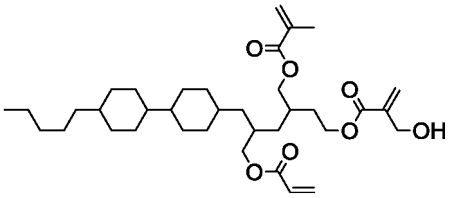
1ε-4-124



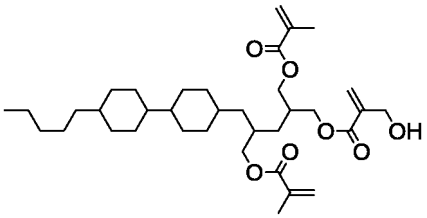
1ε-4-125



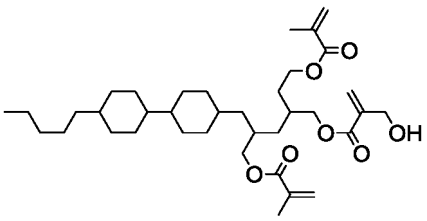
1ε-4-126



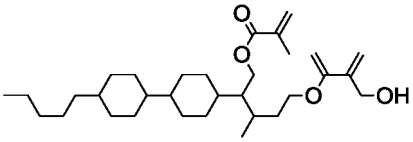
1ε-4-127



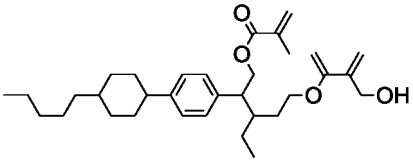
1ε-4-128



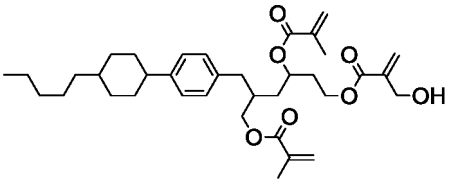
1ε-4-131



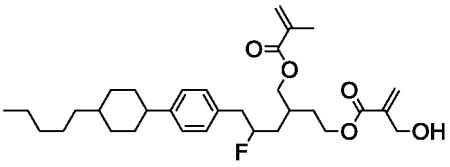
1ε-4-132



1ε-4-133

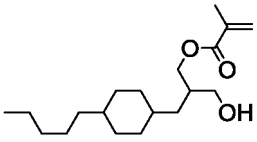


1ε-4-134

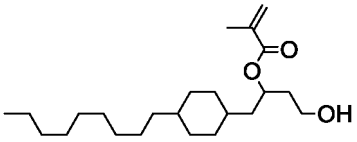


No.

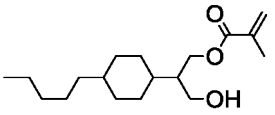
1ε-5-1



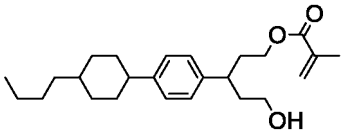
1ε-5-2



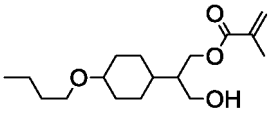
1ε-5-3



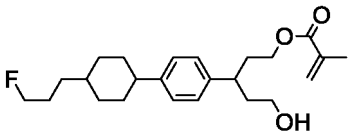
1ε-5-4



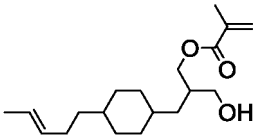
1ε-5-5



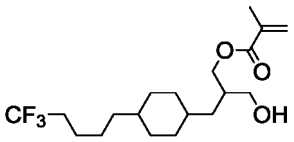
1ε-5-6



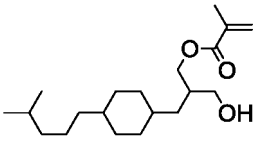
1ε-5-7



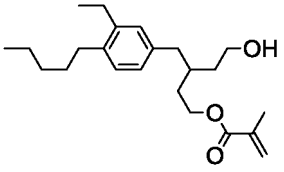
1ε-5-8



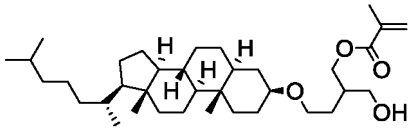
1ε-5-9



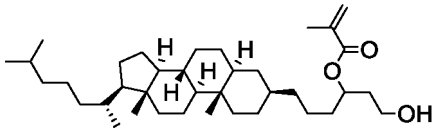
1ε-5-10



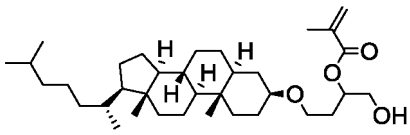
1ε-5-11



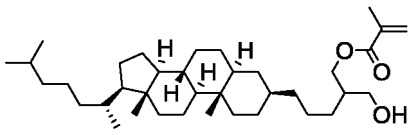
1ε-5-12



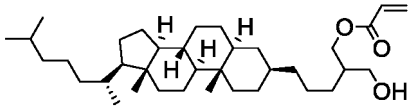
1ε-5-13



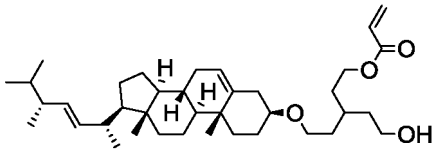
1ε-5-14



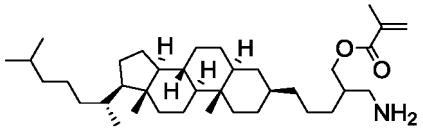
1ε-5-15



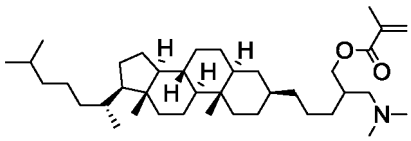
1ε-5-16



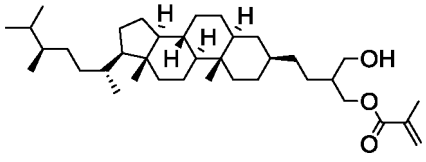
1ε-5-17



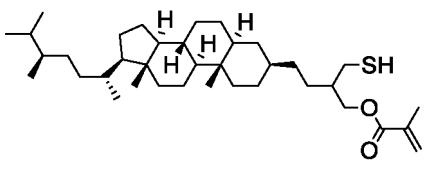
1ε-5-18



1ε-5-19

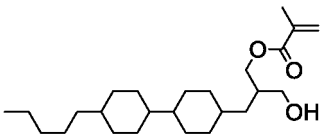


1ε-5-20

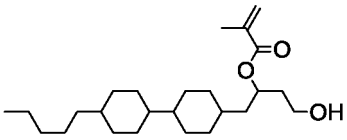


No.

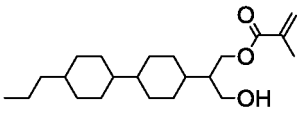
1ε-6-1



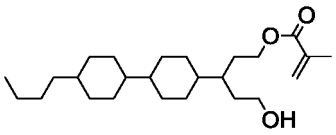
1ε-6-2



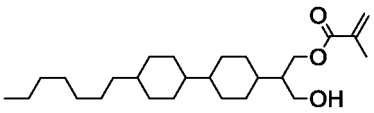
1ε-6-3



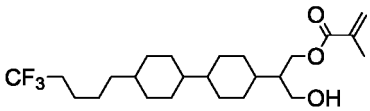
1ε-6-4



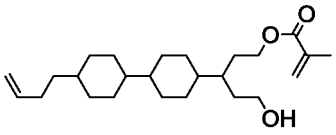
1ε-6-5



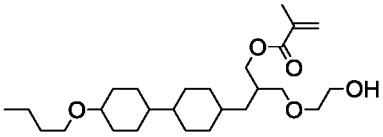
1ε-6-6



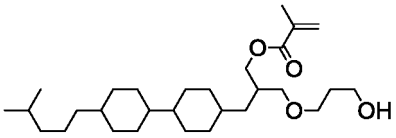
1ε-6-7



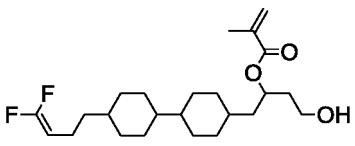
1ε-6-8



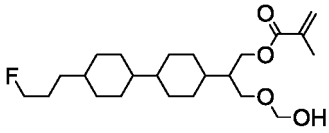
1ε-6-9



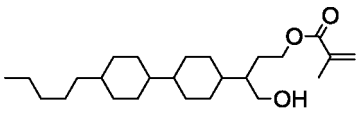
1ε-6-10



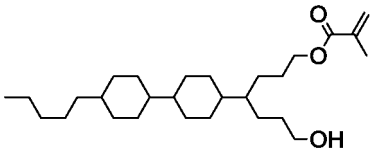
1ε-6-11



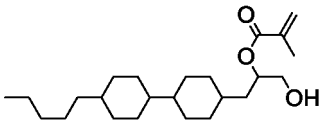
1ε-6-12



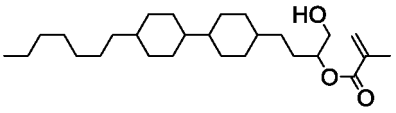
1ε-6-13



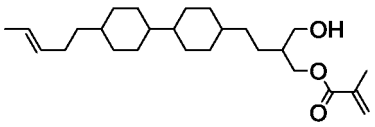
1ε-6-14



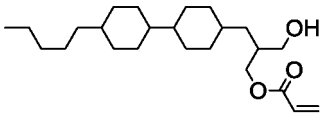
1ε-6-15



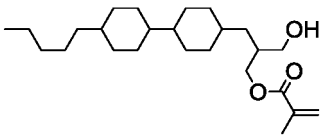
1ε-6-16



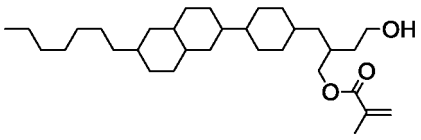
1ε-6-17



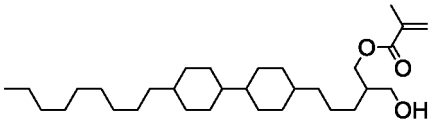
1ε-6-18



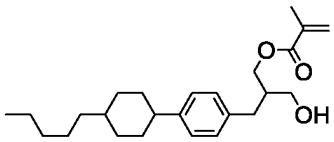
1ε-6-19

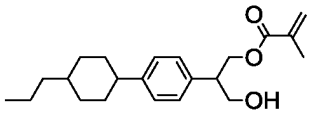


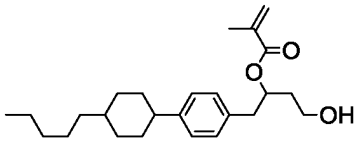
1ε-6-20

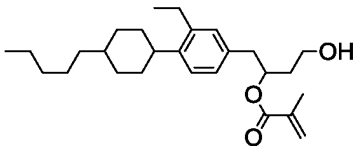


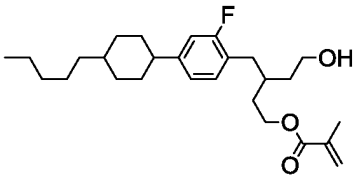
No.

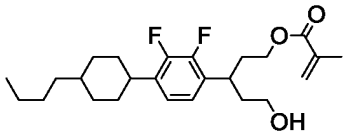
1ε-6-21 

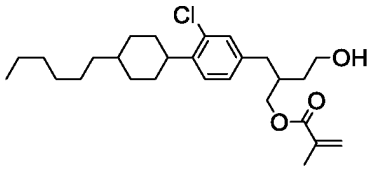
1ε-6-22 

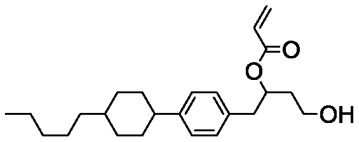
1ε-6-23 

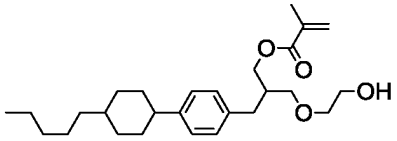
1ε-6-24 

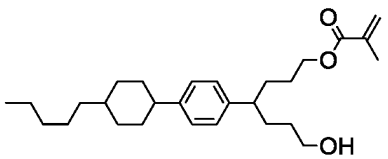
1ε-6-25 

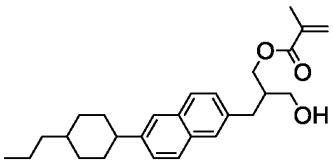
1ε-6-26 

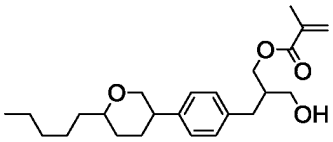
1ε-6-27 

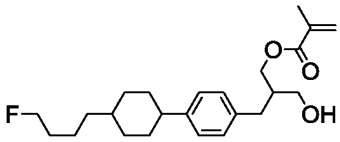
1ε-6-28 

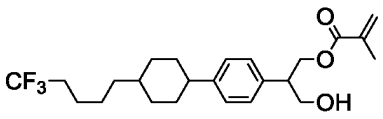
1ε-6-29 

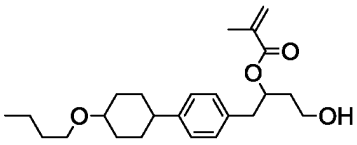
1ε-6-30 

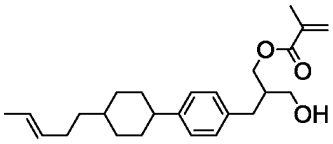
1ε-6-31 

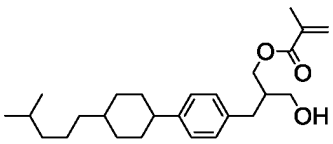
1ε-6-32 

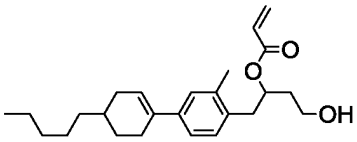
1ε-6-33 

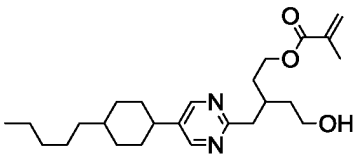
1ε-6-34 

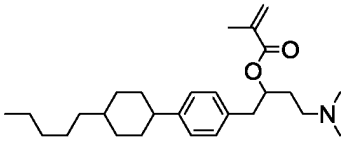
1ε-6-35 

1ε-6-36 

1ε-6-37 

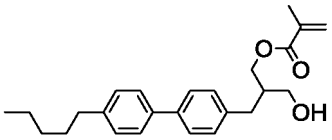
1ε-6-38 

1ε-6-39 

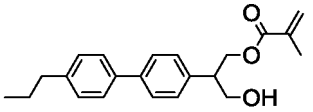
1ε-6-40 

No.

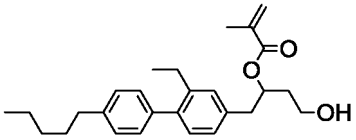
1ε-6-41



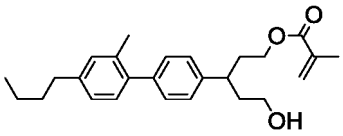
1ε-6-42



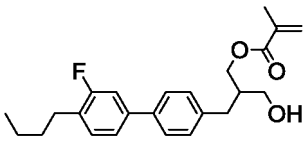
1ε-6-43



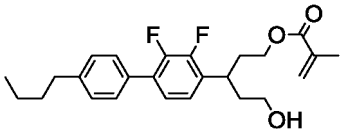
1ε-6-44



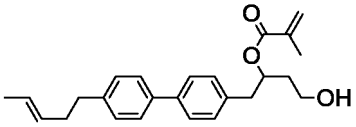
1ε-6-45



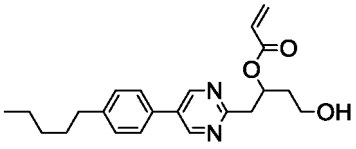
1ε-6-46



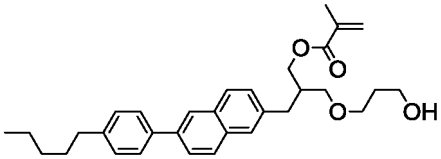
1ε-6-47



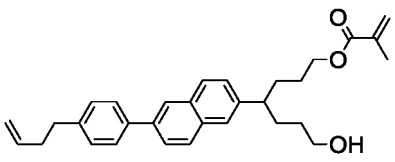
1ε-6-48



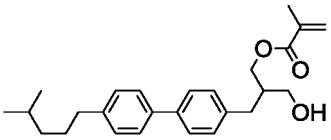
1ε-6-49



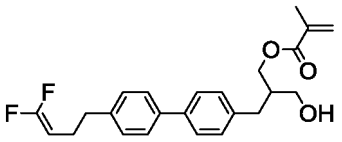
1ε-6-50



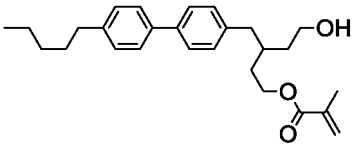
1ε-6-51



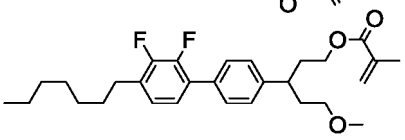
1ε-6-52



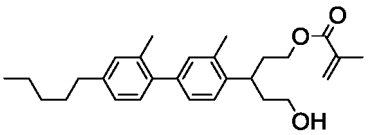
1ε-6-53



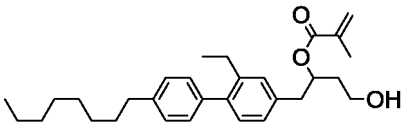
1ε-6-54



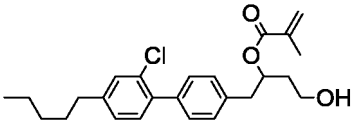
1ε-6-55



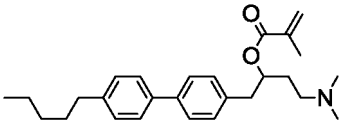
1ε-6-56



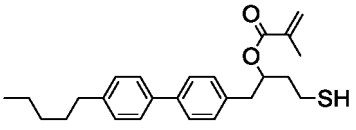
1ε-6-57



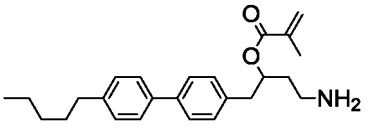
1ε-6-58



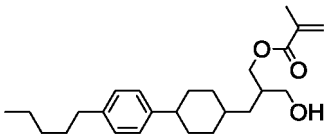
1ε-6-59

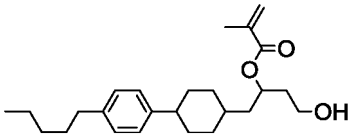


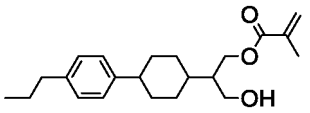
1ε-6-60

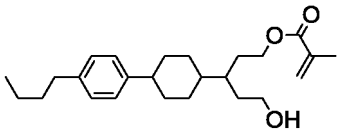


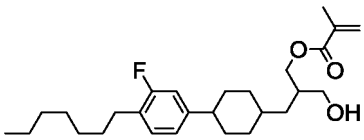
No.

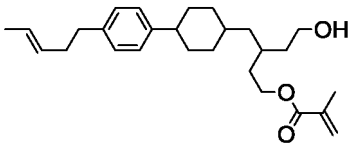
1ε-6-61 

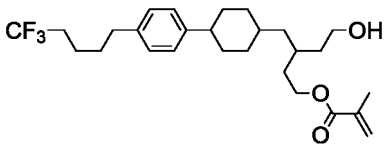
1ε-6-62 

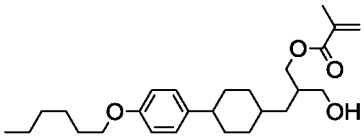
1ε-6-63 

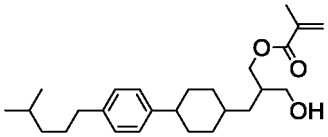
1ε-6-64 

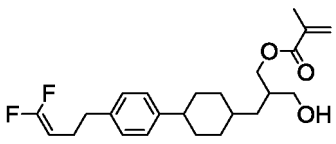
1ε-6-65 

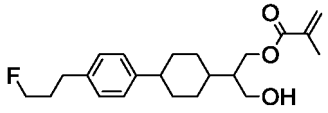
1ε-6-66 

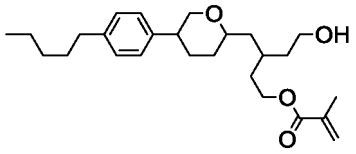
1ε-6-67 

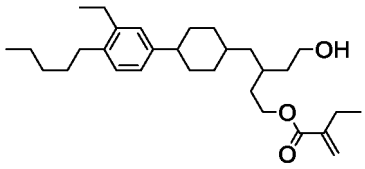
1ε-6-68 

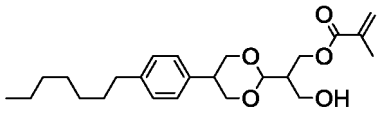
1ε-6-69 

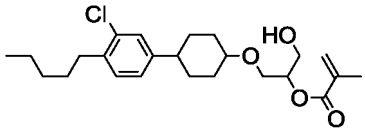
1ε-6-70 

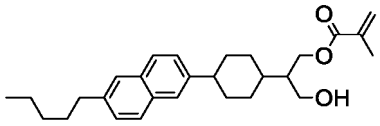
1ε-6-71 

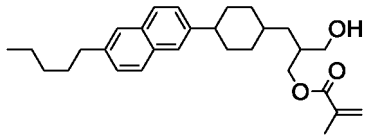
1ε-6-72 

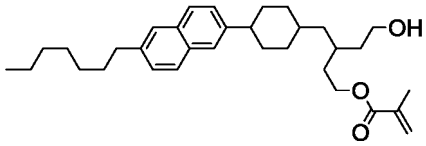
1ε-6-73 

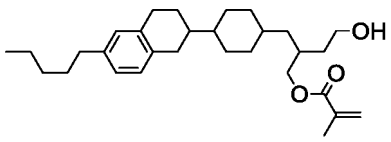
1ε-6-74 

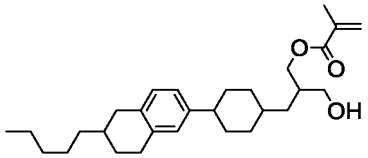
1ε-6-75 

1ε-6-76 

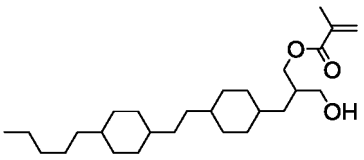
1ε-6-77 

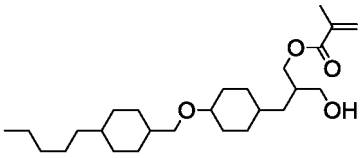
1ε-6-78 

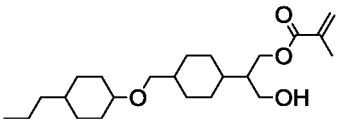
1ε-6-79 

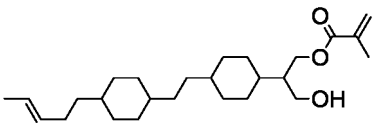
1ε-6-80 

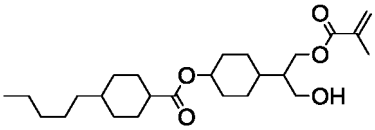
No.

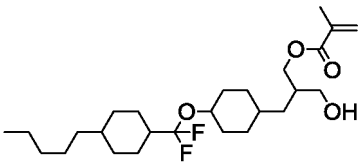
1ε-6-81 

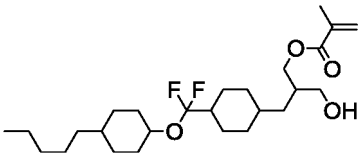
1ε-6-82 

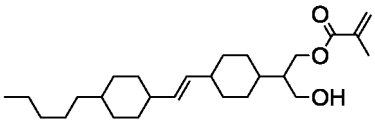
1ε-6-83 

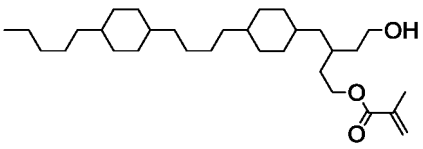
1ε-6-84 

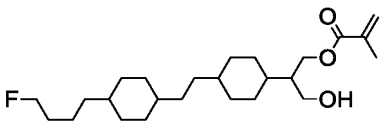
1ε-6-85 

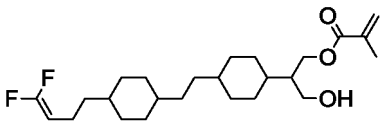
1ε-6-86 

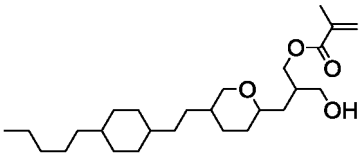
1ε-6-87 

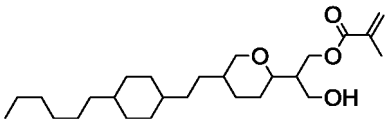
1ε-6-88 

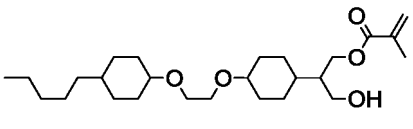
1ε-6-89 

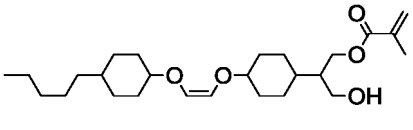
1ε-6-90 

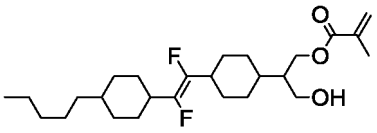
1ε-6-91 

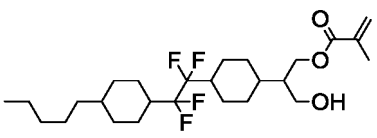
1ε-6-92 

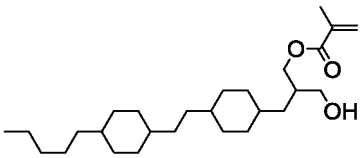
1ε-6-93 

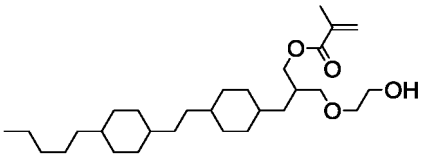
1ε-6-94 

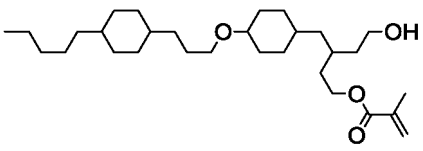
1ε-6-95 

1ε-6-96 

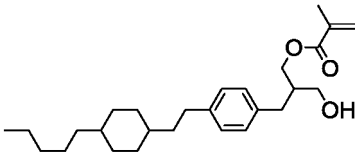
1ε-6-97 

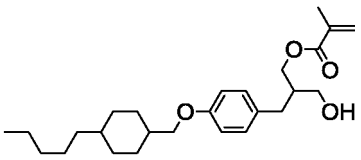
1ε-6-98 

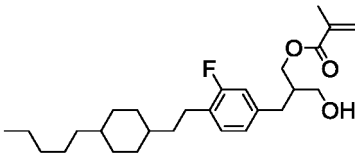
1ε-6-99 

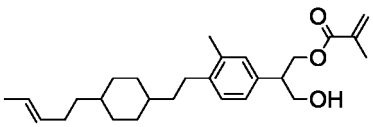
1ε-6-100 

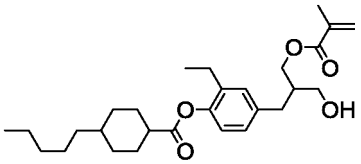
No.

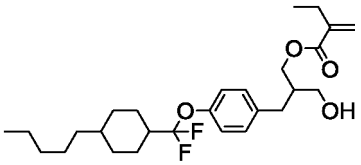
1ε-6-101 

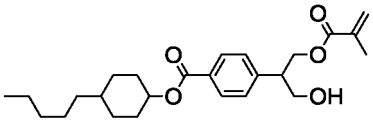
1ε-6-102 

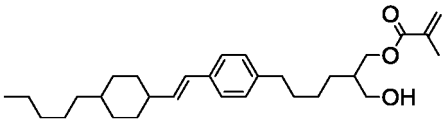
1ε-6-103 

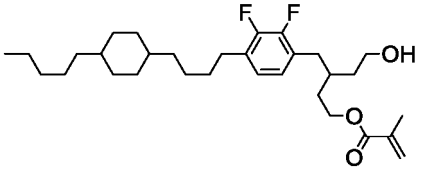
1ε-6-104 

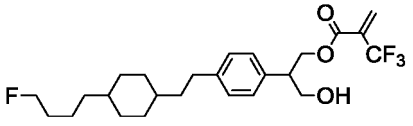
1ε-6-105 

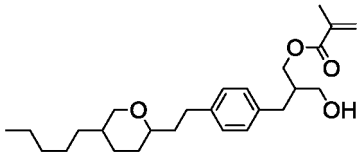
1ε-6-106 

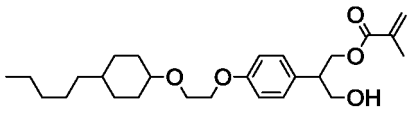
1ε-6-107 

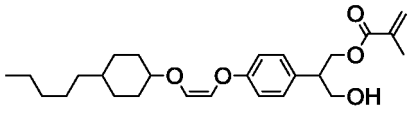
1ε-6-108 

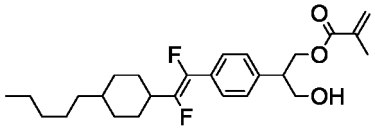
1ε-6-109 

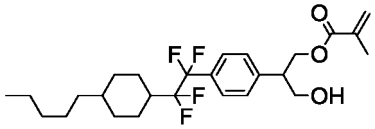
1ε-6-110 

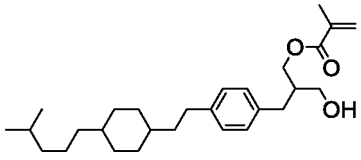
1ε-6-111 

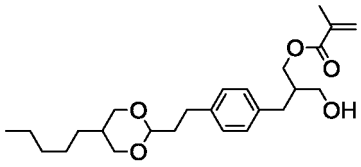
1ε-6-112 

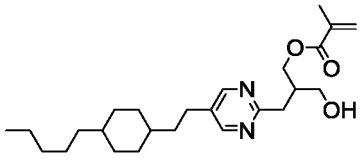
1ε-6-113 

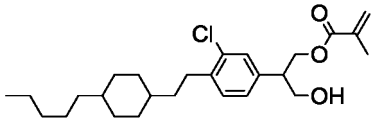
1ε-6-114 

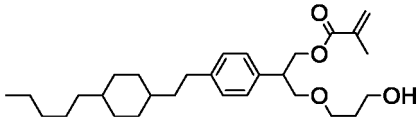
1ε-6-115 

1ε-6-116 

1ε-6-117 

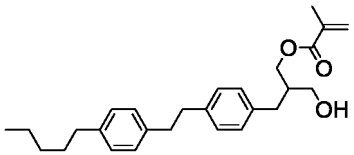
1ε-6-118 

1ε-6-119 

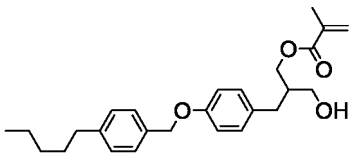
1ε-6-120 

No.

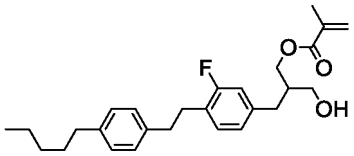
1ε-6-121



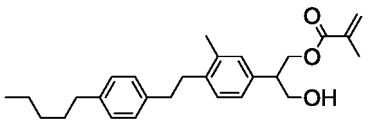
1ε-6-122



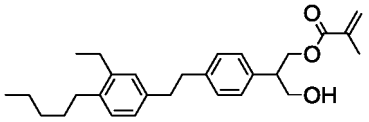
1ε-6-123



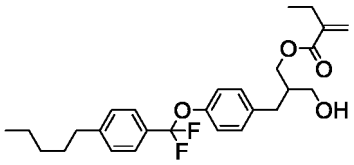
1ε-6-124



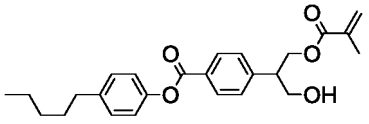
1ε-6-125



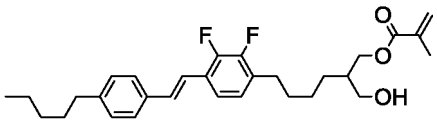
1ε-6-126



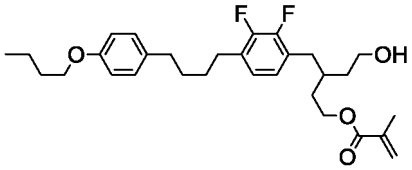
1ε-6-127



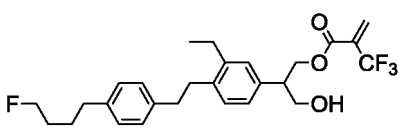
1ε-6-128



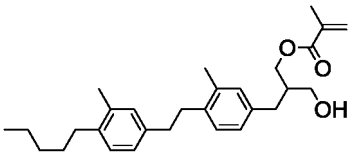
1ε-6-129



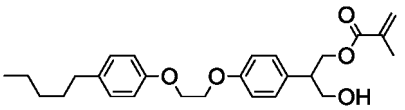
1ε-6-130



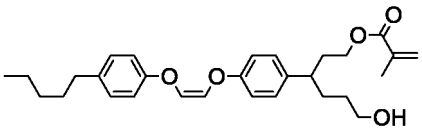
1ε-6-131



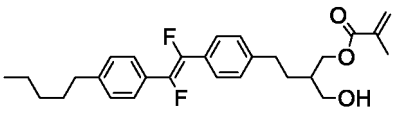
1ε-6-132



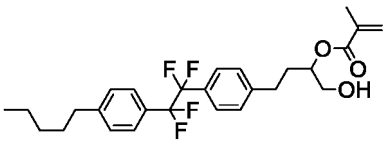
1ε-6-133



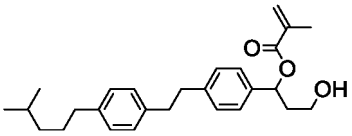
1ε-6-134



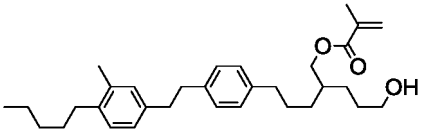
1ε-6-135



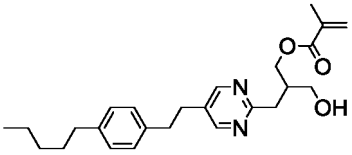
1ε-6-136



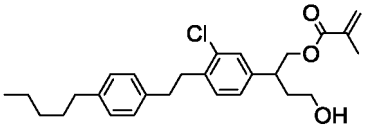
1ε-6-137



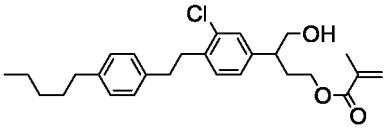
1ε-6-138



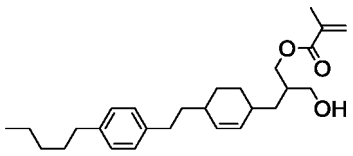
1ε-6-139

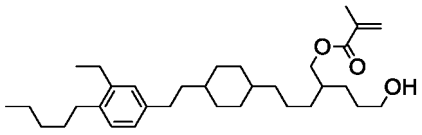


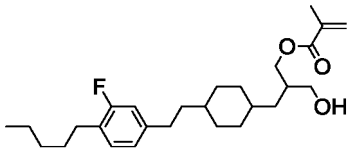
1ε-6-140

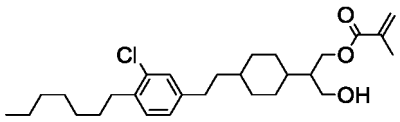


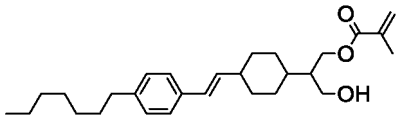
No.

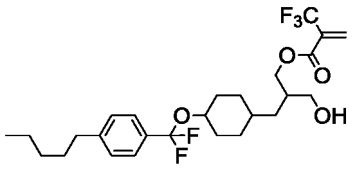
1ε-6-141 

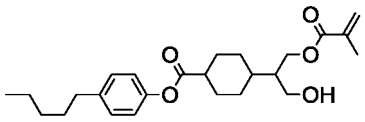
1ε-6-142 

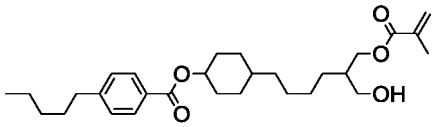
1ε-6-143 

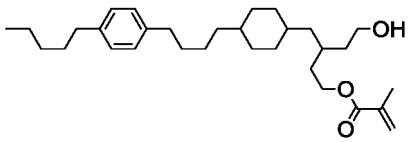
1ε-6-144 

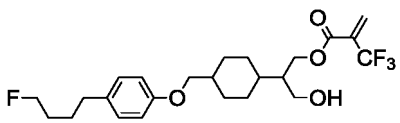
1ε-6-145 

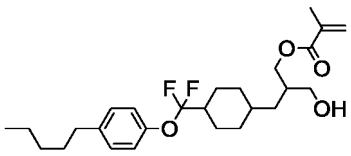
1ε-6-146 

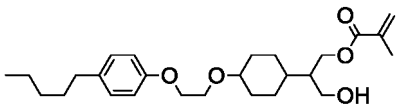
1ε-6-147 

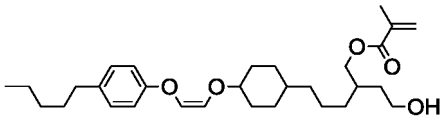
1ε-6-148 

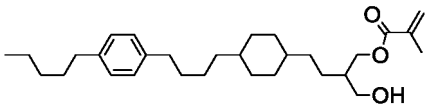
1ε-6-149 

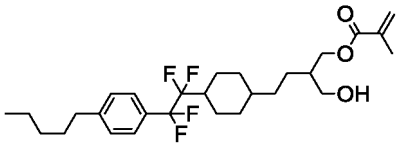
1ε-6-150 

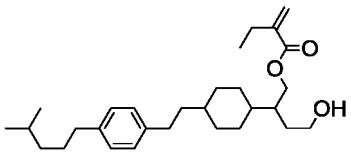
1ε-6-151 

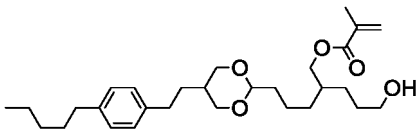
1ε-6-152 

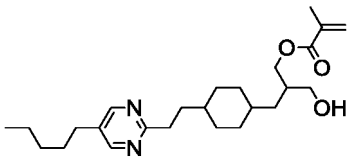
1ε-6-153 

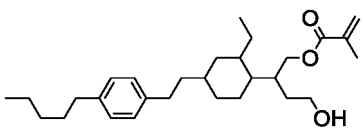
1ε-6-154 

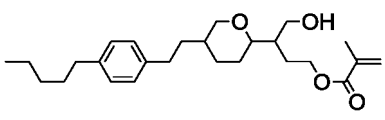
1ε-6-155 

1ε-6-156 

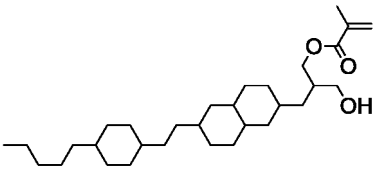
1ε-6-157 

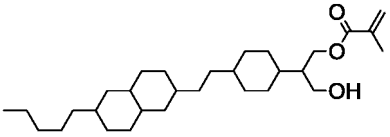
1ε-6-158 

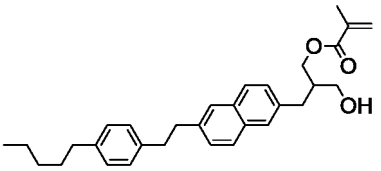
1ε-6-159 

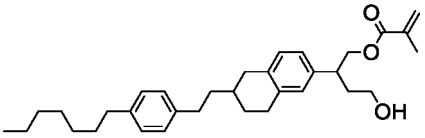
1ε-6-160 

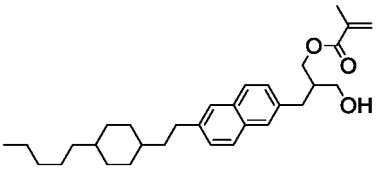
No.

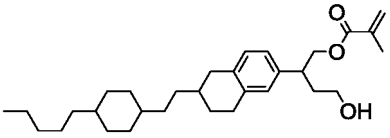
1ε-6-161 

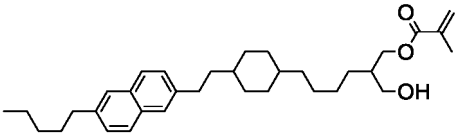
1ε-6-162 

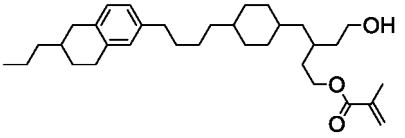
1ε-6-163 

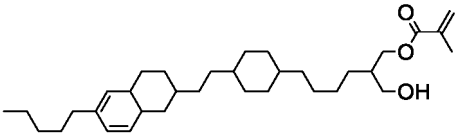
1ε-6-164 

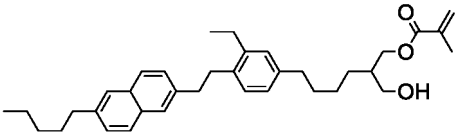
1ε-6-165 

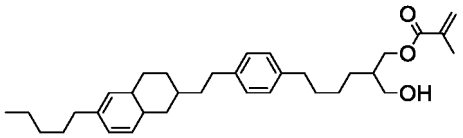
1ε-6-166 

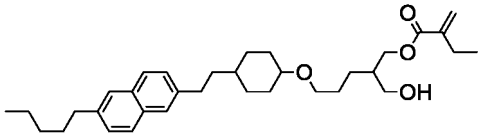
1ε-6-167 

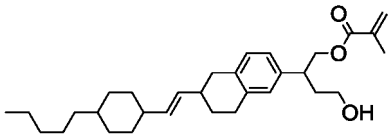
1ε-6-168 

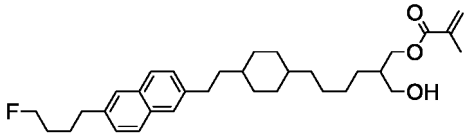
1ε-6-169 

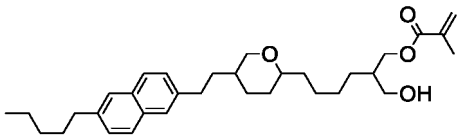
1ε-6-170 

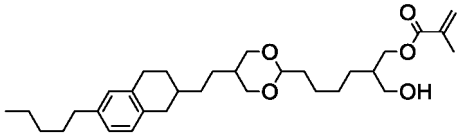
1ε-6-171 

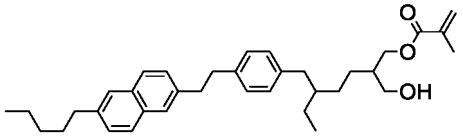
1ε-6-172 

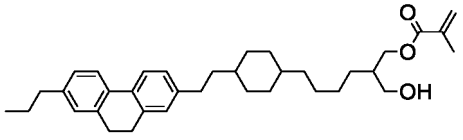
1ε-6-173 

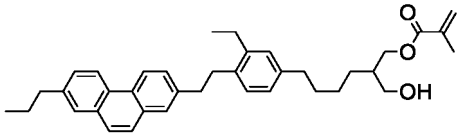
1ε-6-174 

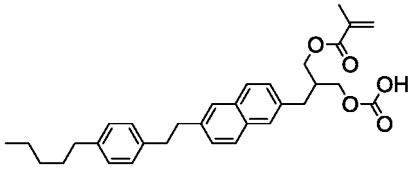
1ε-6-175 

1ε-6-176 

1ε-6-177 

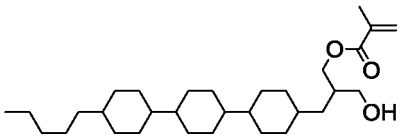
1ε-6-178 

1ε-6-179 

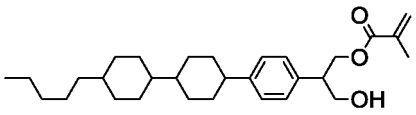
1ε-6-180 

No.

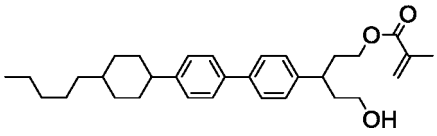
1ε-7-1



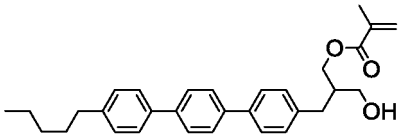
1ε-7-2



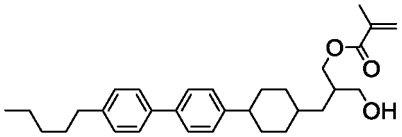
1ε-7-3



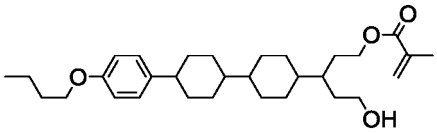
1ε-7-4



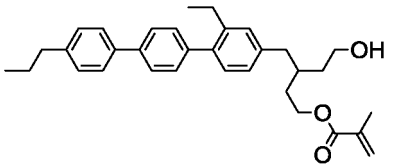
1ε-7-5



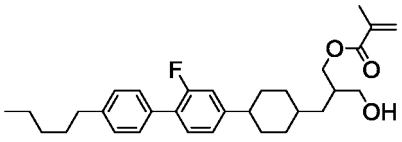
1ε-7-6



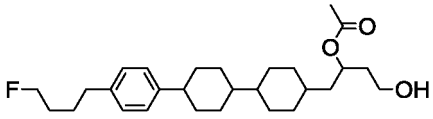
1ε-7-7



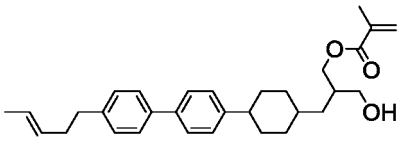
1ε-7-8



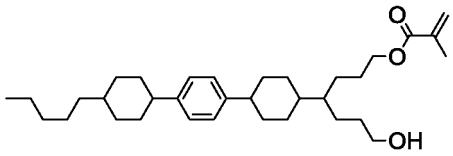
1ε-7-9



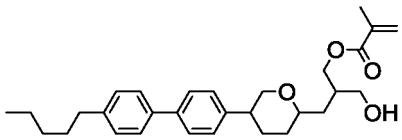
1ε-7-10



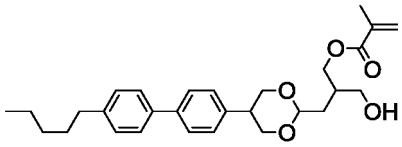
1ε-7-11



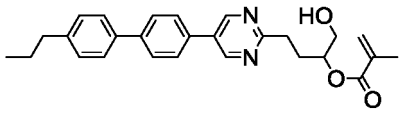
1ε-7-12



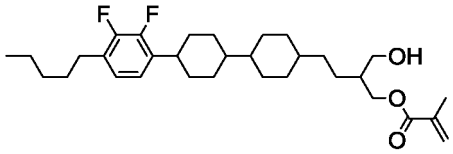
1ε-7-13



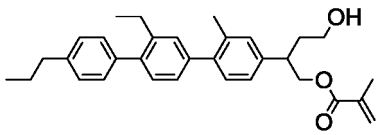
1ε-7-14



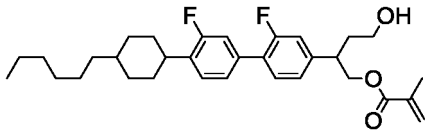
1ε-7-15



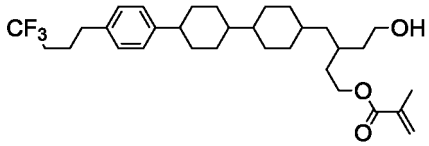
1ε-7-16



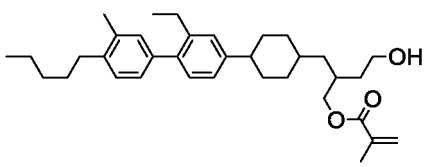
1ε-7-17



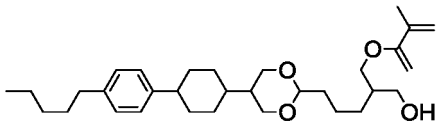
1ε-7-18



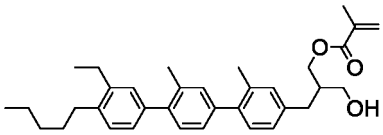
1ε-7-19

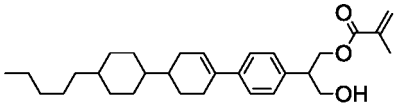


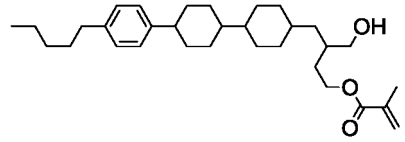
1ε-7-20

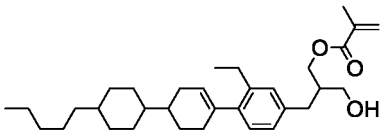


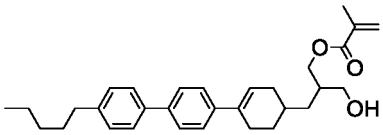
No.

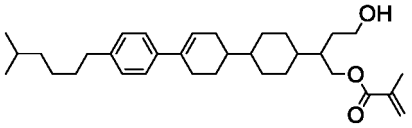
1ε-7-21 

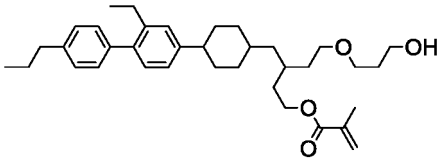
1ε-7-22 

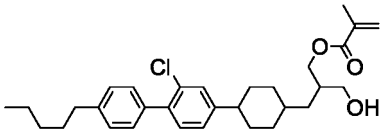
1ε-7-23 

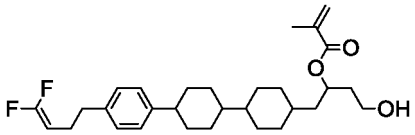
1ε-7-24 

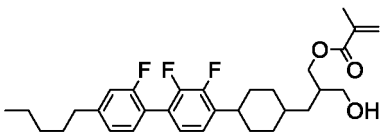
1ε-7-25 

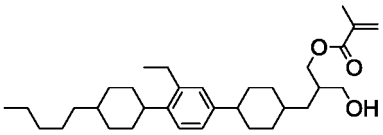
1ε-7-26 

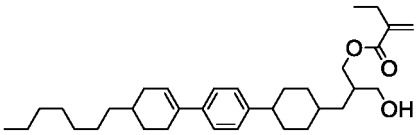
1ε-7-27 

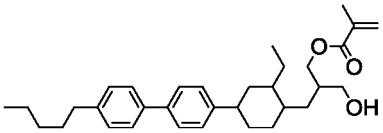
1ε-7-28 

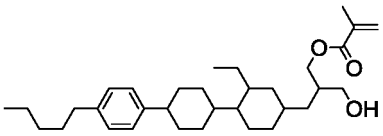
1ε-7-29 

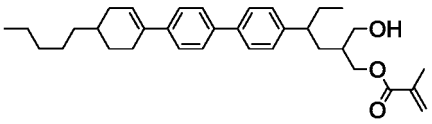
1ε-7-30 

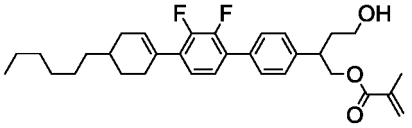
1ε-7-31 

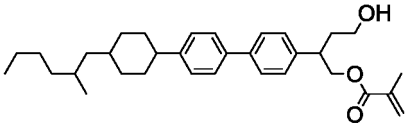
1ε-7-32 

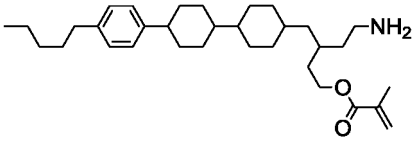
1ε-7-33 

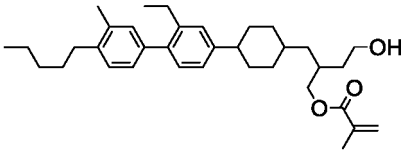
1ε-7-34 

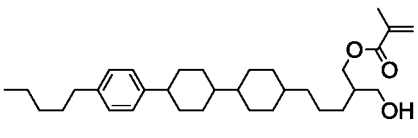
1ε-7-35 

1ε-7-36 

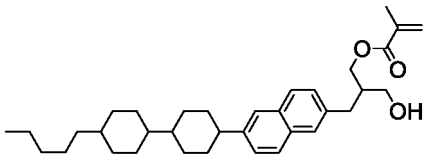
1ε-7-37 

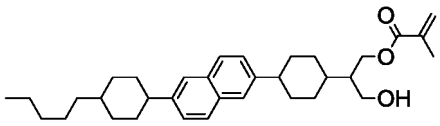
1ε-7-38 

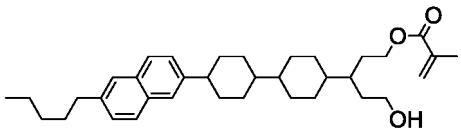
1ε-7-39 

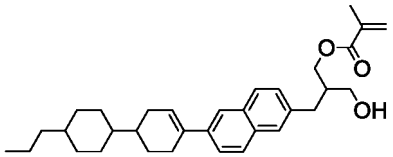
1ε-7-40 

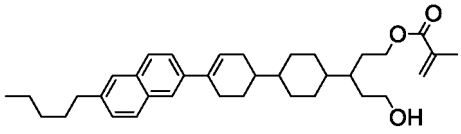
No.

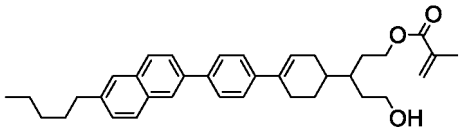
1ε-7-41 

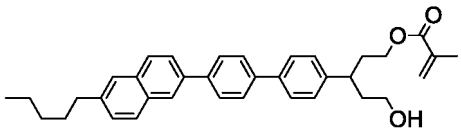
1ε-7-42 

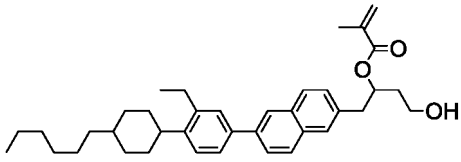
1ε-7-43 

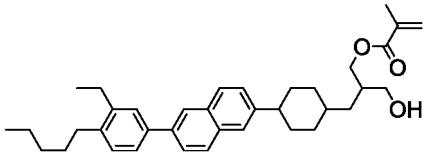
1ε-7-44 

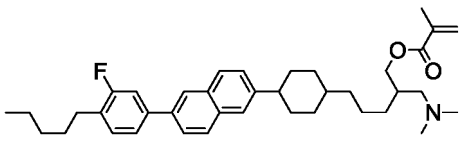
1ε-7-45 

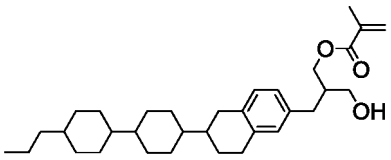
1ε-7-46 

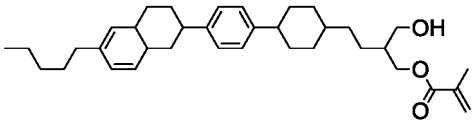
1ε-7-47 

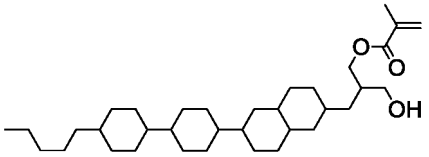
1ε-7-48 

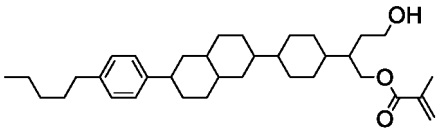
1ε-7-49 

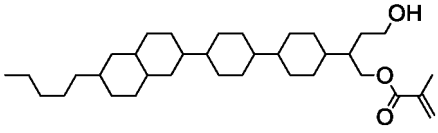
1ε-7-50 

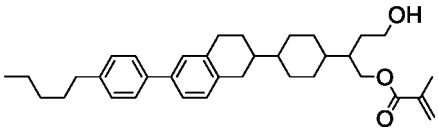
1ε-7-51 

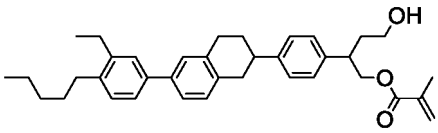
1ε-7-52 

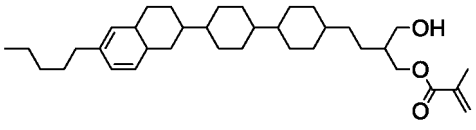
1ε-7-53 

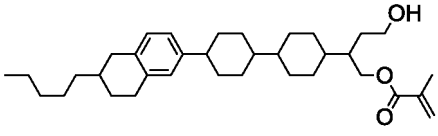
1ε-7-54 

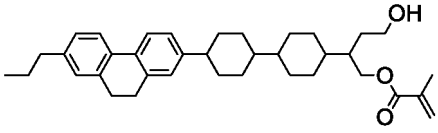
1ε-7-55 

1ε-7-56 

1ε-7-57 

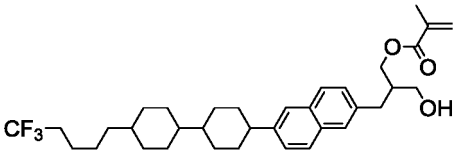
1ε-7-58 

1ε-7-59 

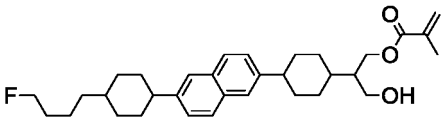
1ε-7-60 

No.

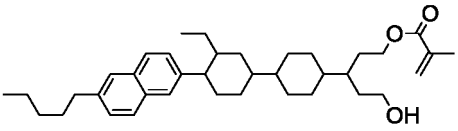
1ε-7-61



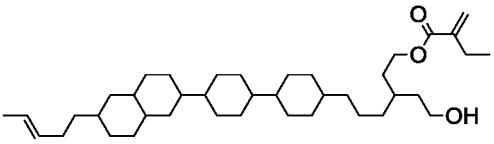
1ε-7-62



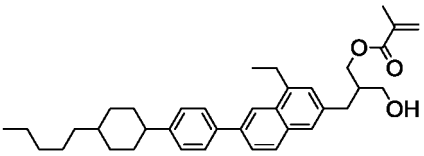
1ε-7-63



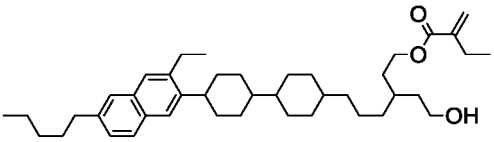
1ε-7-64



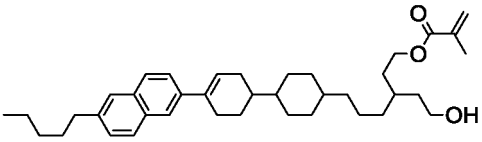
1ε-7-65



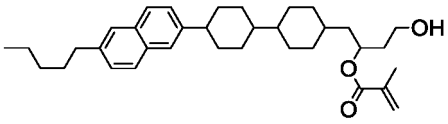
1ε-7-66



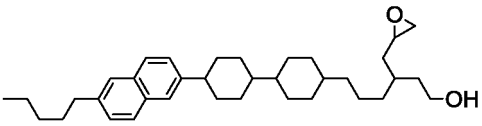
1ε-7-67



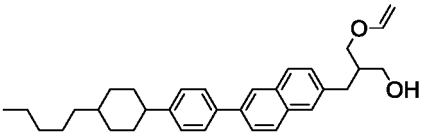
1ε-7-68



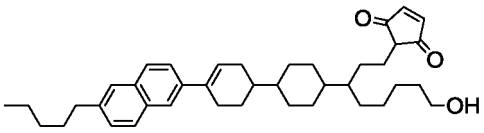
1ε-7-69



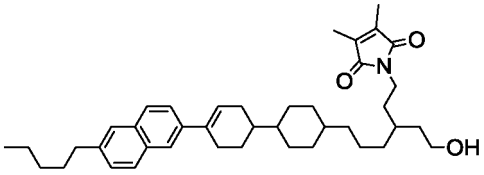
1ε-7-70



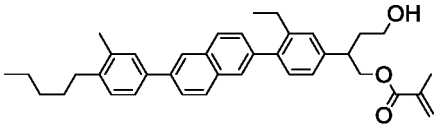
1ε-7-71



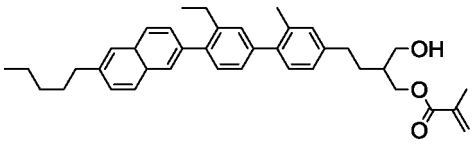
1ε-7-72



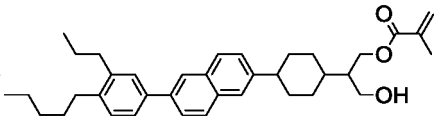
1ε-7-73



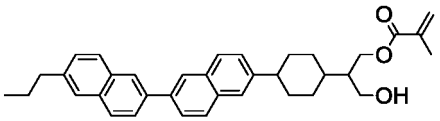
1ε-7-74



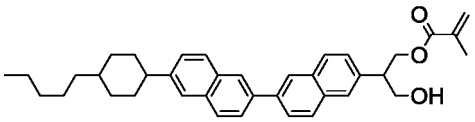
1ε-7-75



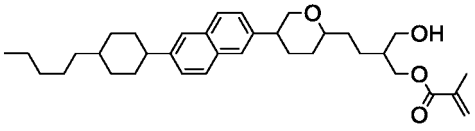
1ε-7-76



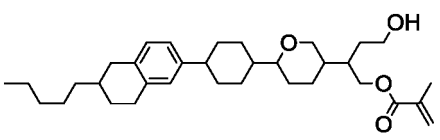
1ε-7-77



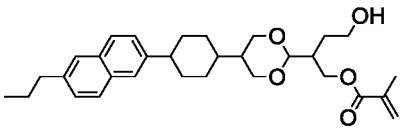
1ε-7-78



1ε-7-79

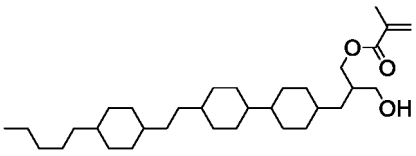


1ε-7-80

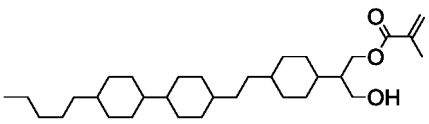


No.

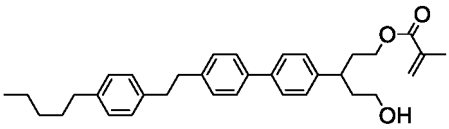
1ε-7-81



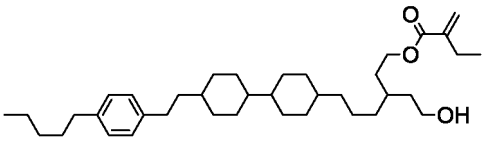
1ε-7-82



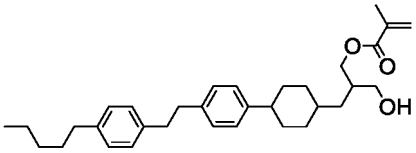
1ε-7-83



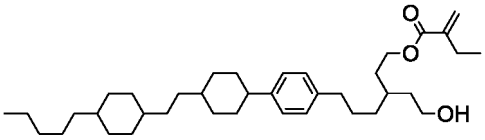
1ε-7-84



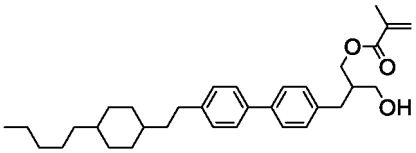
1ε-7-85



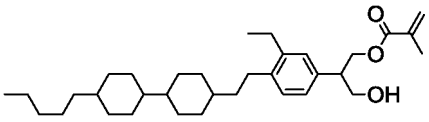
1ε-7-86



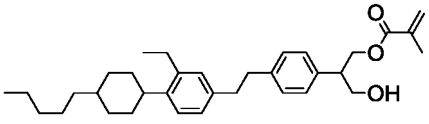
1ε-7-87



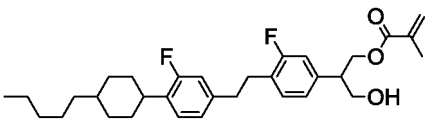
1ε-7-88



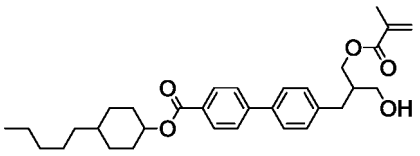
1ε-7-89



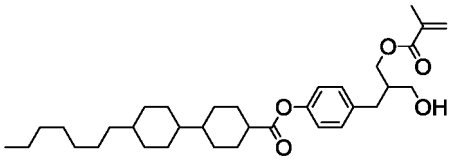
1ε-7-90



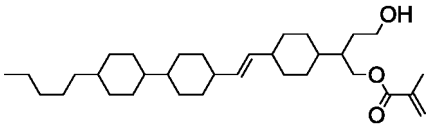
1ε-7-91



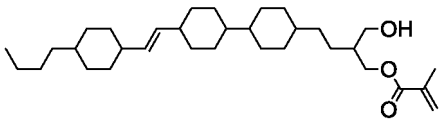
1ε-7-92



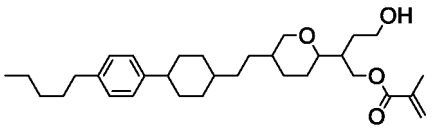
1ε-7-93



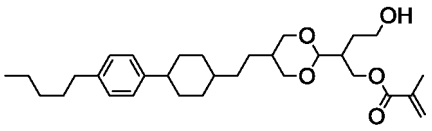
1ε-7-94



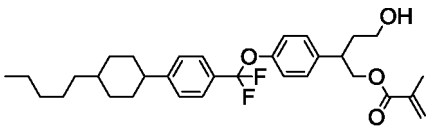
1ε-7-95



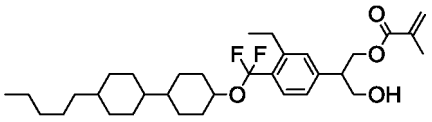
1ε-7-96



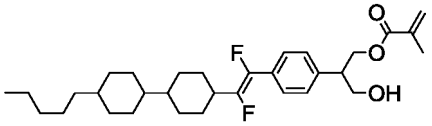
1ε-7-97



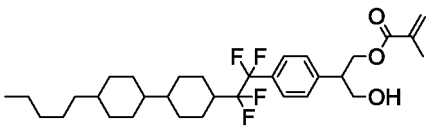
1ε-7-98



1ε-7-99

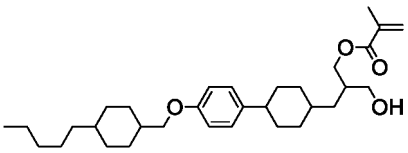


1ε-7-100

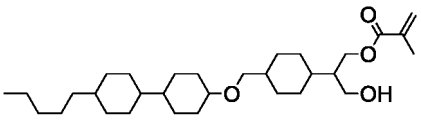


No.

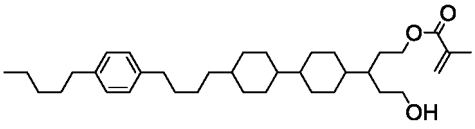
1ε-7-101



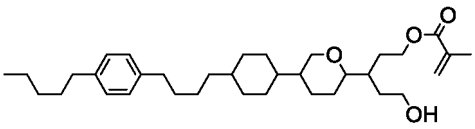
1ε-7-102



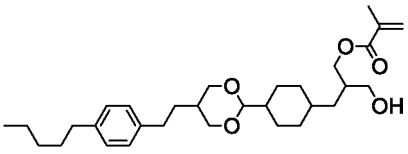
1ε-7-103



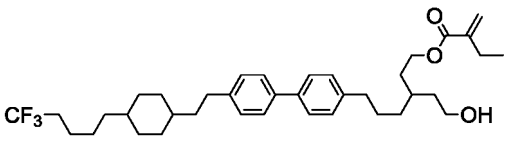
1ε-7-104



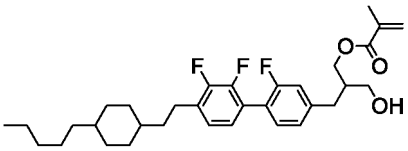
1ε-7-105



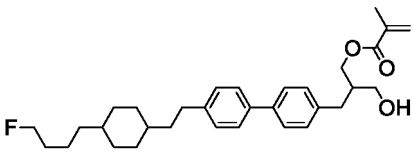
1ε-7-106



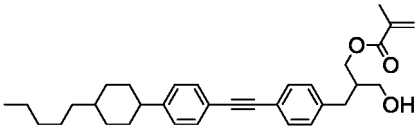
1ε-7-107



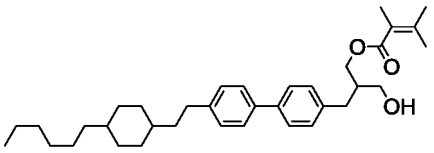
1ε-7-108



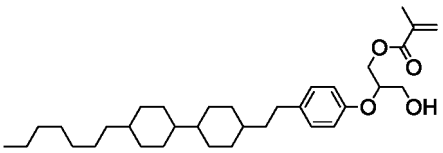
1ε-7-109



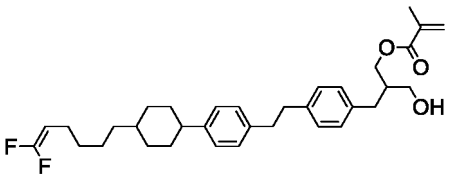
1ε-7-110



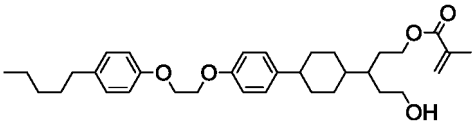
1ε-7-111



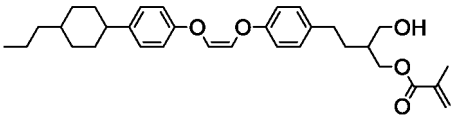
1ε-7-112



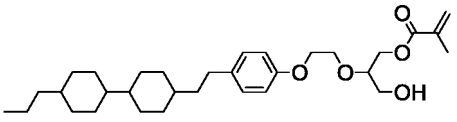
1ε-7-113



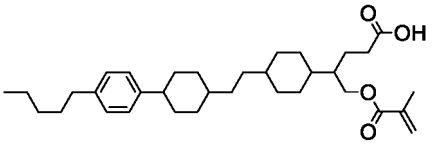
1ε-7-114



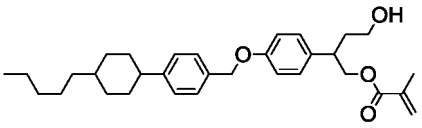
1ε-7-115



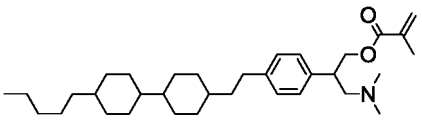
1ε-7-116



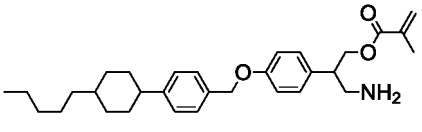
1ε-7-117



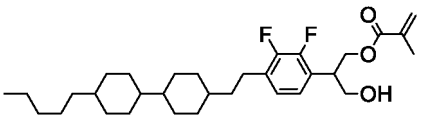
1ε-7-118



1ε-7-119

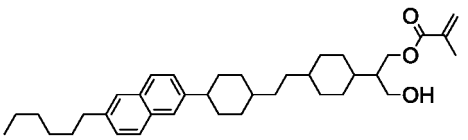


1ε-7-120

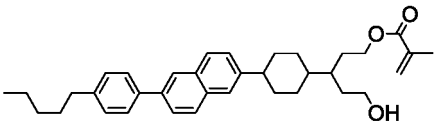


No.

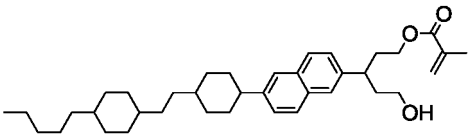
1ε-7-121



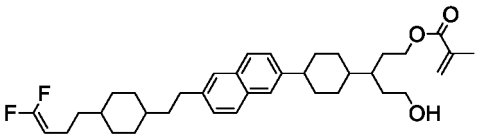
1ε-7-122



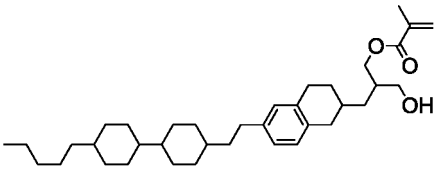
1ε-7-123



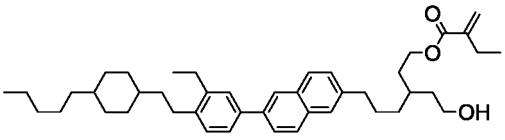
1ε-7-124



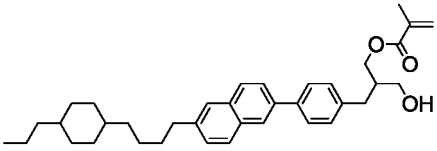
1ε-7-125



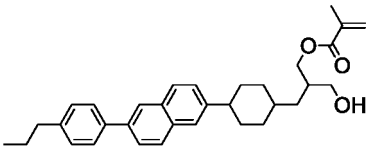
1ε-7-126



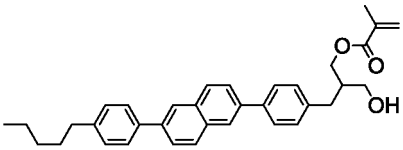
1ε-7-127



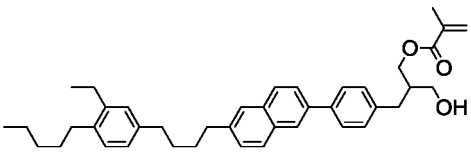
1ε-7-128



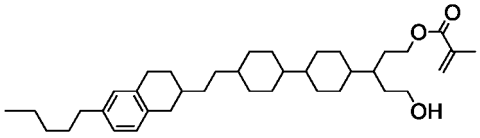
1ε-7-129



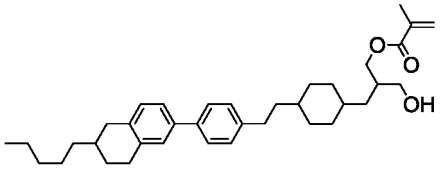
1ε-7-130



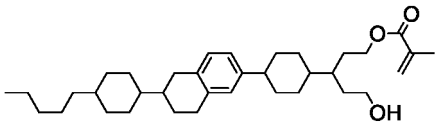
1ε-7-131



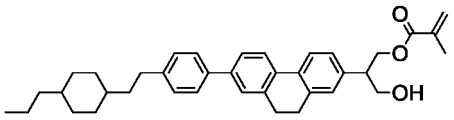
1ε-7-132



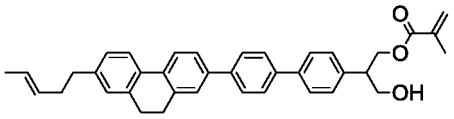
1ε-7-133



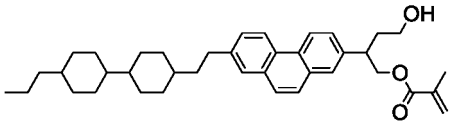
1ε-7-134



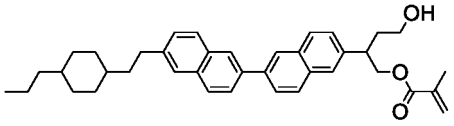
1ε-7-135



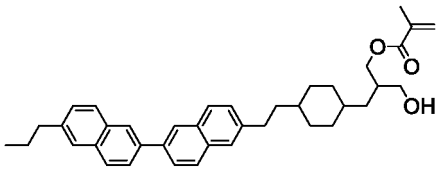
1ε-7-136



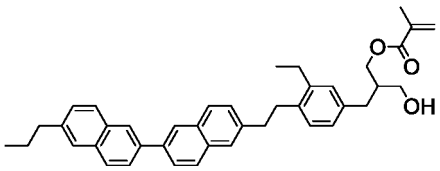
1ε-7-137



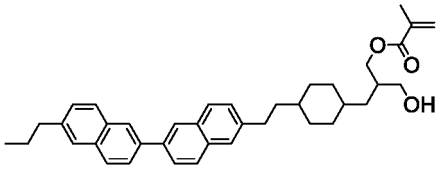
1ε-7-138



1ε-7-139

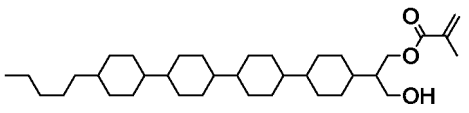


1ε-7-140

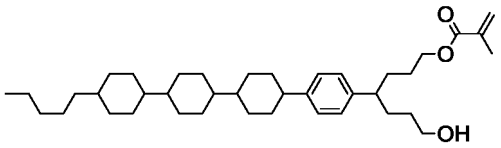


No.

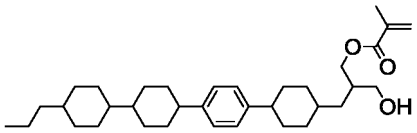
1ε-8-1



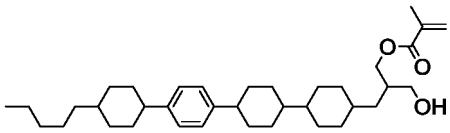
1ε-8-2



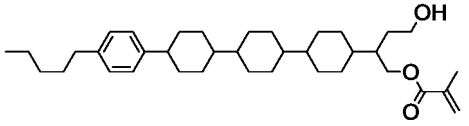
1ε-8-3



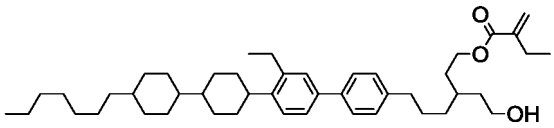
1ε-8-4



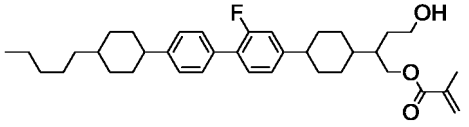
1ε-8-5



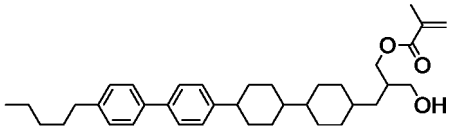
1ε-8-6



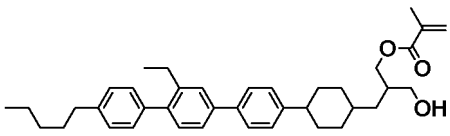
1ε-8-7



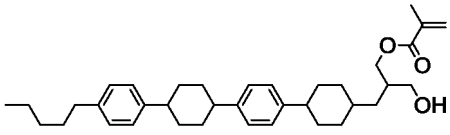
1ε-8-8



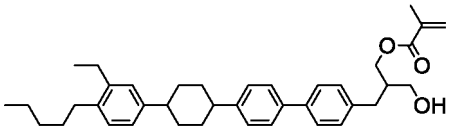
1ε-8-9



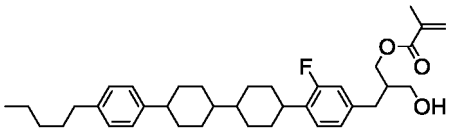
1ε-8-10



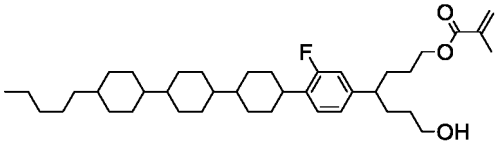
1ε-8-11



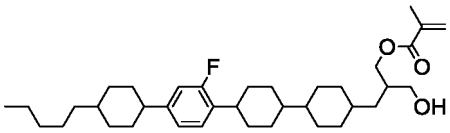
1ε-8-12



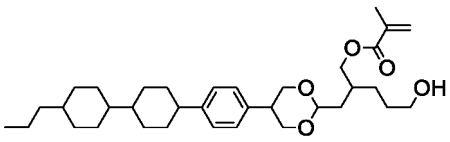
1ε-8-13



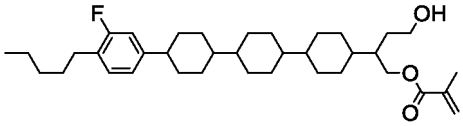
1ε-8-14



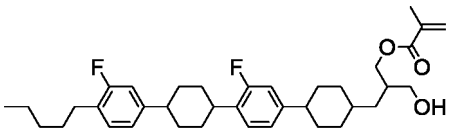
1ε-8-15



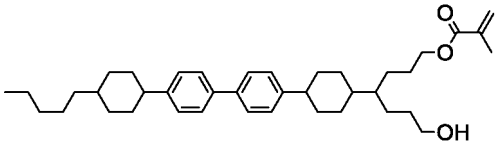
1ε-8-16



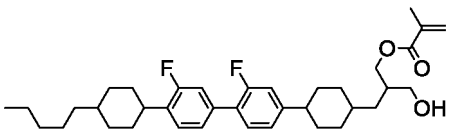
1ε-8-17



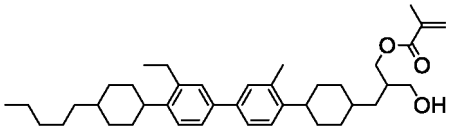
1ε-8-18



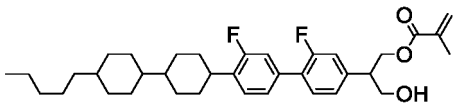
1ε-8-19

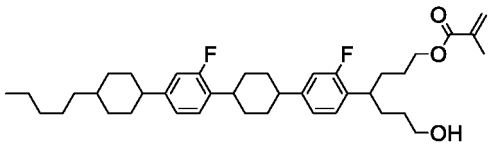


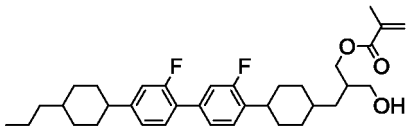
1ε-8-20

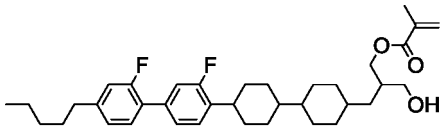


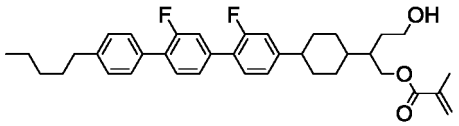
No.

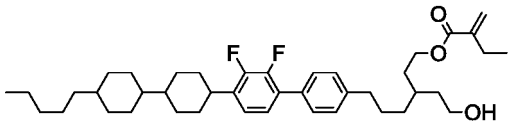
1ε-8-21 

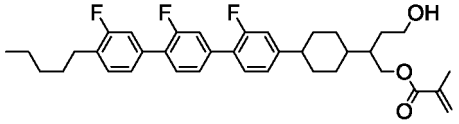
1ε-8-22 

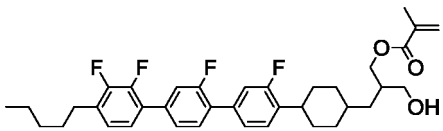
1ε-8-23 

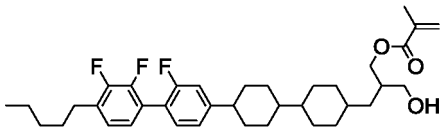
1ε-8-24 

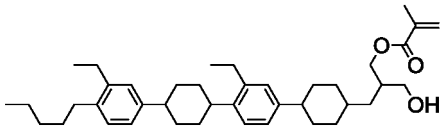
1ε-8-25 

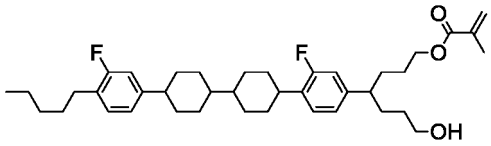
1ε-8-26 

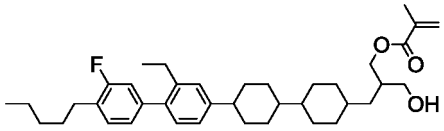
1ε-8-27 

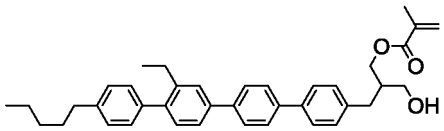
1ε-8-28 

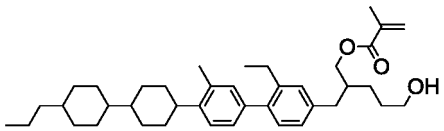
1ε-8-29 

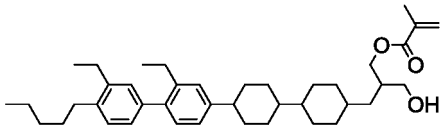
1ε-8-30 

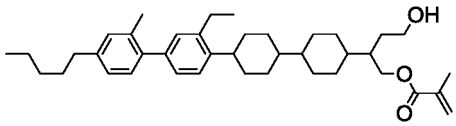
1ε-8-31 

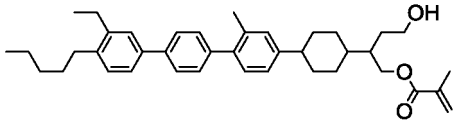
1ε-8-32 

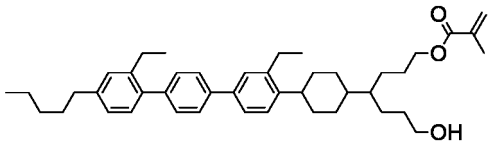
1ε-8-33 

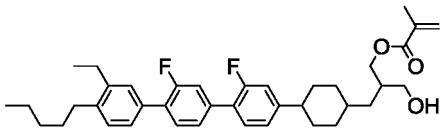
1ε-8-34 

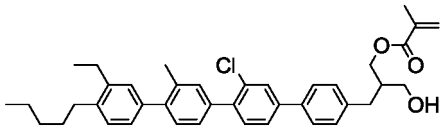
1ε-8-35 

1ε-8-36 

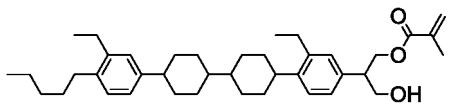
1ε-8-37 

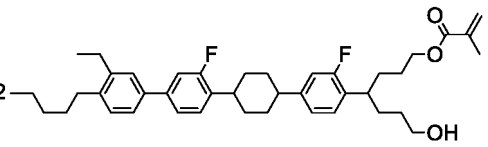
1ε-8-38 

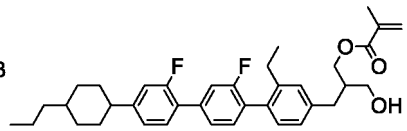
1ε-8-39 

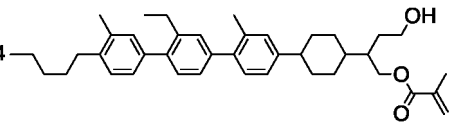
1ε-8-40 

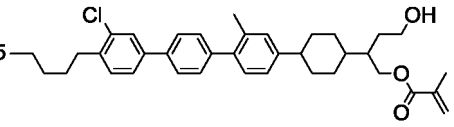
No.

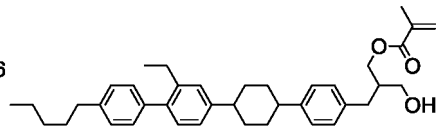
1ε-8-41 

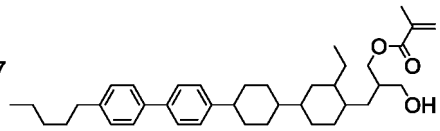
1ε-8-42 

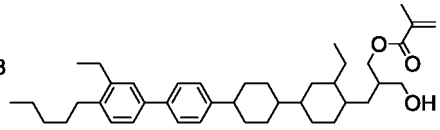
1ε-8-43 

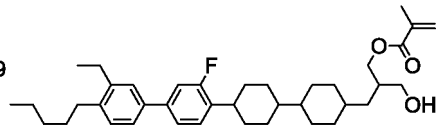
1ε-8-44 

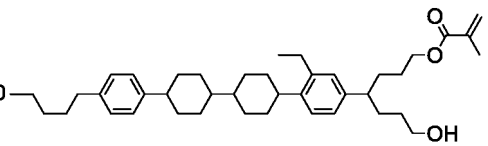
1ε-8-45 

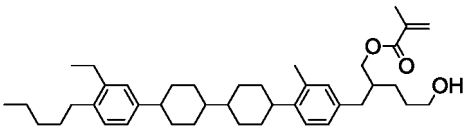
1ε-8-46 

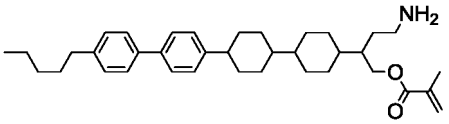
1ε-8-47 

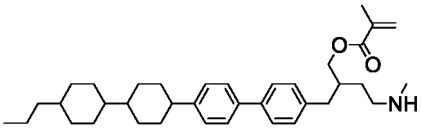
1ε-8-48 

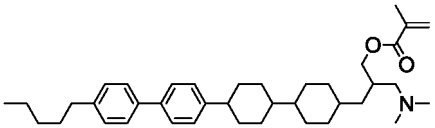
1ε-8-49 

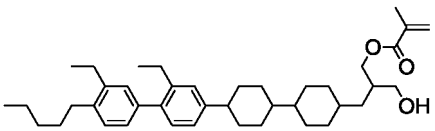
1ε-8-50 

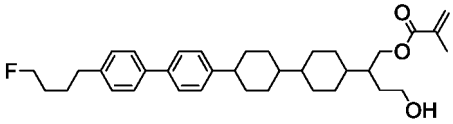
1ε-8-51 

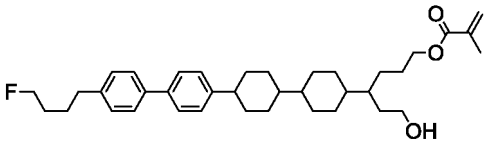
1ε-8-52 

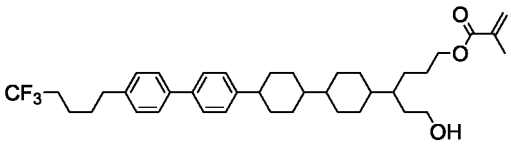
1ε-8-53 

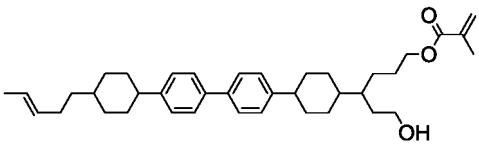
1ε-8-54 

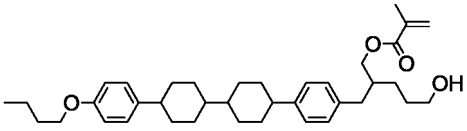
1ε-8-55 

1ε-8-56 

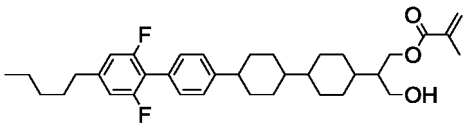
1ε-8-57 

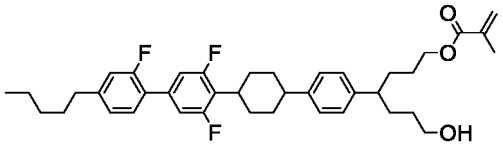
1ε-8-58 

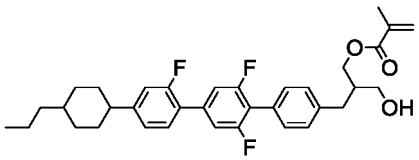
1ε-8-59 

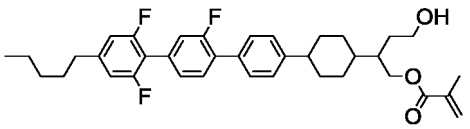
1ε-8-60 

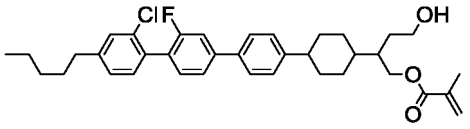
No.

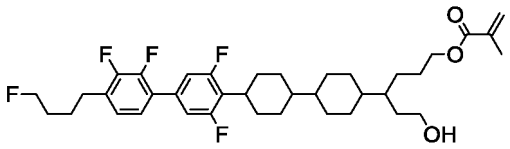
1ε-8-61 

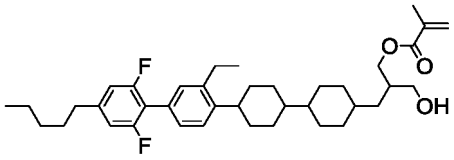
1ε-8-62 

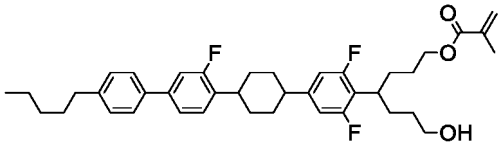
1ε-8-63 

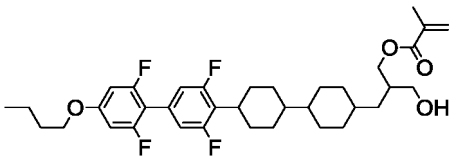
1ε-8-64 

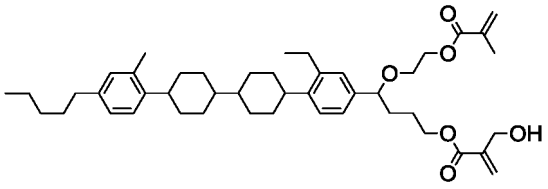
1ε-8-65 

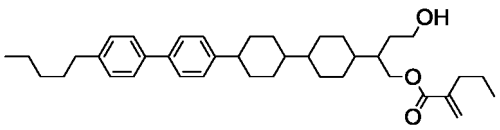
1ε-8-66 

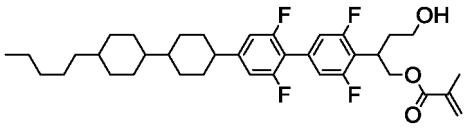
1ε-8-67 

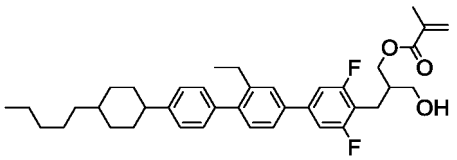
1ε-8-68 

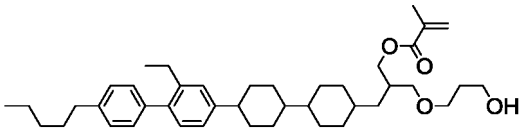
1ε-8-69 

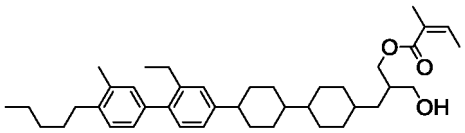
1ε-8-70 

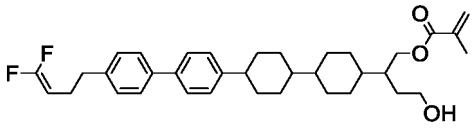
1ε-8-71 

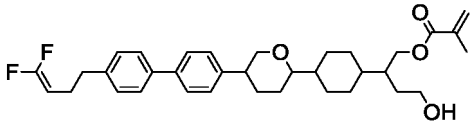
1ε-8-72 

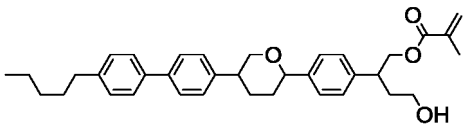
1ε-8-73 

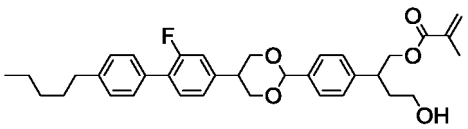
1ε-8-74 

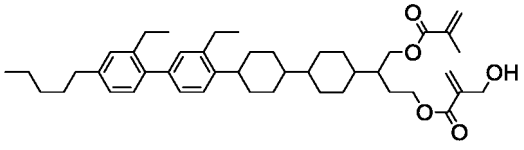
1ε-8-75 

1ε-8-76 

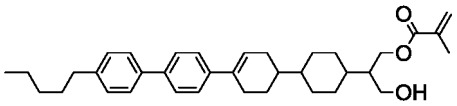
1ε-8-77 

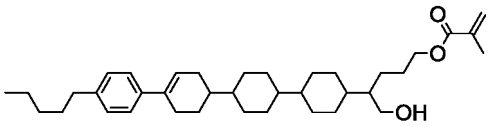
1ε-8-78 

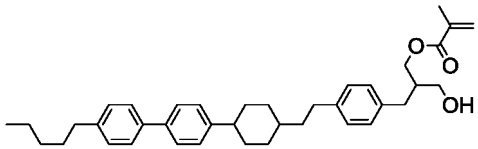
1ε-8-79 

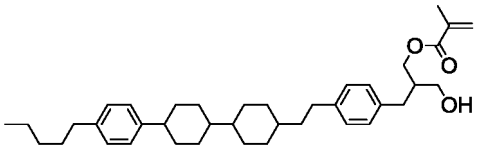
1ε-8-80 

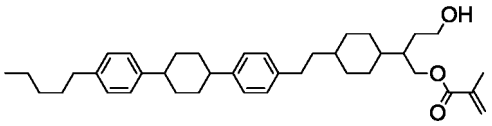
No.

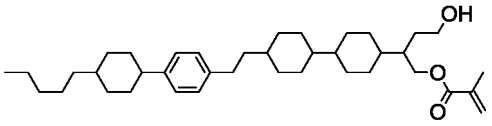
1ε-8-81 

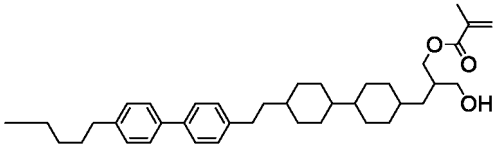
1ε-8-82 

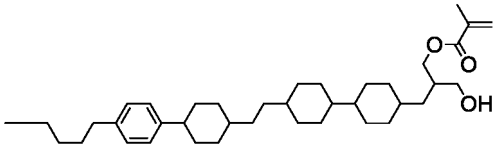
1ε-8-83 

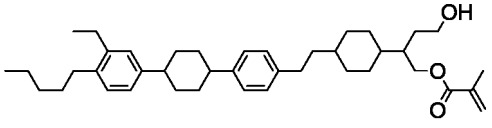
1ε-8-84 

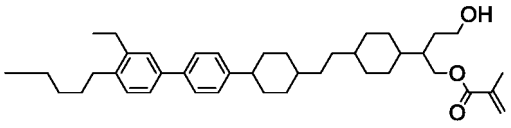
1ε-8-85 

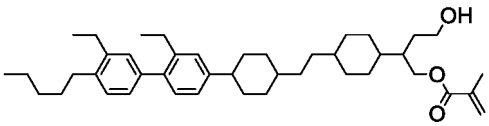
1ε-8-86 

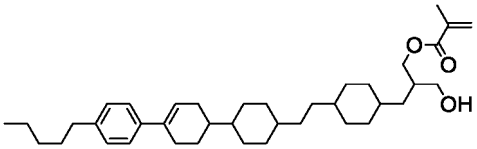
1ε-8-87 

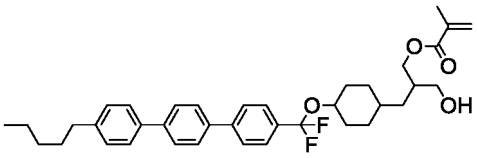
1ε-8-88 

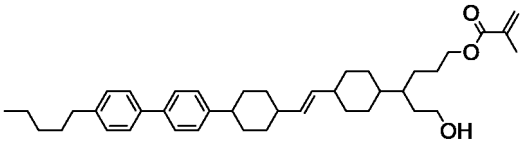
1ε-8-89 

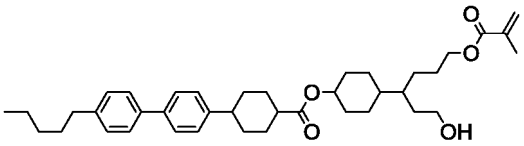
1ε-8-90 

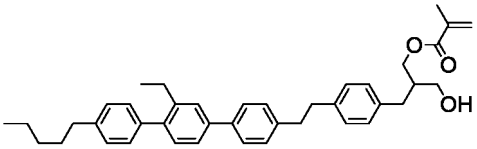
1ε-8-91 

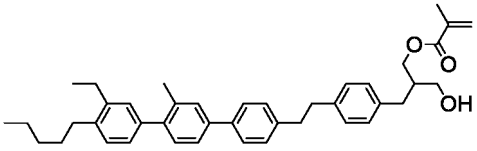
1ε-8-92 

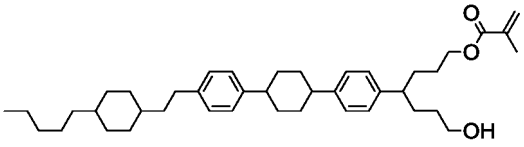
1ε-8-93 

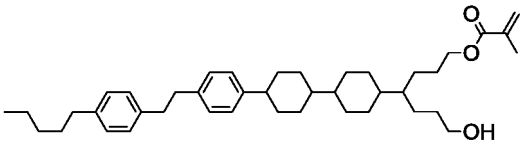
1ε-8-94 

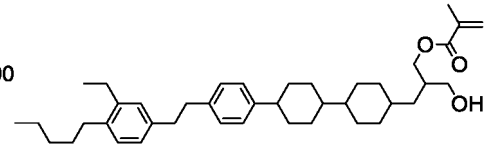
1ε-8-95 

1ε-8-96 

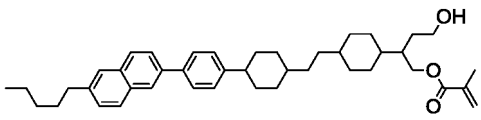
1ε-8-97 

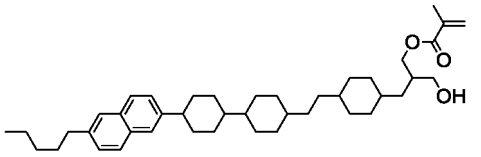
1ε-8-98 

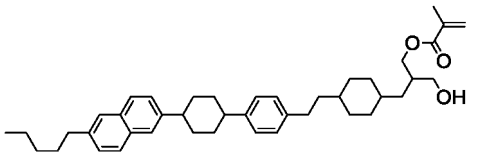
1ε-8-99 

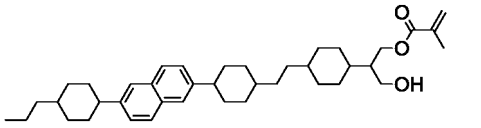
1ε-8-100 

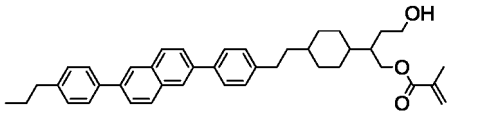
No.

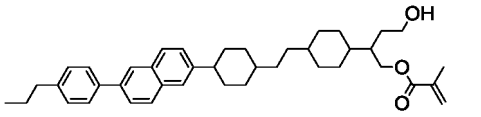
1ε-8-101 

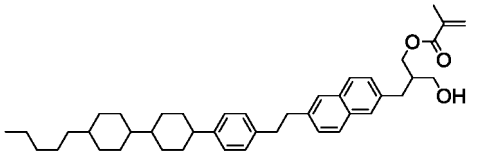
1ε-8-102 

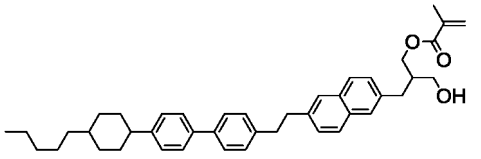
1ε-8-103 

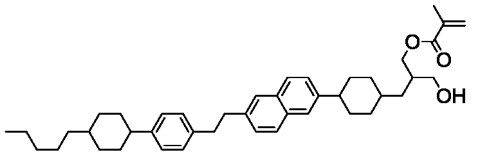
1ε-8-104 

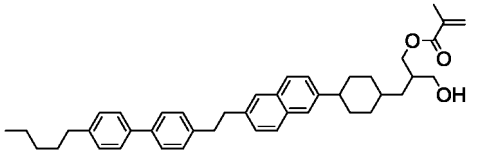
1ε-8-105 

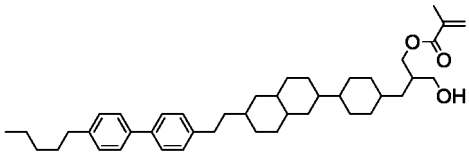
1ε-8-106 

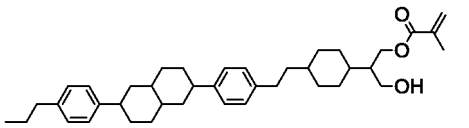
1ε-8-107 

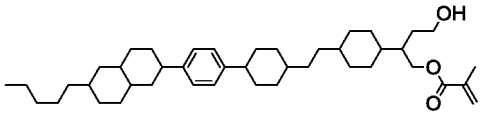
1ε-8-108 

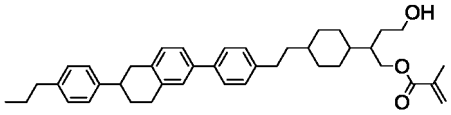
1ε-8-109 

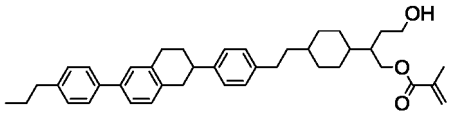
1ε-8-110 

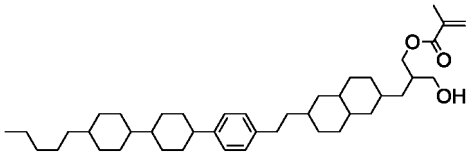
1ε-8-111 

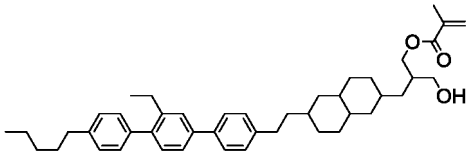
1ε-8-112 

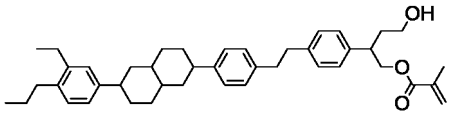
1ε-8-113 

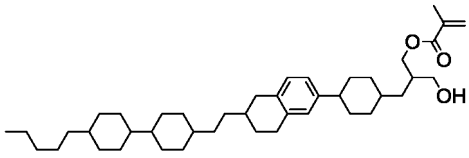
1ε-8-114 

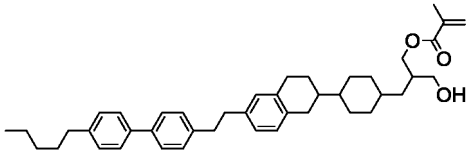
1ε-8-115 

1ε-8-116 

1ε-8-117 

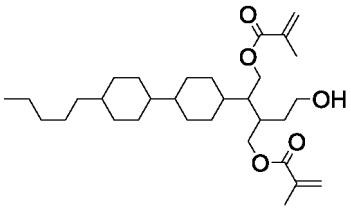
1ε-8-118 

1ε-8-119 

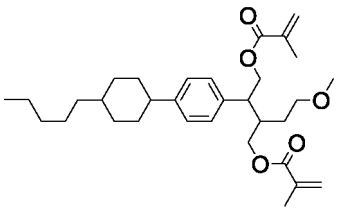
1ε-8-120 

No.

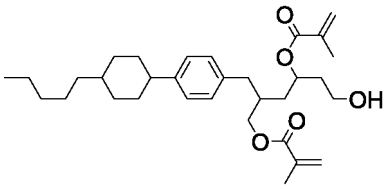
1ε-8-121



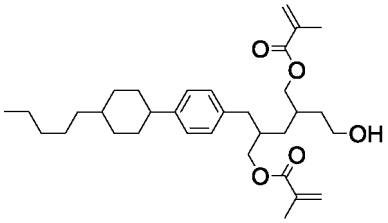
1ε-8-122



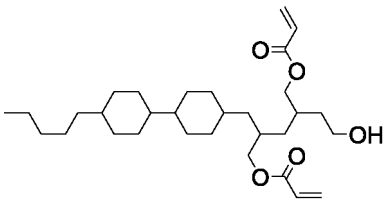
1ε-8-123



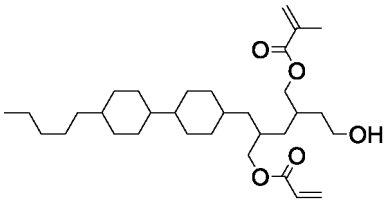
1ε-8-124



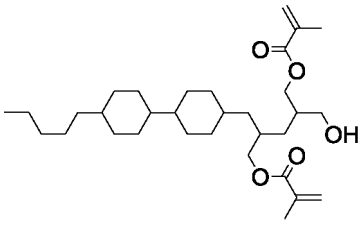
1ε-8-125



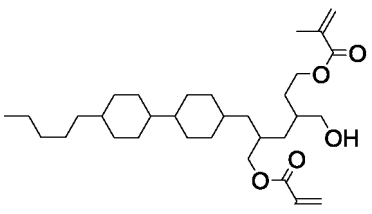
1ε-8-126



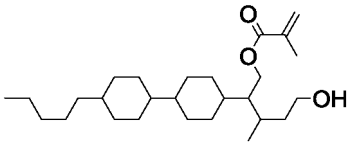
1ε-8-127



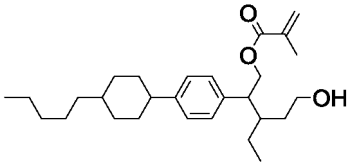
1ε-8-128



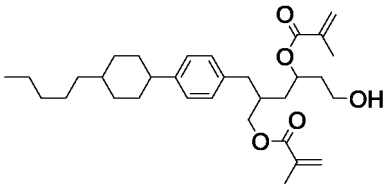
1ε-8-131



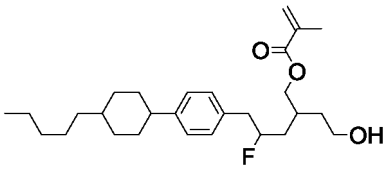
1ε-8-132



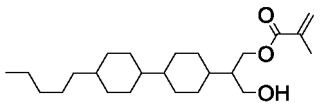
1ε-8-133

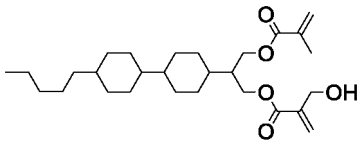


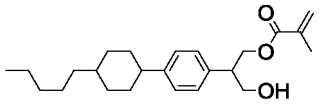
1ε-8-134

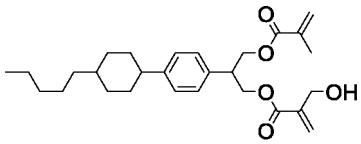


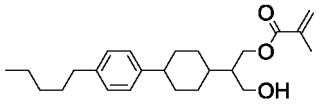
No.

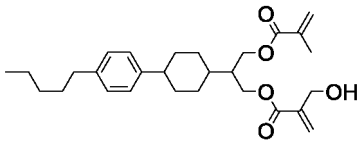
1ε-9-1 

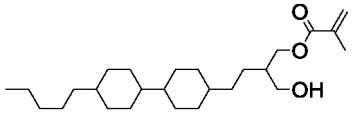
1ε-9-2 

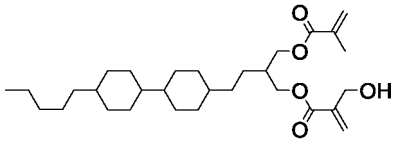
1ε-9-3 

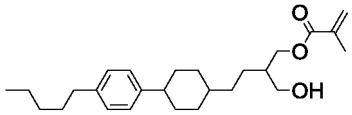
1ε-9-4 

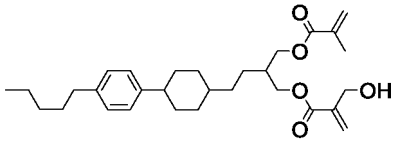
1ε-9-5 

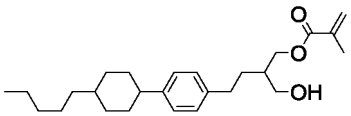
1ε-9-6 

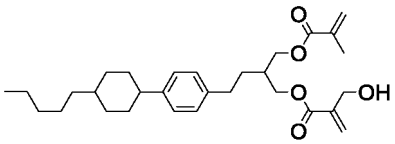
1ε-9-7 

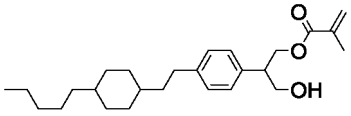
1ε-9-8 

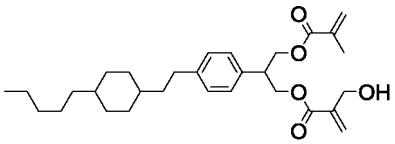
1ε-9-9 

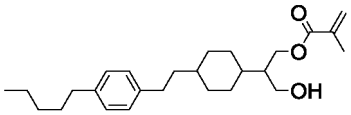
1ε-9-10 

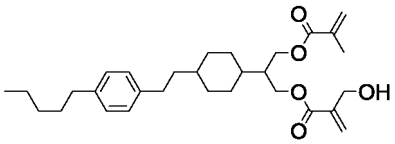
1ε-9-11 

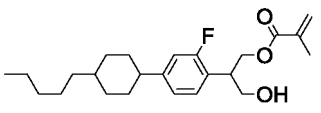
1ε-9-12 

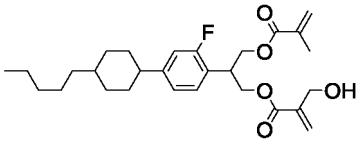
1ε-9-13 

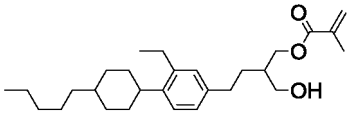
1ε-9-14 

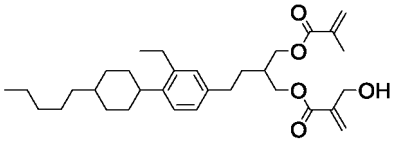
1ε-9-15 

1ε-9-16 

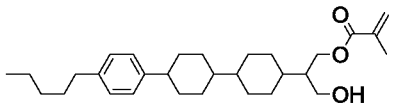
1ε-9-17 

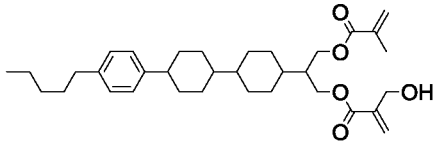
1ε-9-18 

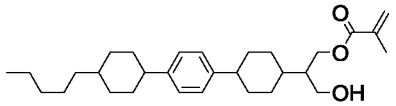
1ε-9-19 

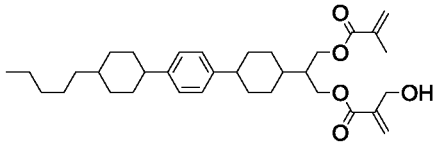
1ε-9-20 

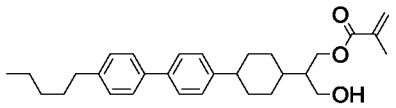
No.

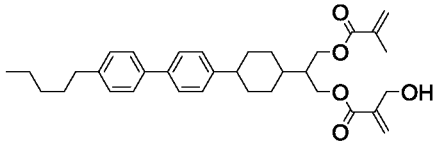
1ε-9-21 

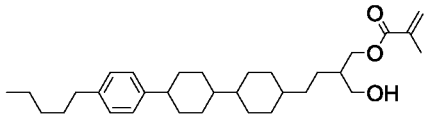
1ε-9-22 

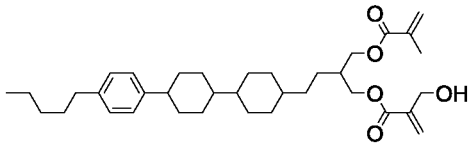
1ε-9-23 

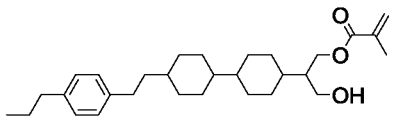
1ε-9-24 

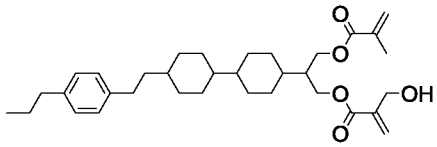
1ε-9-25 

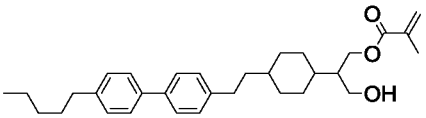
1ε-9-26 

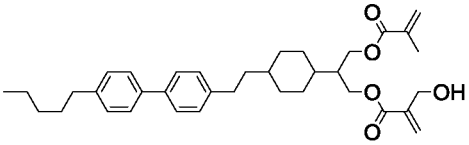
1ε-9-27 

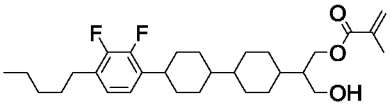
1ε-9-28 

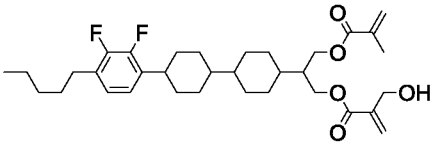
1ε-9-29 

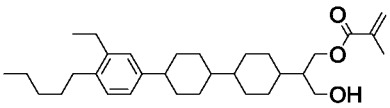
1ε-9-30 

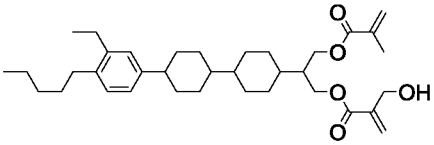
1ε-9-31 

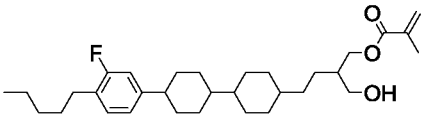
1ε-9-32 

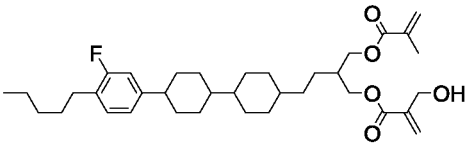
1ε-9-33 

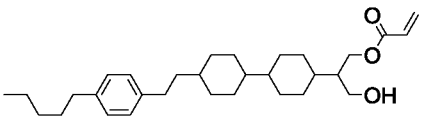
1ε-9-34 

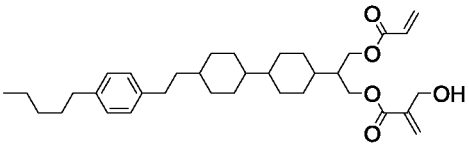
1ε-9-35 

1ε-9-36 

1ε-9-37 

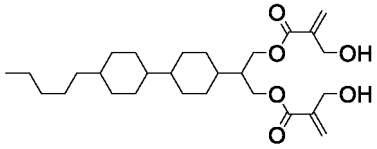
1ε-9-38 

1ε-9-39 

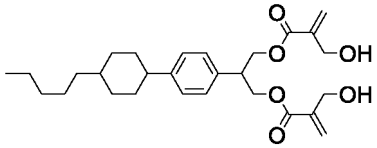
1ε-9-40 

No.

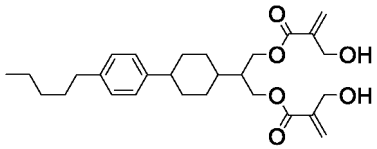
1ε-10-1



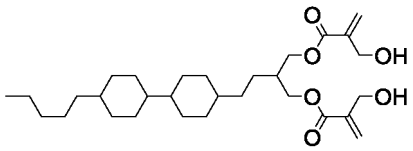
1ε-10-2



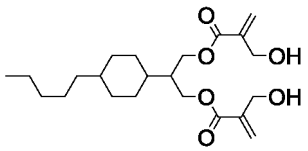
1ε-10-3



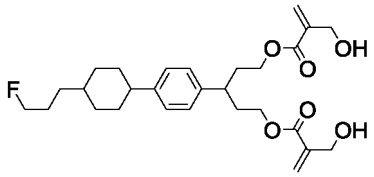
1ε-10-4



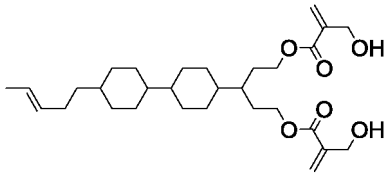
1ε-10-5



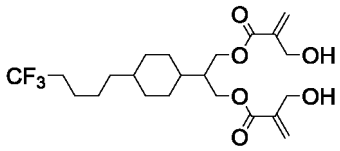
1ε-10-6



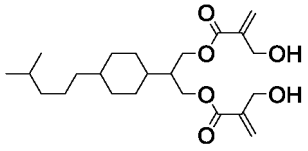
1ε-10-7



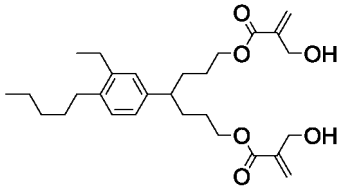
1ε-10-8



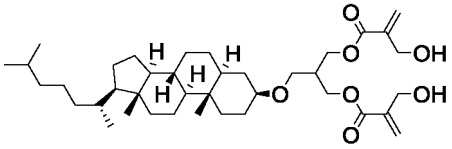
1ε-10-9



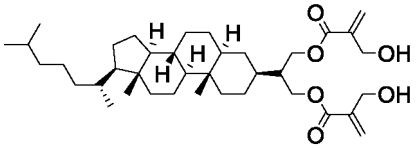
1ε-10-10



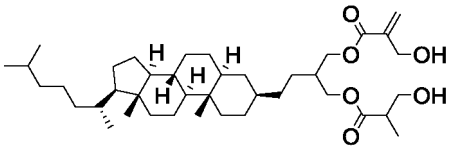
1ε-10-11



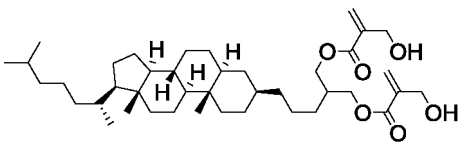
1ε-10-12



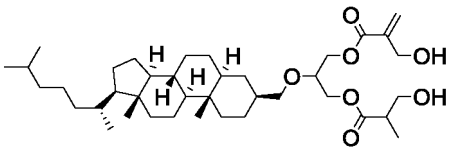
1ε-10-13



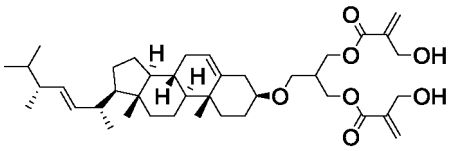
1ε-10-14



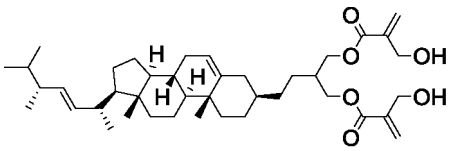
1ε-10-15



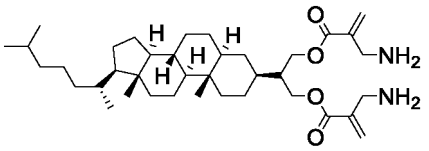
1ε-10-16



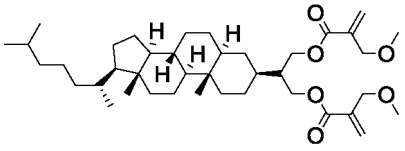
1ε-10-17



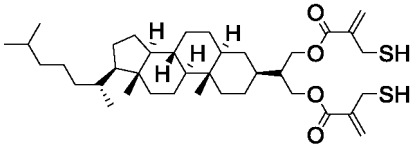
1ε-10-18



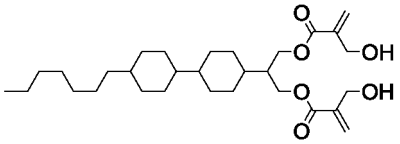
1ε-10-19

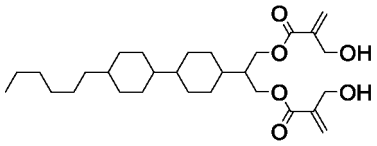


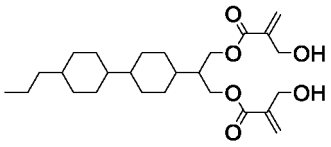
1ε-10-20

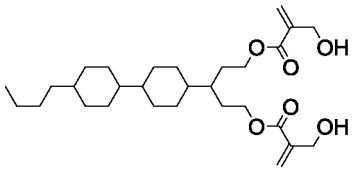


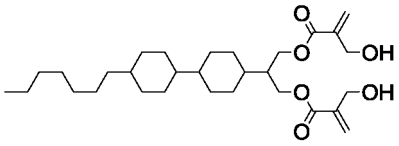
No.

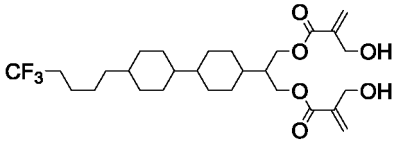
1ε-10-21 

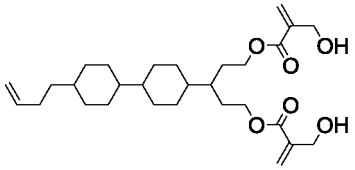
1ε-10-22 

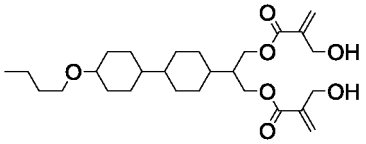
1ε-10-23 

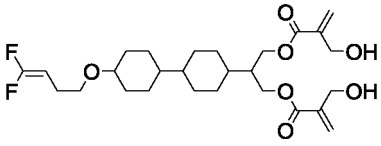
1ε-10-24 

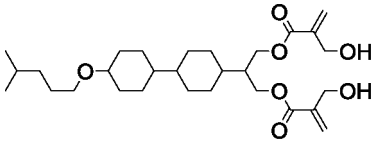
1ε-10-25 

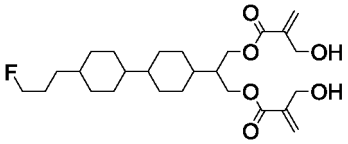
1ε-10-26 

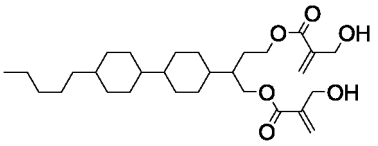
1ε-10-27 

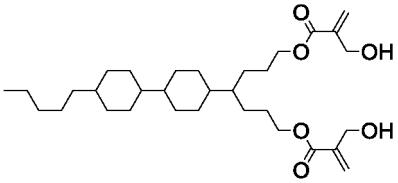
1ε-10-28 

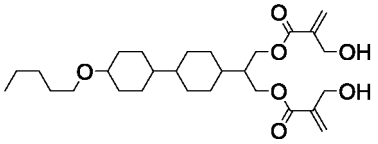
1ε-10-29 

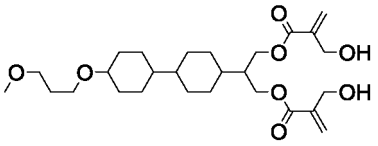
1ε-10-30 

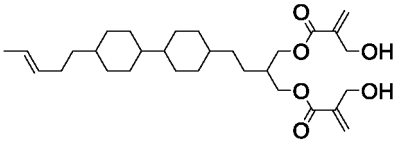
1ε-10-31 

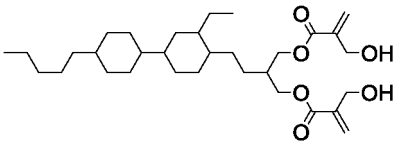
1ε-10-32 

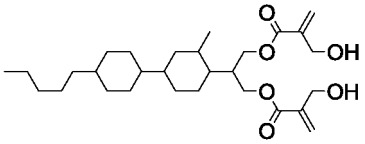
1ε-10-33 

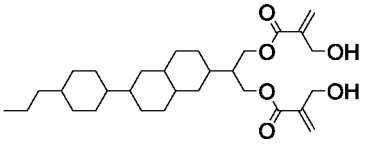
1ε-10-34 

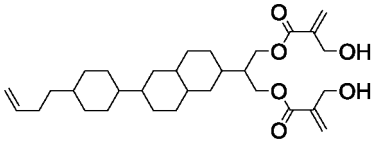
1ε-10-35 

1ε-10-36 

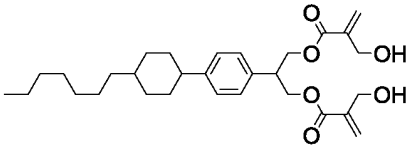
1ε-10-37 

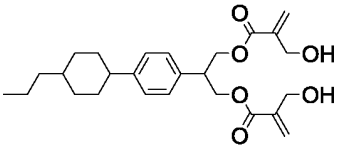
1ε-10-38 

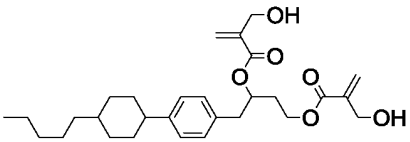
1ε-10-39 

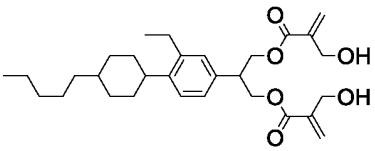
1ε-10-40 

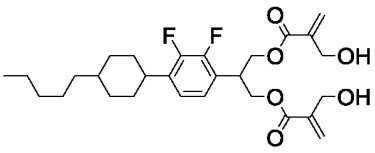
No.

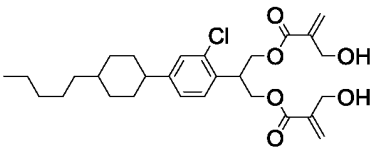
1ε-10-41 

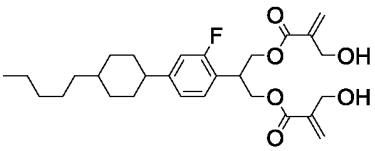
1ε-10-42 

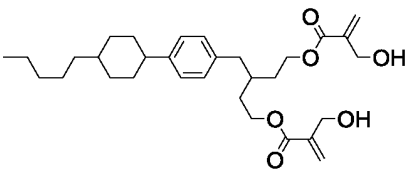
1ε-10-43 

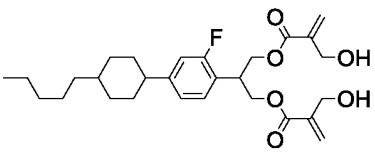
1ε-10-44 

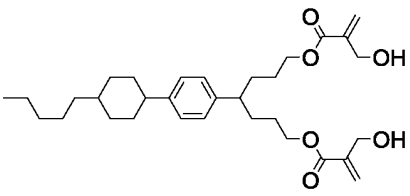
1ε-10-45 

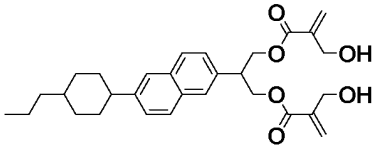
1ε-10-46 

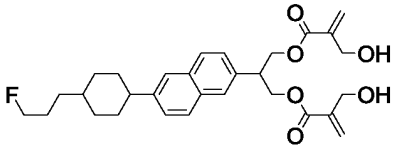
1ε-10-47 

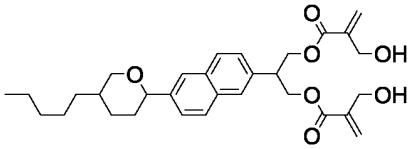
1ε-10-48 

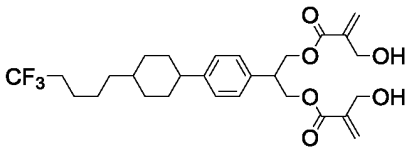
1ε-10-49 

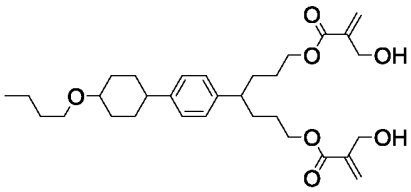
1ε-10-50 

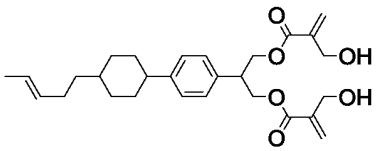
1ε-10-51 

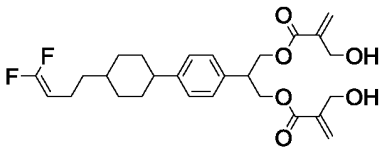
1ε-10-52 

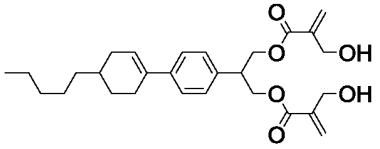
1ε-10-53 

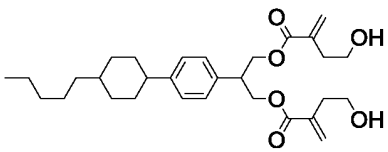
1ε-10-54 

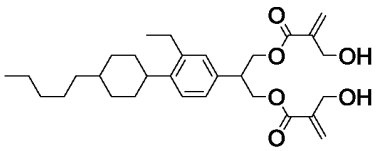
1ε-10-55 

1ε-10-56 

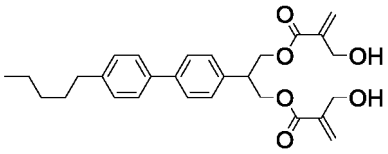
1ε-10-57 

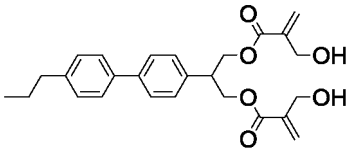
1ε-10-58 

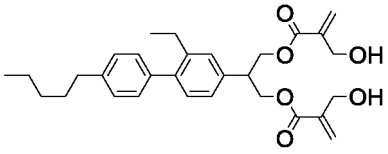
1ε-10-59 

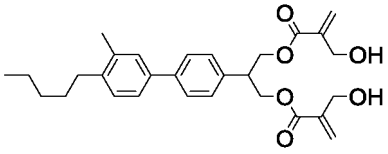
1ε-10-60 

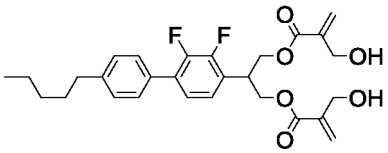
No.

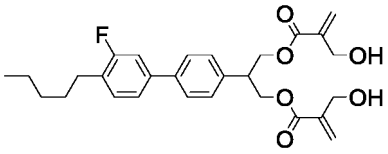
1ε-10-61 

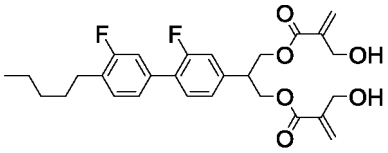
1ε-10-62 

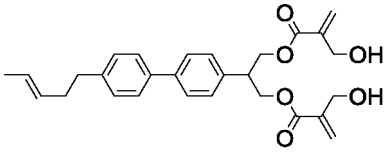
1ε-10-63 

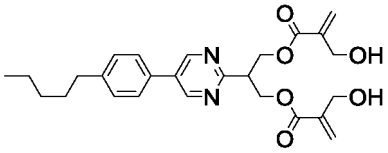
1ε-10-64 

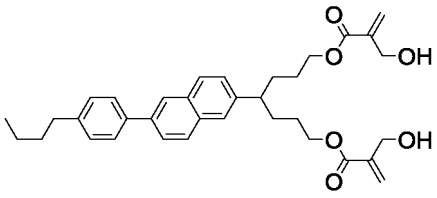
1ε-10-65 

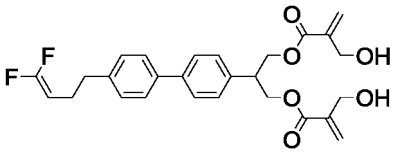
1ε-10-66 

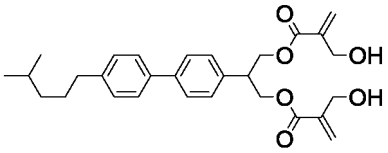
1ε-10-67 

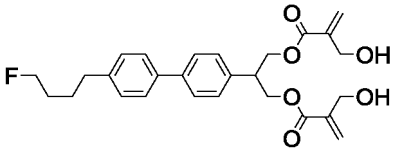
1ε-10-68 

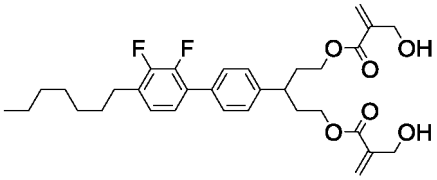
1ε-10-69 

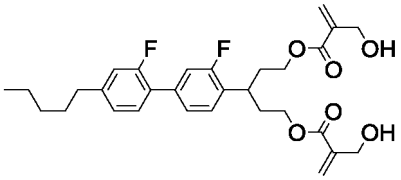
1ε-10-70 

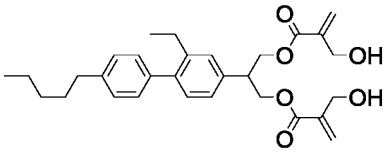
1ε-10-71 

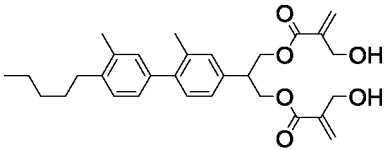
1ε-10-72 

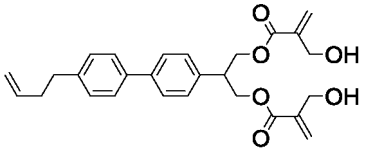
1ε-10-73 

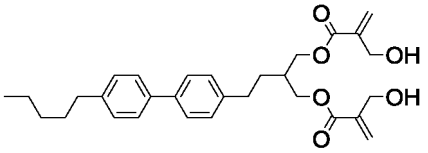
1ε-10-74 

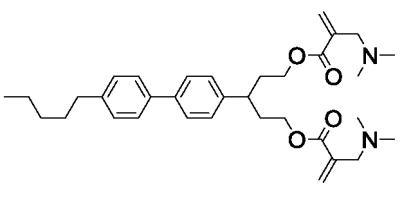
1ε-10-75 

1ε-10-76 

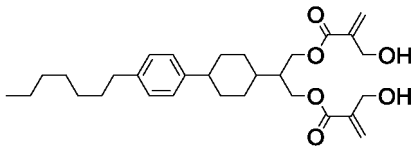
1ε-10-77 

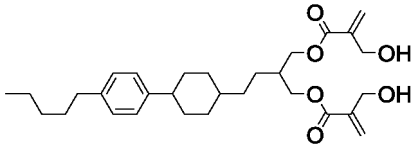
1ε-10-78 

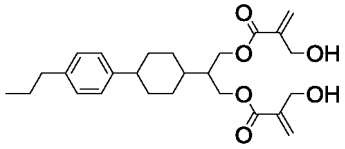
1ε-10-79 

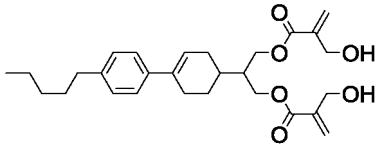
1ε-10-80 

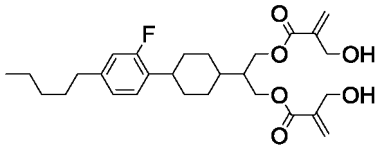
No.

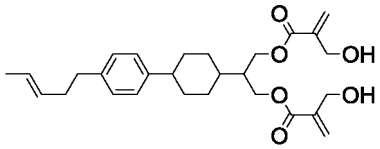
1ε-10-81 

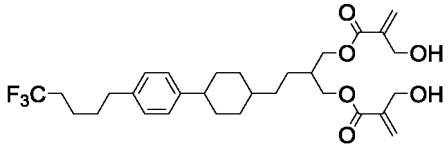
1ε-10-82 

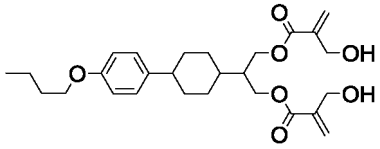
1ε-10-83 

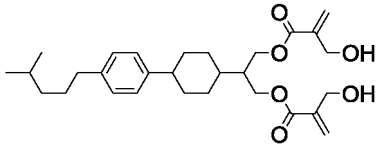
1ε-10-84 

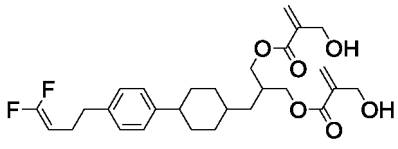
1ε-10-85 

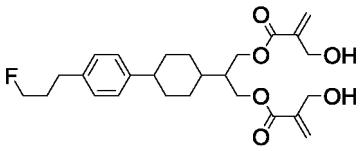
1ε-10-86 

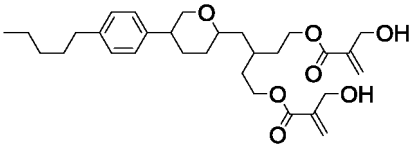
1ε-10-87 

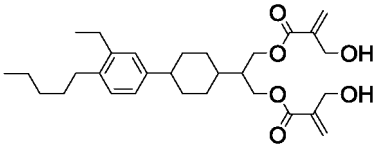
1ε-10-88 

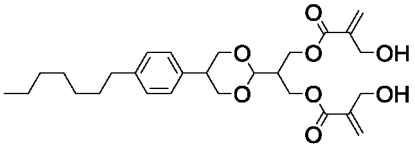
1ε-10-89 

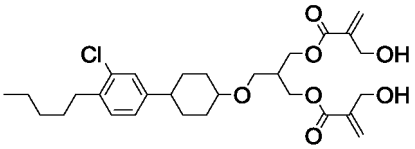
1ε-10-90 

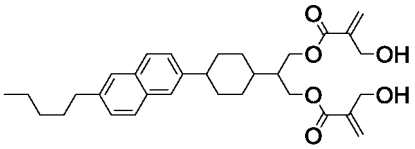
1ε-10-91 

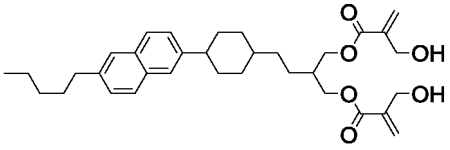
1ε-10-92 

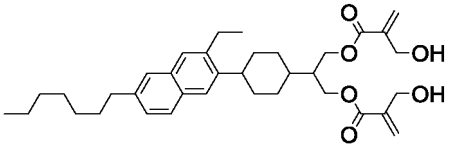
1ε-10-93 

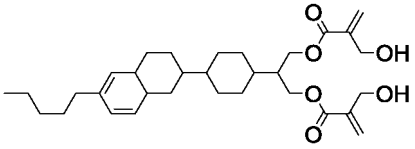
1ε-10-94 

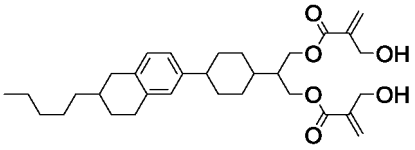
1ε-10-95 

1ε-10-96 

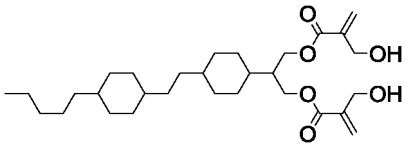
1ε-10-97 

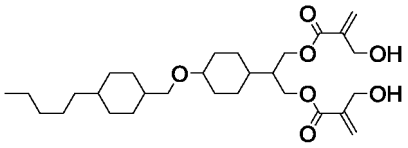
1ε-10-98 

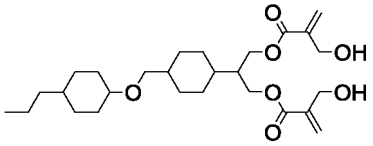
1ε-10-99 

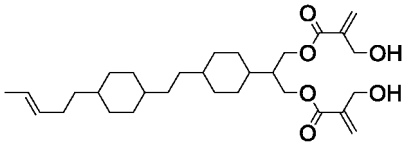
1ε-10-100 

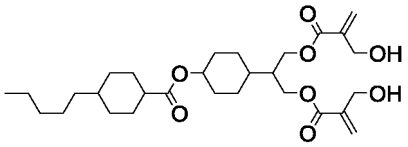
No.

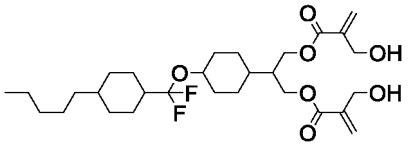
1ε-10-101 

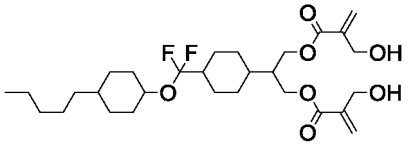
1ε-10-102 

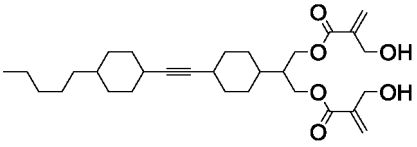
1ε-10-103 

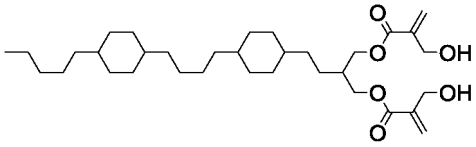
1ε-10-104 

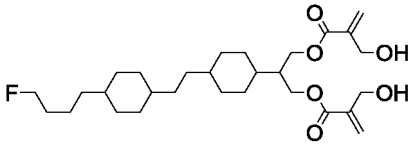
1ε-10-105 

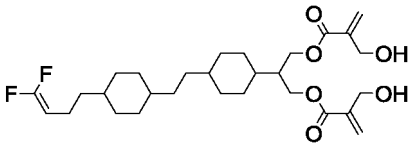
1ε-10-106 

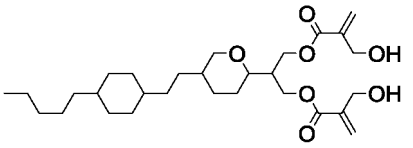
1ε-10-107 

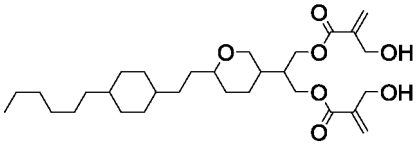
1ε-10-108 

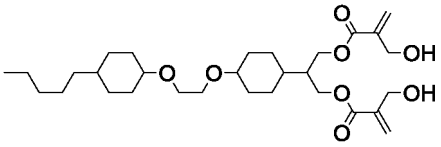
1ε-10-109 

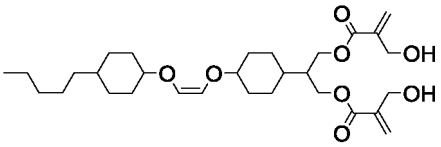
1ε-10-110 

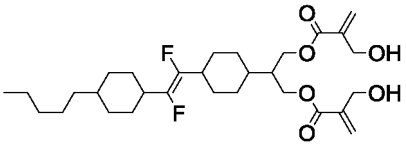
1ε-10-111 

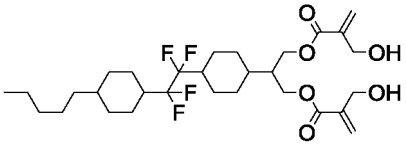
1ε-10-112 

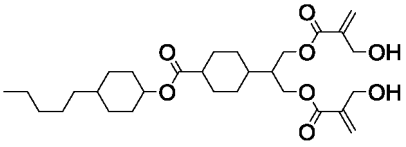
1ε-10-113 

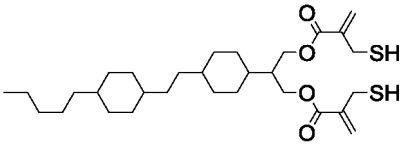
1ε-10-114 

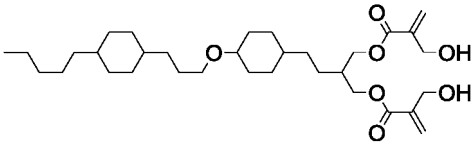
1ε-10-115 

1ε-10-116 

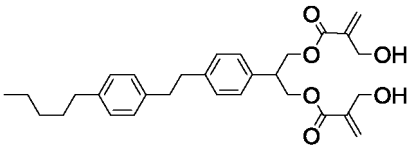
1ε-10-117 

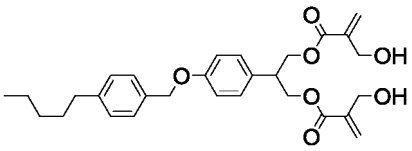
1ε-10-118 

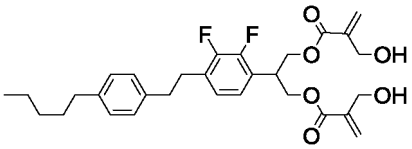
1ε-10-119 

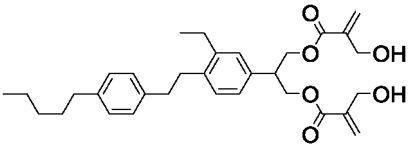
1ε-10-120 

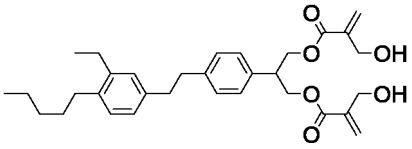
No.

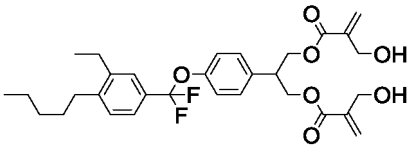
1ε-10-121 

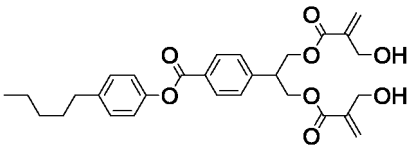
1ε-10-122 

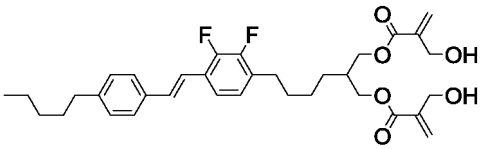
1ε-10-123 

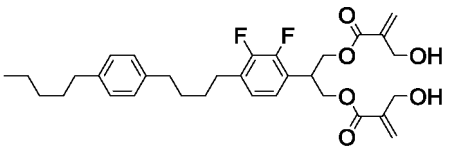
1ε-10-124 

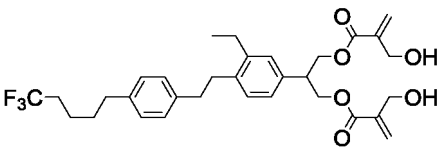
1ε-10-125 

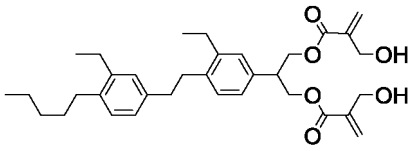
1ε-10-126 

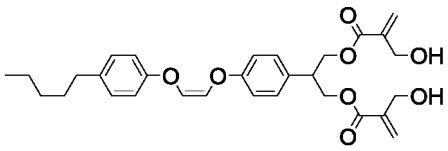
1ε-10-127 

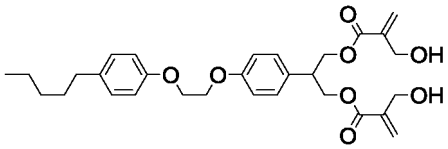
1ε-10-128 

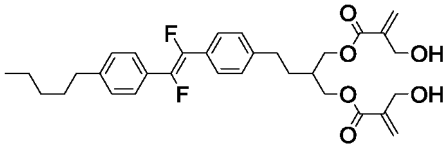
1ε-10-129 

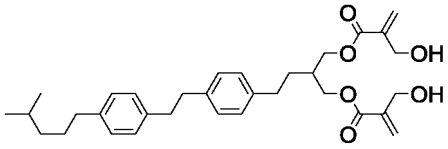
1ε-10-130 

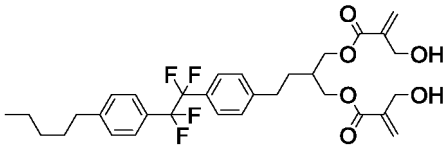
1ε-10-131 

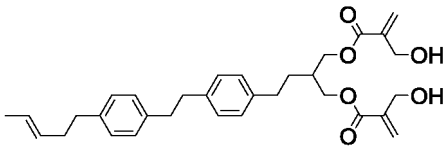
1ε-10-132 

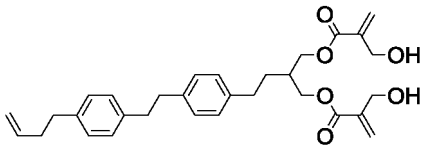
1ε-10-133 

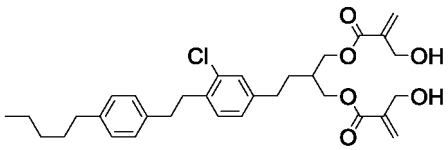
1ε-10-134 

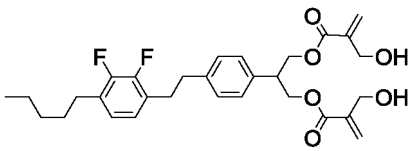
1ε-10-135 

1ε-10-136 

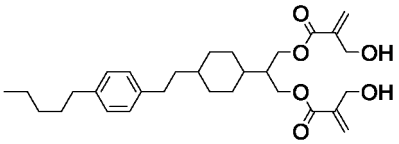
1ε-10-137 

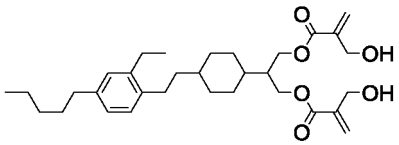
1ε-10-138 

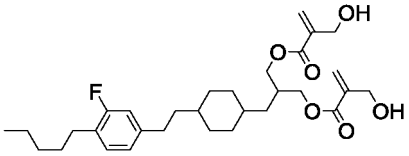
1ε-10-139 

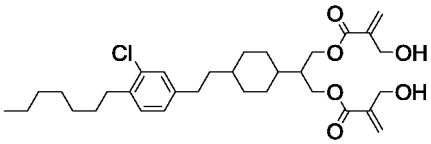
1ε-10-140 

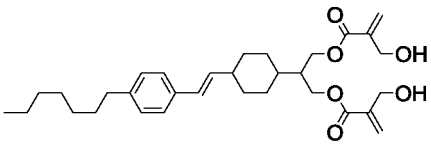
No.

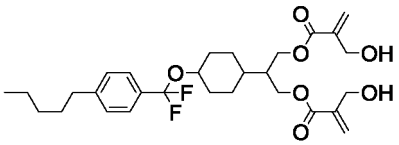
1ε-10-141 

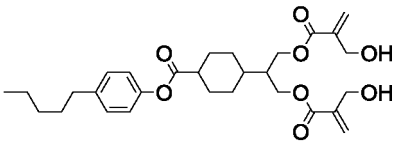
1ε-10-142 

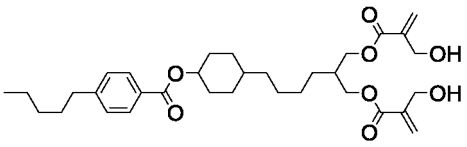
1ε-10-143 

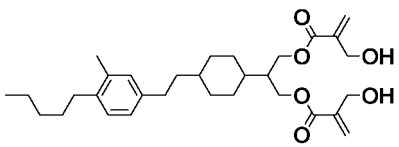
1ε-10-144 

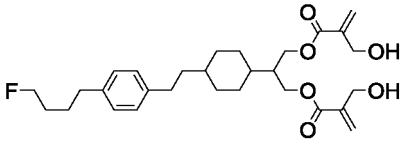
1ε-10-145 

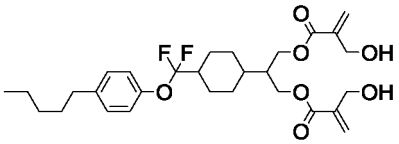
1ε-10-146 

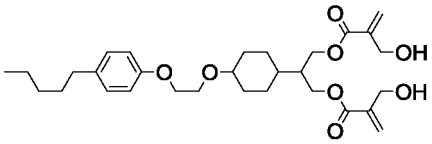
1ε-10-147 

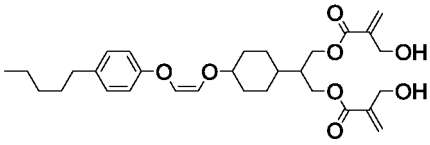
1ε-10-148 

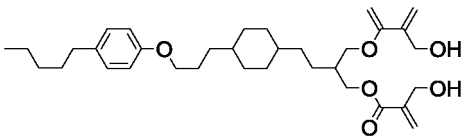
1ε-10-149 

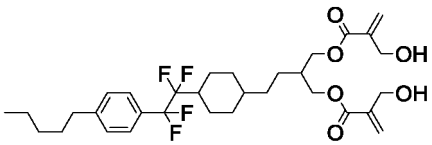
1ε-10-150 

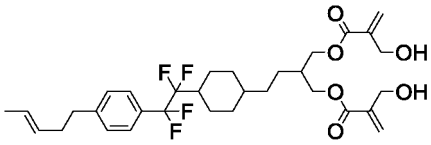
1ε-10-151 

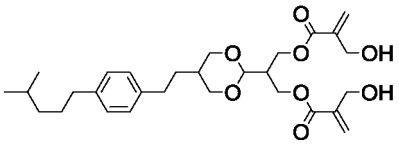
1ε-10-152 

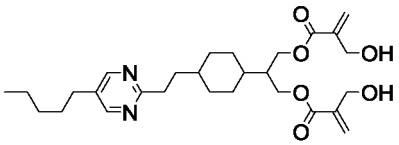
1ε-10-153 

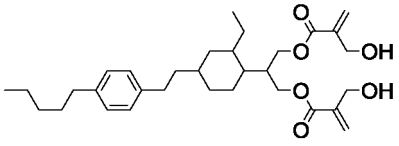
1ε-10-154 

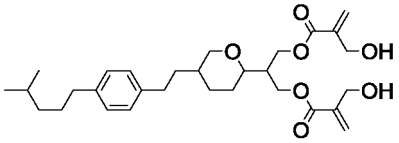
1ε-10-155 

1ε-10-156 

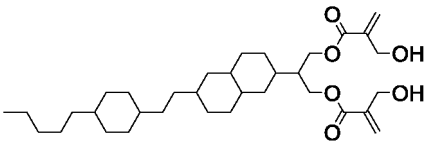
1ε-10-157 

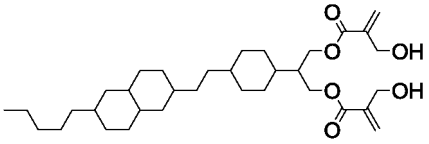
1ε-10-158 

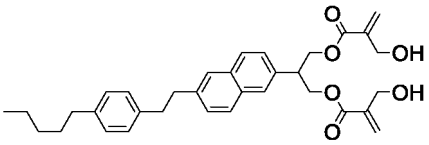
1ε-10-159 

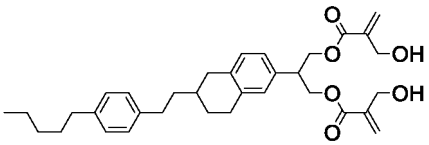
1ε-10-160 

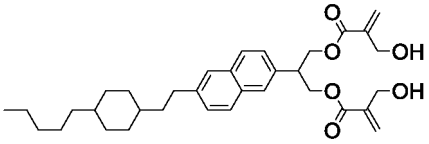
No.

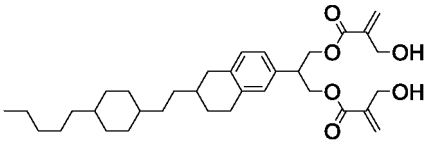
1ε-10-161 

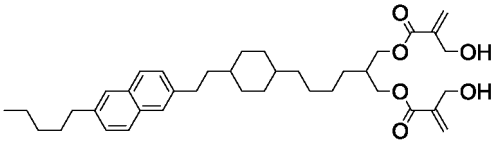
1ε-10-162 

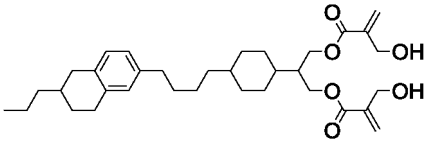
1ε-10-163 

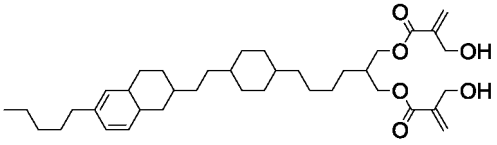
1ε-10-164 

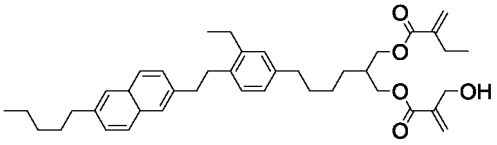
1ε-10-165 

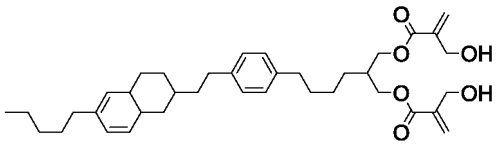
1ε-10-166 

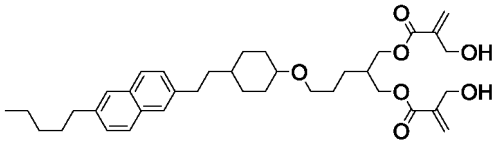
1ε-10-167 

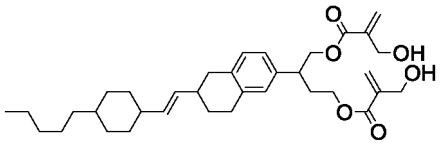
1ε-10-168 

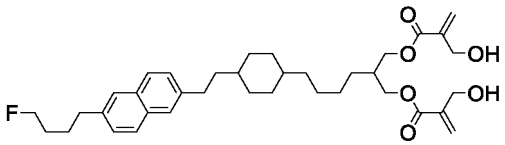
1ε-10-169 

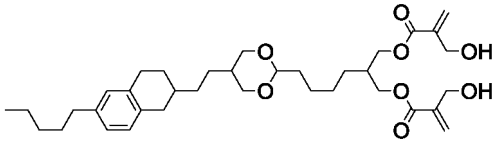
1ε-10-170 

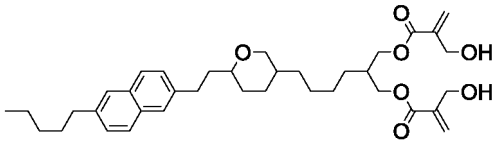
1ε-10-171 

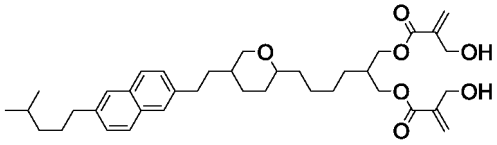
1ε-10-172 

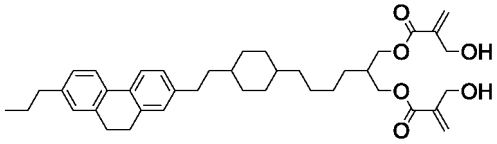
1ε-10-173 

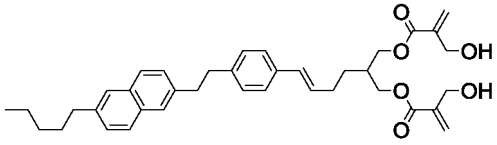
1ε-10-174 

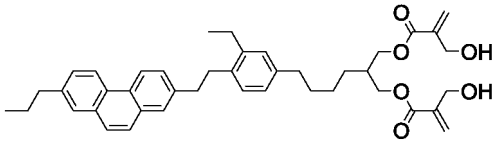
1ε-10-175 

1ε-10-176 

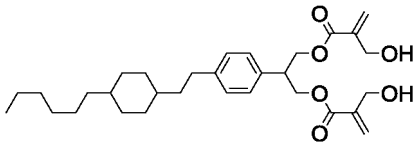
1ε-10-177 

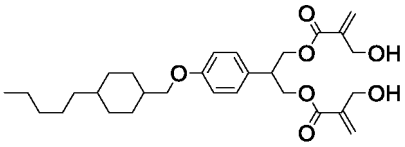
1ε-10-178 

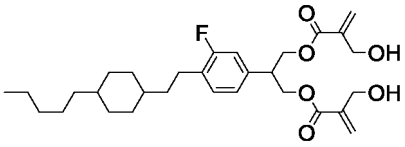
1ε-10-179 

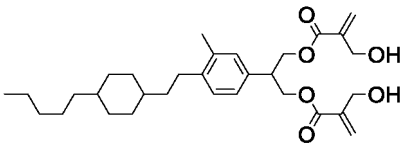
1ε-10-180 

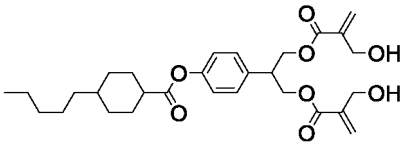
No.

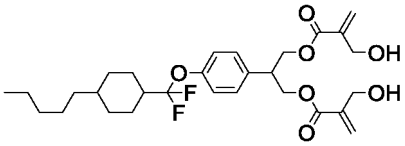
1ε-10-181 

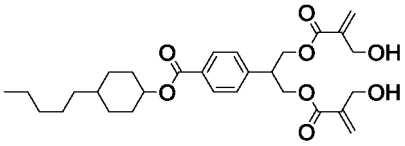
1ε-10-182 

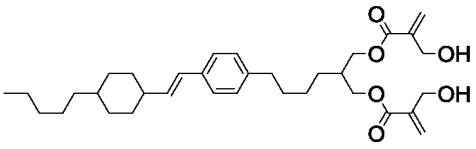
1ε-10-183 

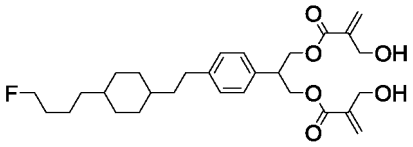
1ε-10-184 

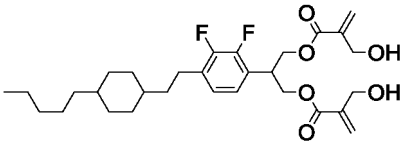
1ε-10-185 

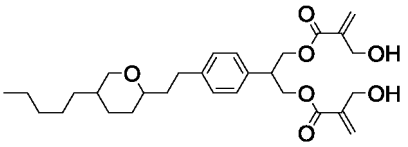
1ε-10-186 

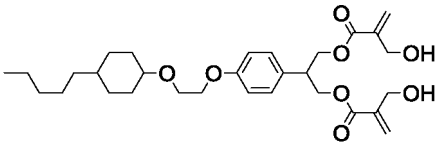
1ε-10-187 

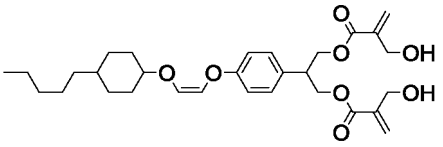
1ε-10-188 

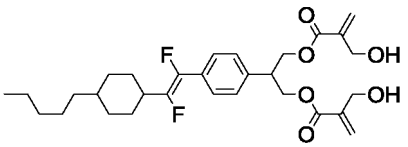
1ε-10-189 

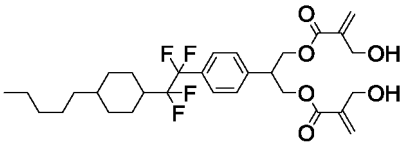
1ε-10-190 

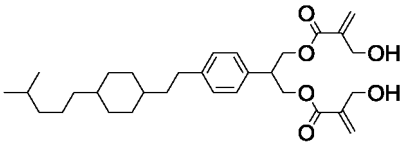
1ε-10-191 

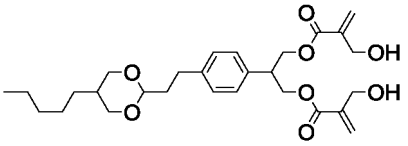
1ε-10-192 

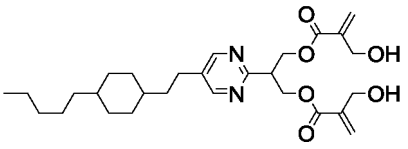
1ε-10-193 

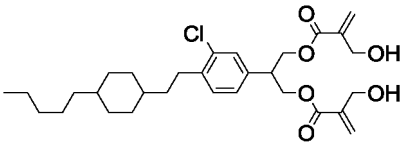
1ε-10-194 

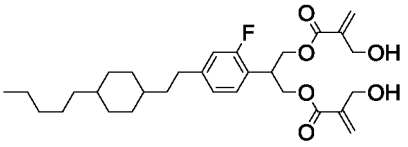
1ε-10-195 

1ε-10-196 

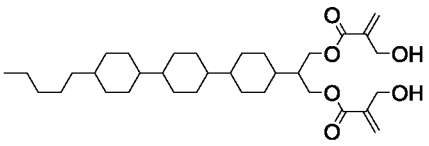
1ε-10-197 

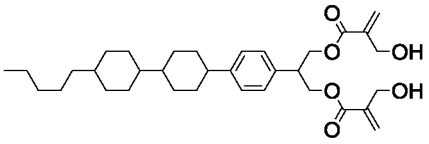
1ε-10-198 

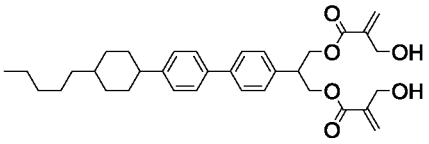
1ε-10-199 

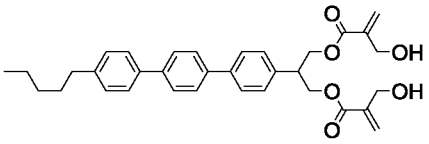
1ε-10-200 

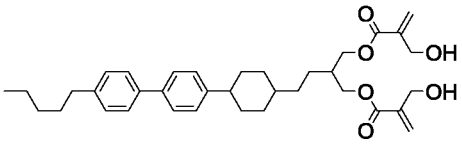
No.

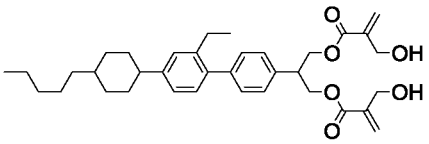
1ε-11-1 

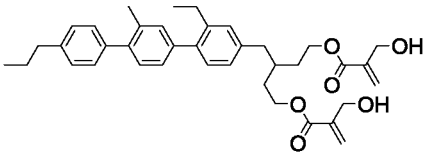
1ε-11-2 

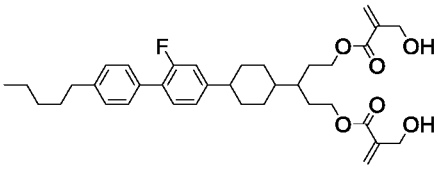
1ε-11-3 

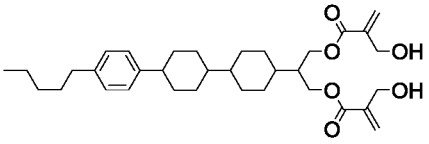
1ε-11-4 

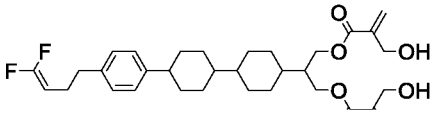
1ε-11-5 

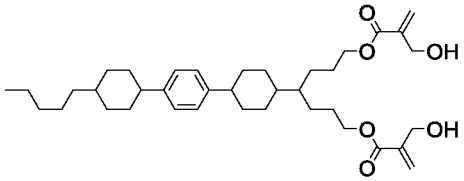
1ε-11-6 

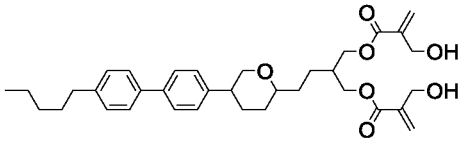
1ε-11-7 

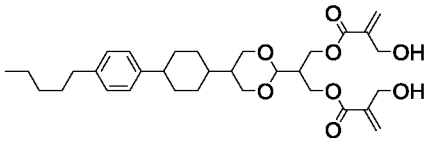
1ε-11-8 

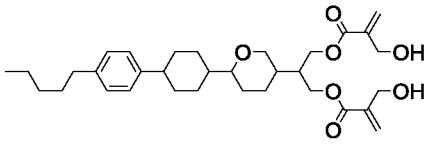
1ε-11-9 

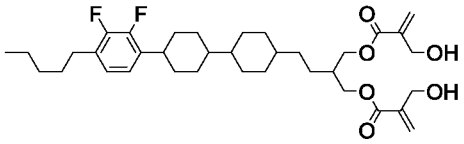
1ε-11-10 

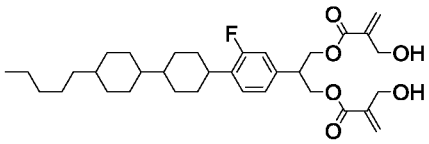
1ε-11-11 

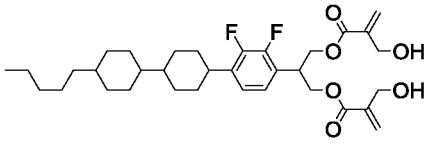
1ε-11-12 

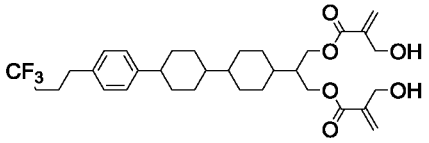
1ε-11-13 

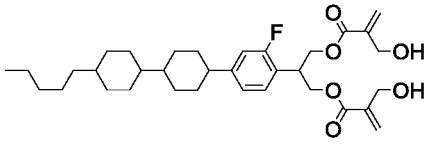
1ε-11-14 

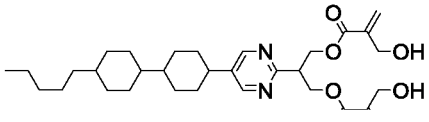
1ε-11-15 

1ε-11-16 

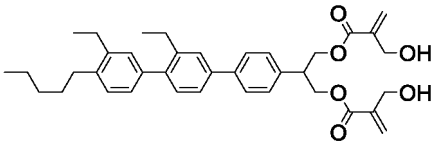
1ε-11-17 

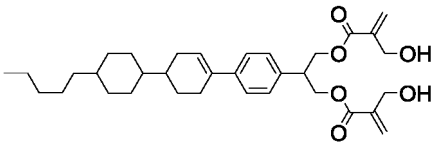
1ε-11-18 

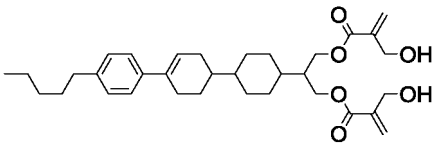
1ε-11-19 

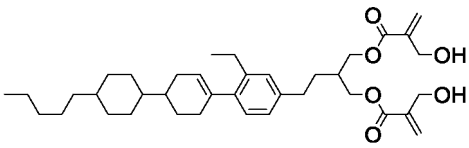
1ε-11-20 

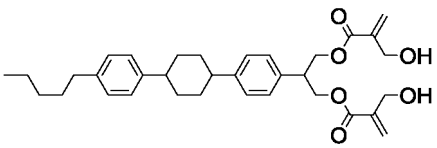
No.

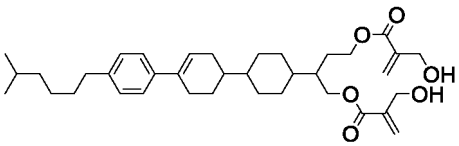
1ε-11-21 

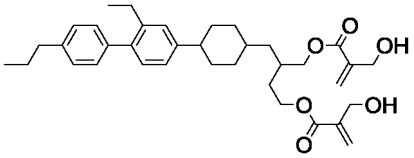
1ε-11-22 

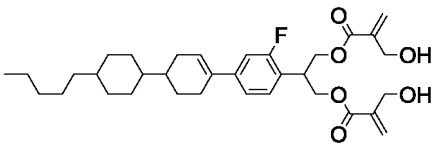
1ε-11-23 

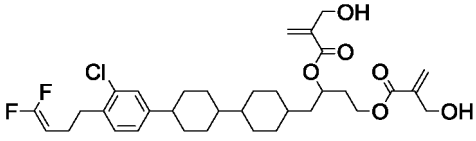
1ε-11-24 

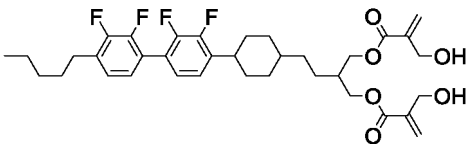
1ε-11-25 

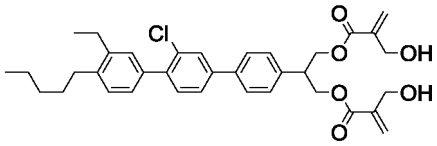
1ε-11-26 

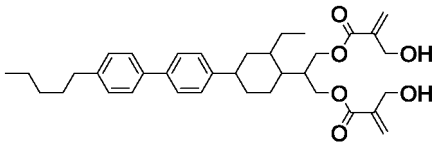
1ε-11-27 

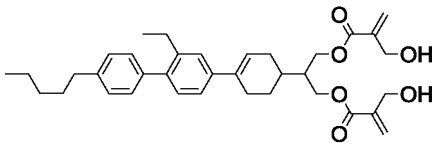
1ε-11-28 

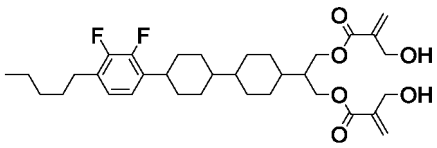
1ε-11-29 

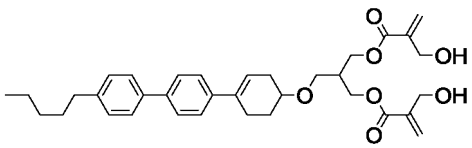
1ε-11-30 

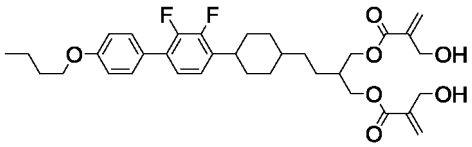
1ε-11-31 

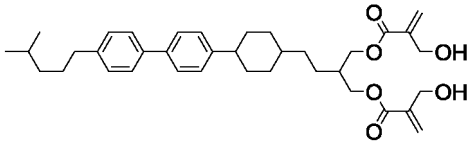
1ε-11-32 

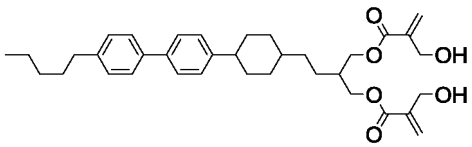
1ε-11-33 

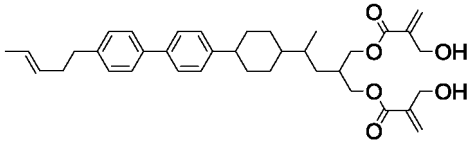
1ε-11-34 

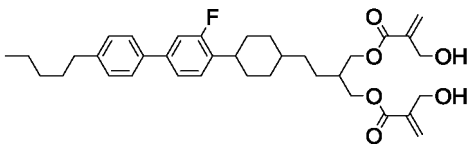
1ε-11-35 

1ε-11-36 

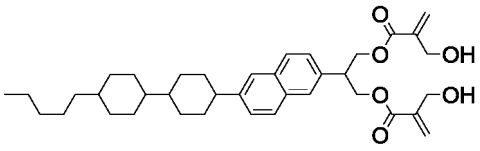
1ε-11-37 

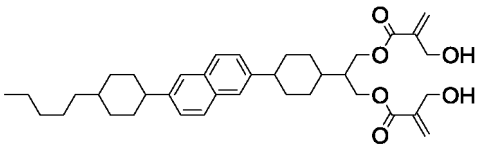
1ε-11-38 

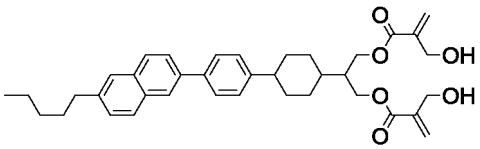
1ε-11-39 

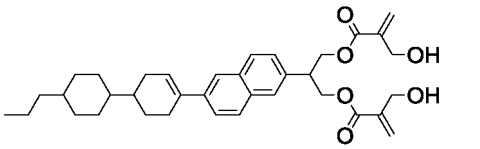
1ε-11-40 

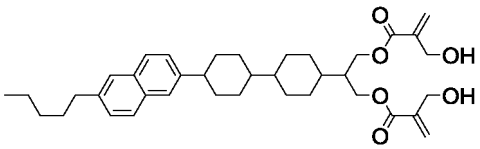
No.

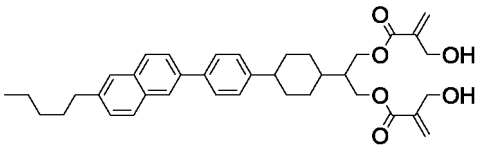
1ε-11-41 

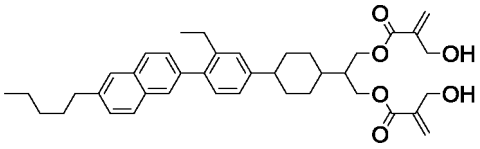
1ε-11-42 

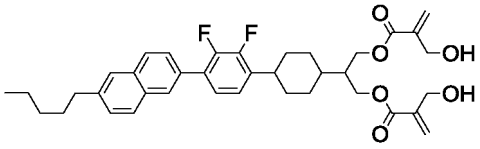
1ε-11-43 

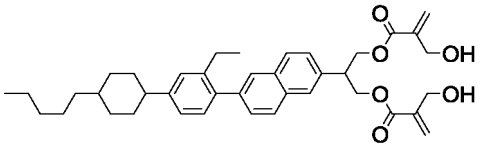
1ε-11-44 

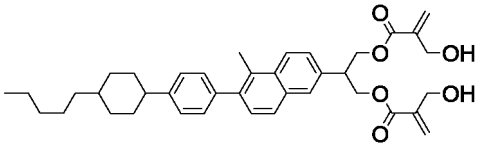
1ε-11-45 

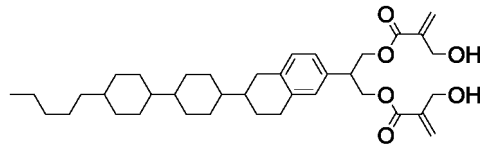
1ε-11-46 

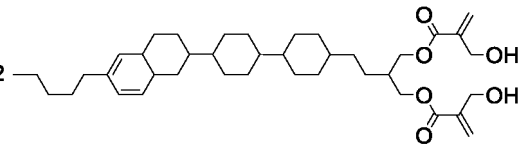
1ε-11-47 

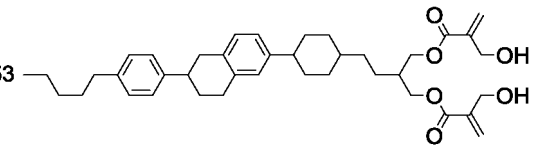
1ε-11-48 

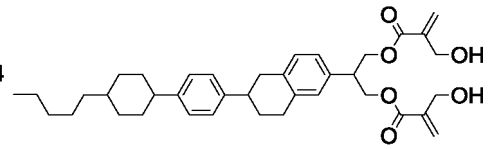
1ε-11-49 

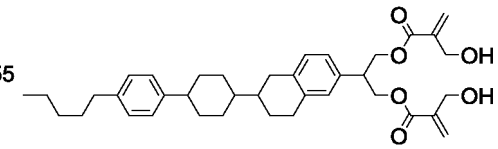
1ε-11-50 

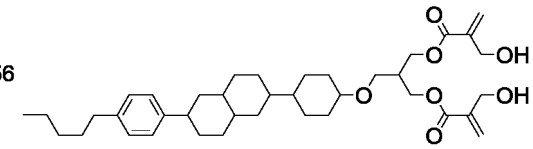
1ε-11-51 

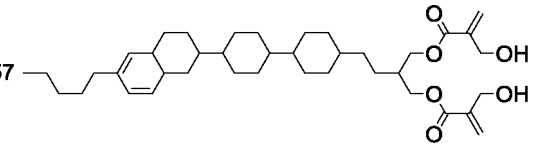
1ε-11-52 

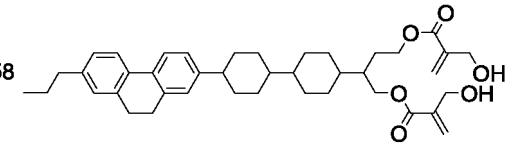
1ε-11-53 

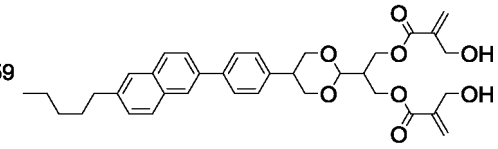
1ε-11-54 

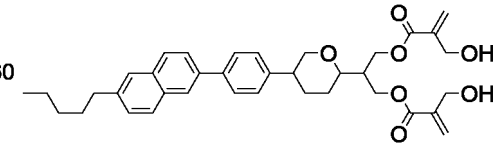
1ε-11-55 

1ε-11-56 

1ε-11-57 

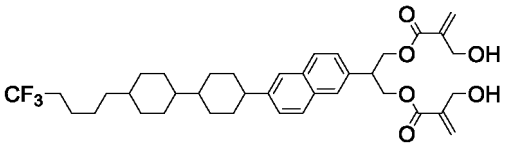
1ε-11-58 

1ε-11-59 

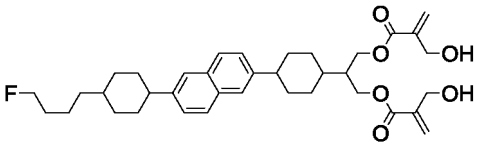
1ε-11-60 

No.

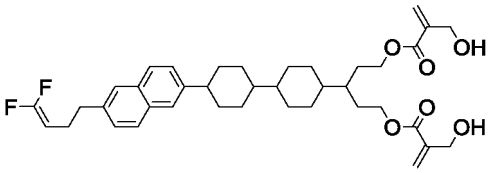
1ε-11-61



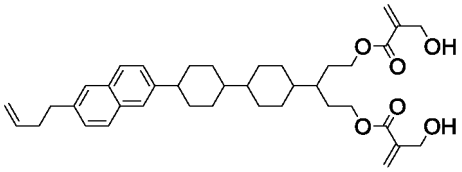
1ε-11-62



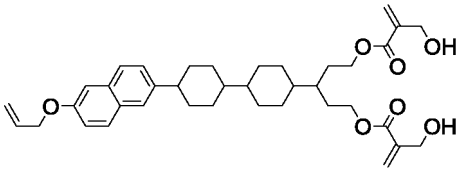
1ε-11-63



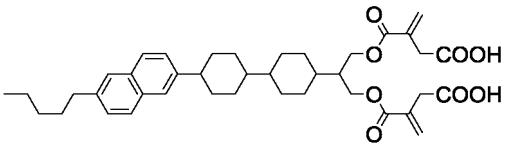
1ε-11-64



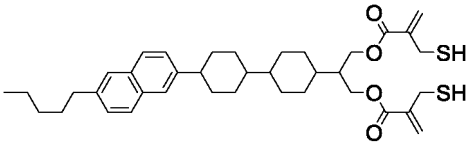
1ε-11-65



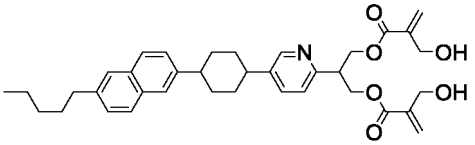
1ε-11-66



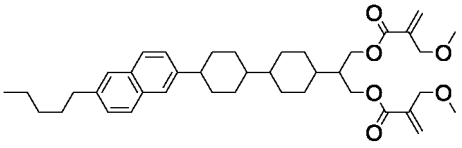
1ε-11-67



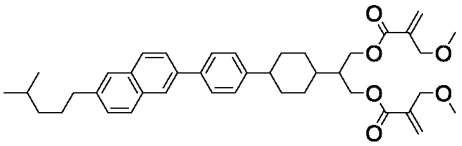
1ε-11-68



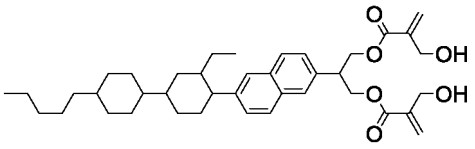
1ε-11-69



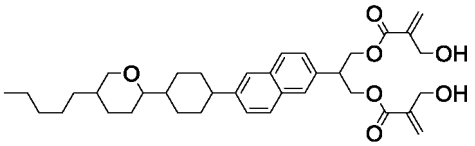
1ε-11-70



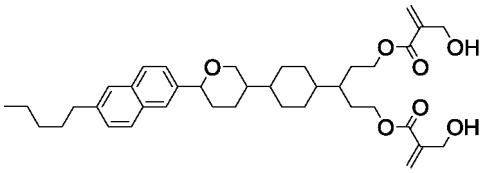
1ε-11-71



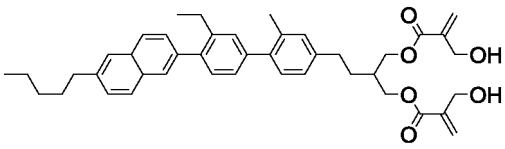
1ε-11-72



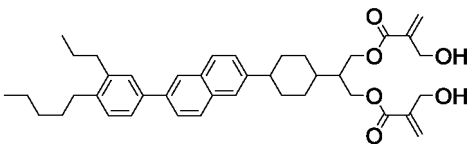
1ε-11-73



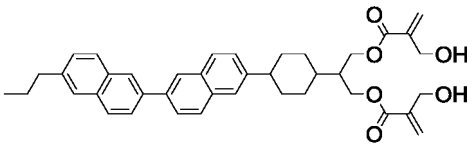
1ε-11-74



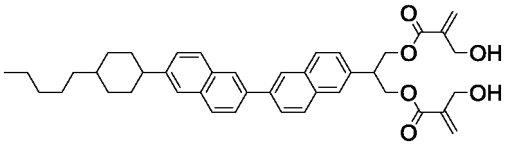
1ε-11-75



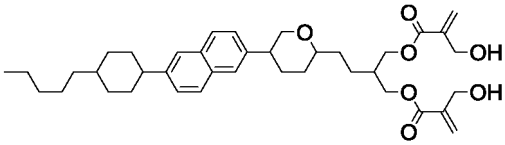
1ε-11-76



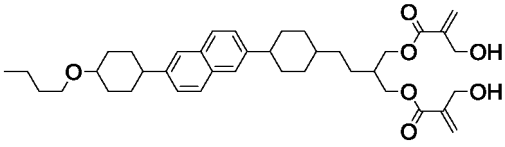
1ε-11-77



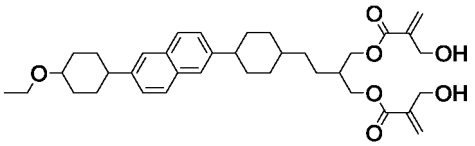
1ε-11-78



1ε-11-79

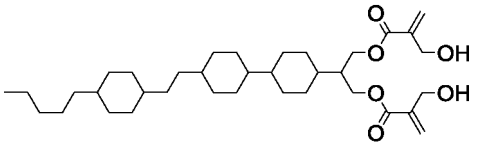


1ε-11-80

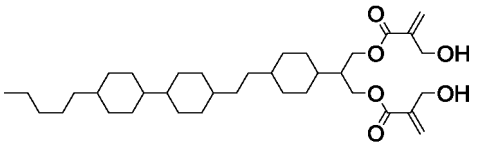


No.

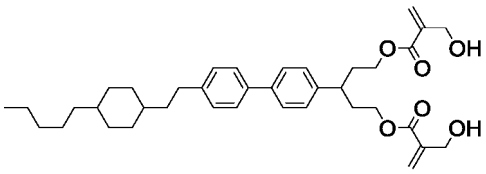
1ε-11-81



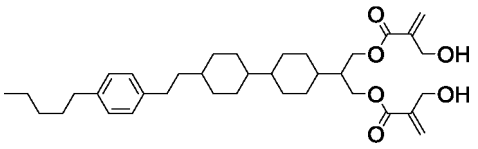
1ε-11-82



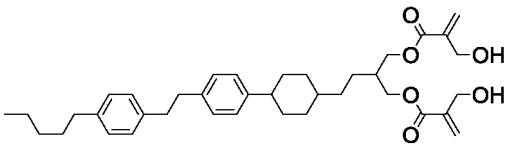
1ε-11-83



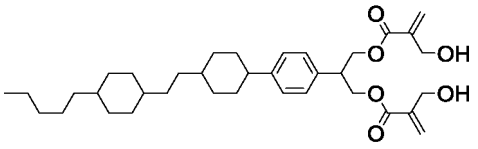
1ε-11-84



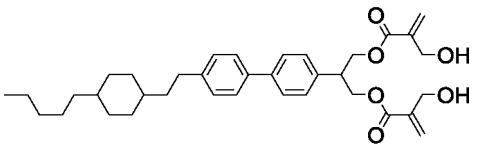
1ε-11-85



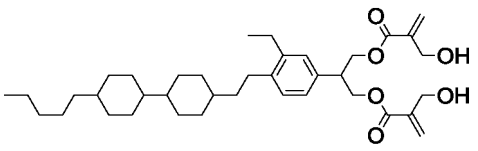
1ε-11-86



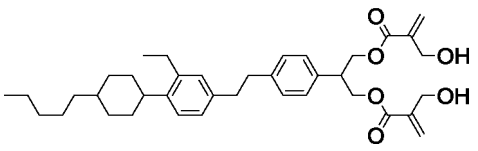
1ε-11-87



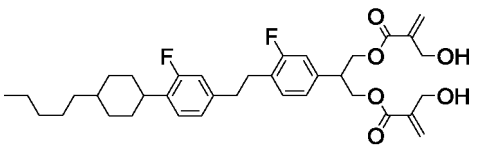
1ε-11-88



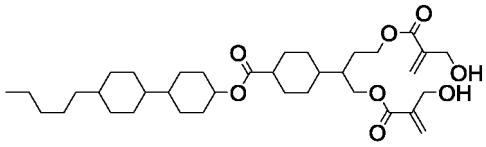
1ε-11-89



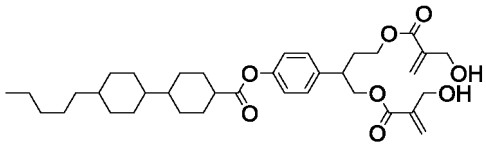
1ε-11-90



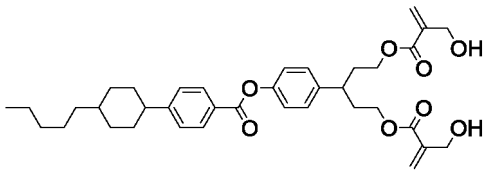
1ε-11-91



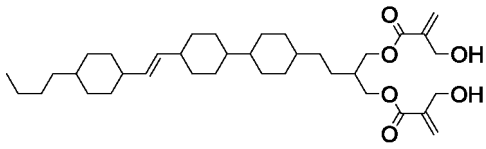
1ε-11-92



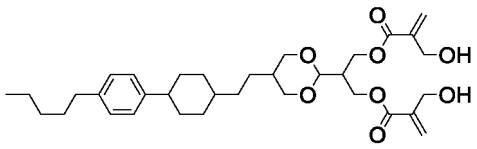
1ε-11-93



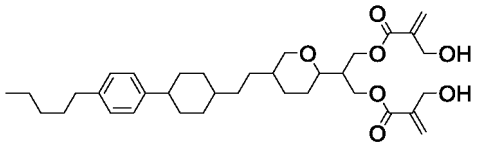
1ε-11-94



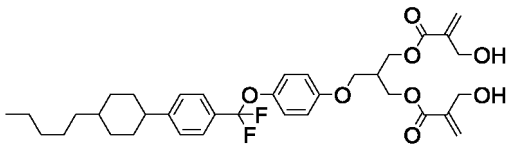
1ε-11-95



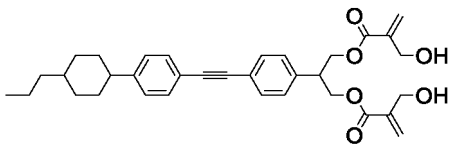
1ε-11-96



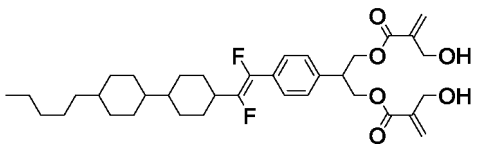
1ε-11-97



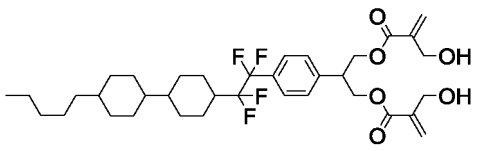
1ε-11-98



1ε-11-99

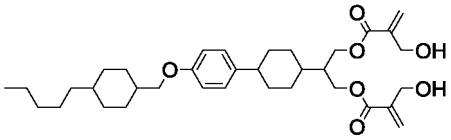


1ε-11-100

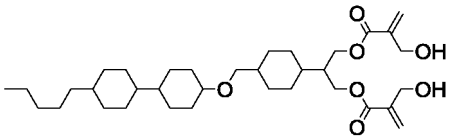


No.

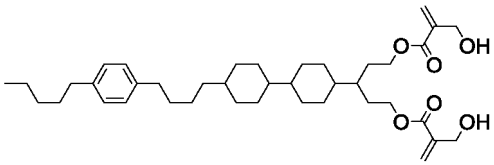
1ε-11-101



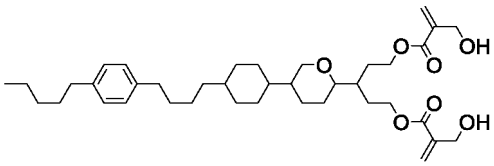
1ε-11-102



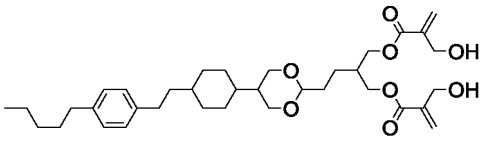
1ε-11-103



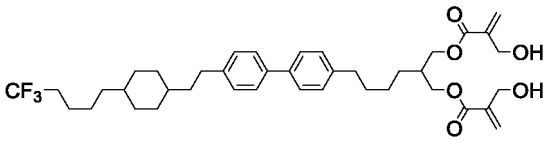
1ε-11-104



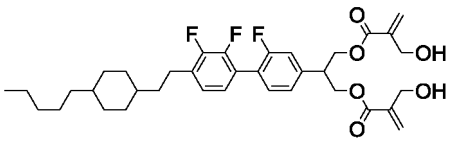
1ε-11-105



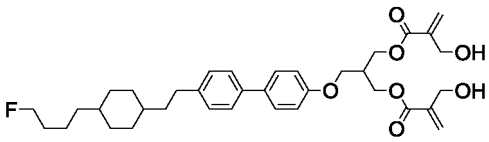
1ε-11-106



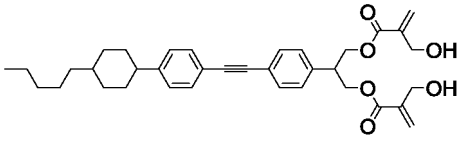
1ε-11-107



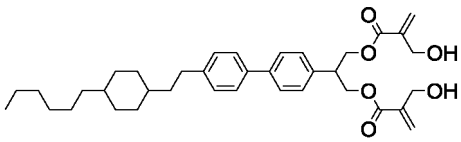
1ε-11-108



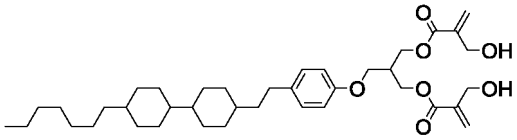
1ε-11-109



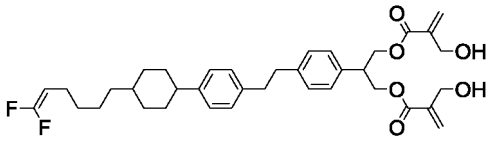
1ε-11-110



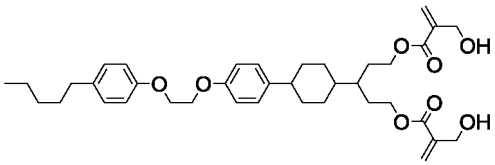
1ε-11-111



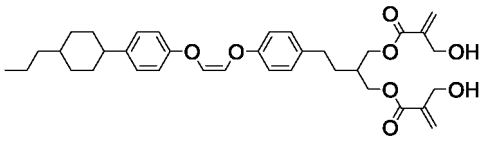
1ε-11-112



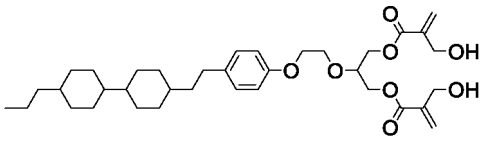
1ε-11-113



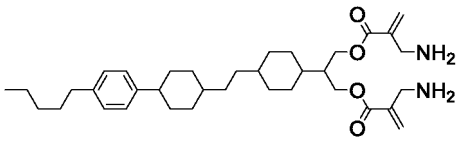
1ε-11-114



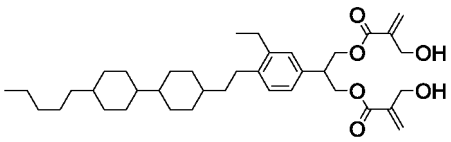
1ε-11-115



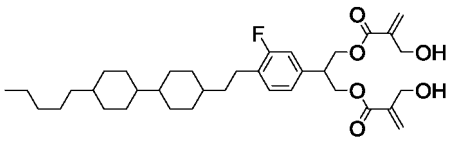
1ε-11-116



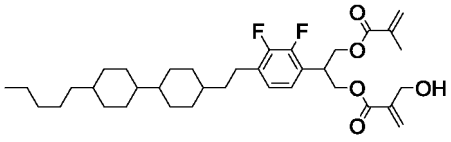
1ε-11-117



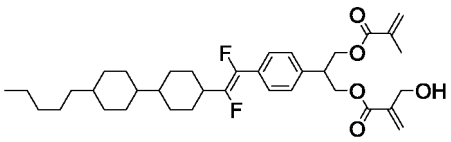
1ε-11-118



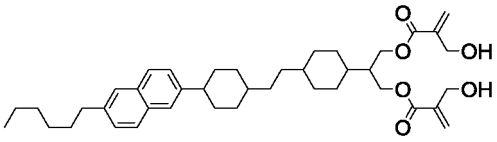
1ε-11-119

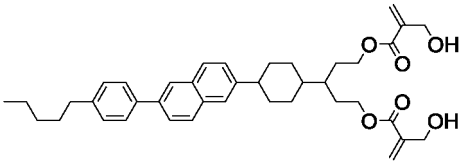


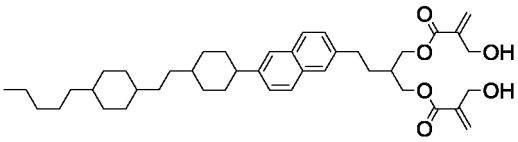
1ε-11-120

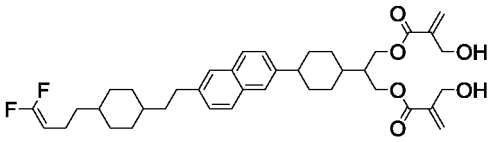


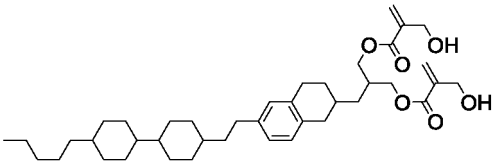
No.

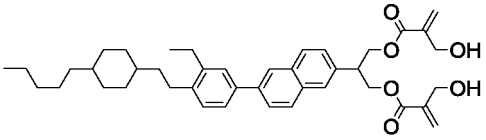
1ε-11-121 

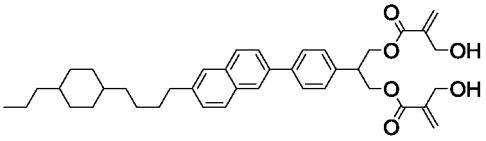
1ε-11-122 

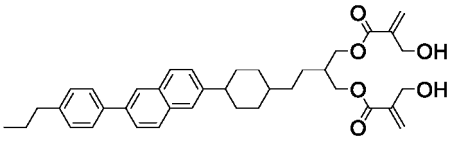
1ε-11-123 

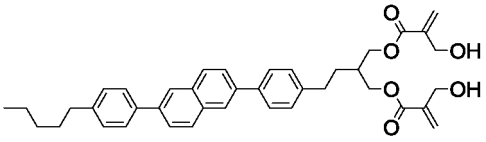
1ε-11-124 

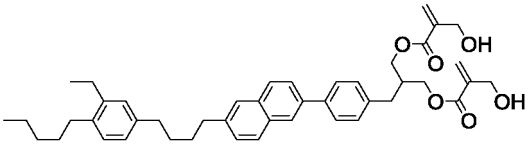
1ε-11-125 

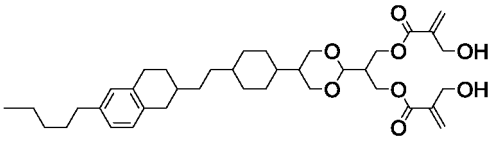
1ε-11-126 

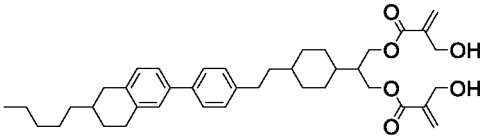
1ε-11-127 

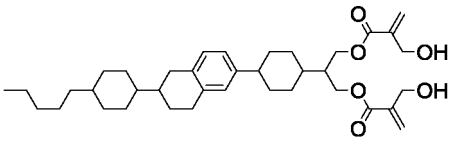
1ε-11-128 

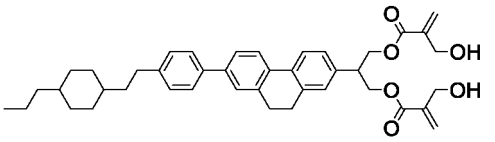
1ε-11-129 

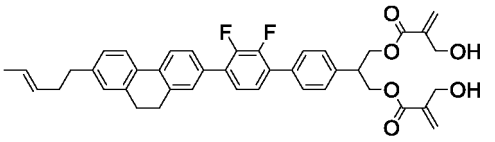
1ε-11-130 

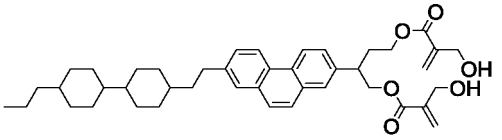
1ε-11-131 

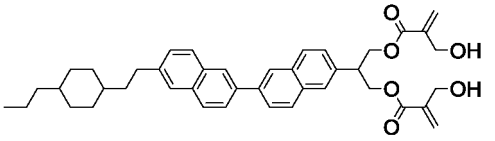
1ε-11-132 

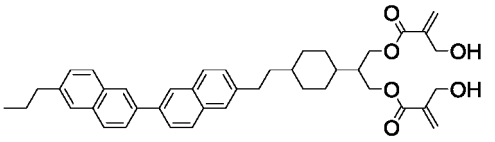
1ε-11-133 

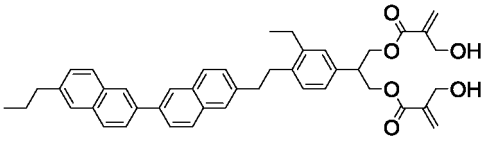
1ε-11-134 

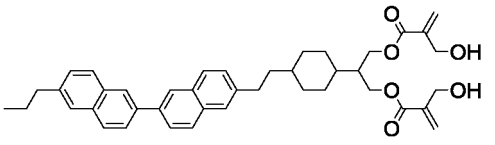
1ε-11-135 

1ε-11-136 

1ε-11-137 

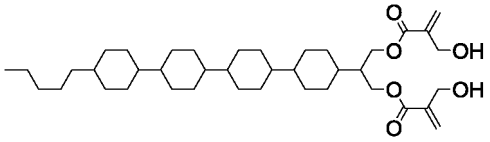
1ε-11-138 

1ε-11-139 

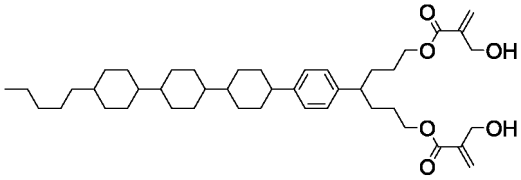
1ε-11-140 

No.

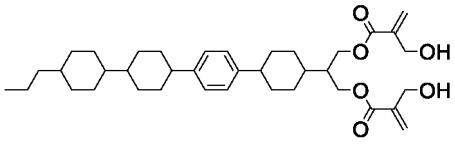
1ε-12-1



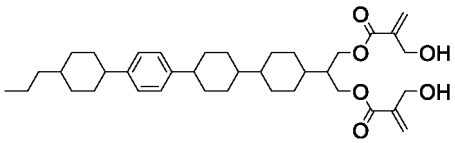
1ε-12-2



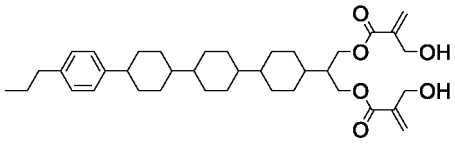
1ε-12-3



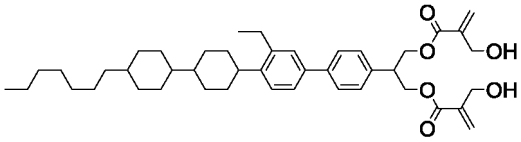
1ε-12-4



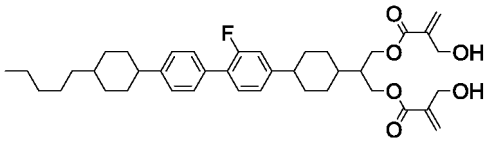
1ε-12-5



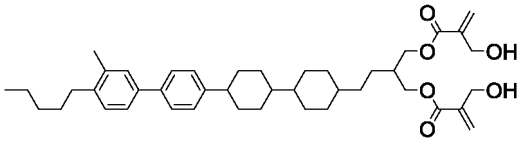
1ε-12-6



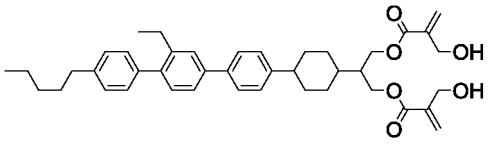
1ε-12-7



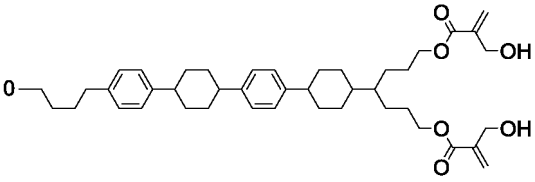
1ε-12-8



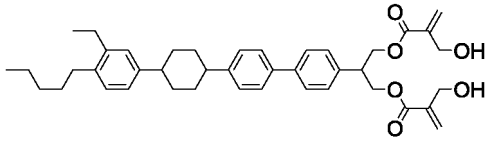
1ε-12-9



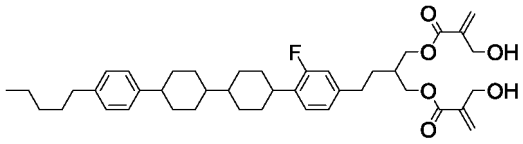
1ε-12-10



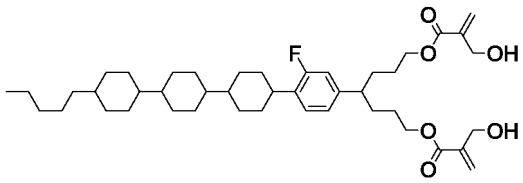
1ε-12-11



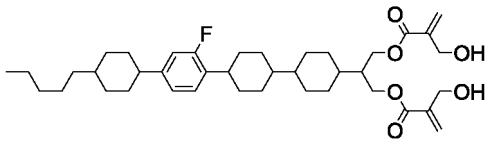
1ε-12-12



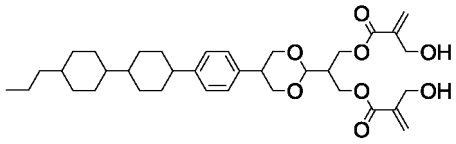
1ε-12-13



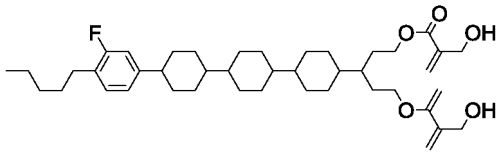
1ε-12-14



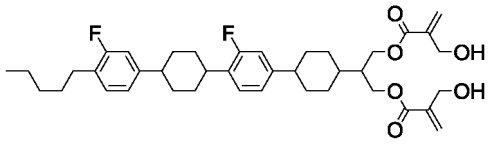
1ε-12-15



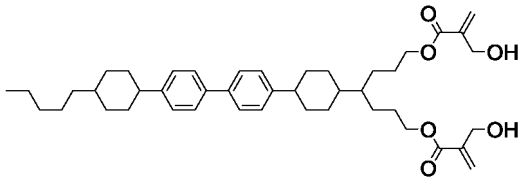
1ε-12-16



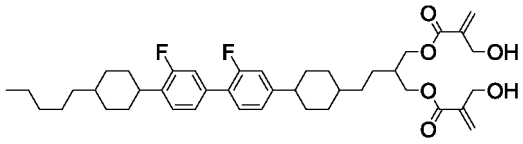
1ε-12-17



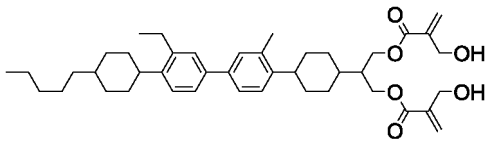
1ε-12-18



1ε-12-19

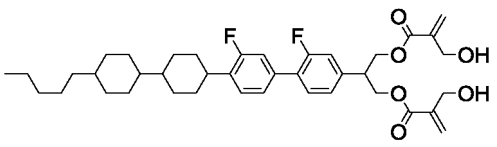


1ε-12-20

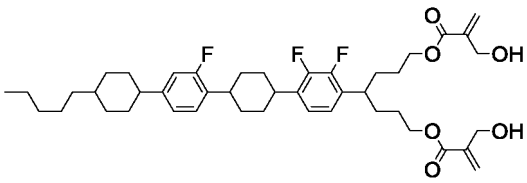


No.

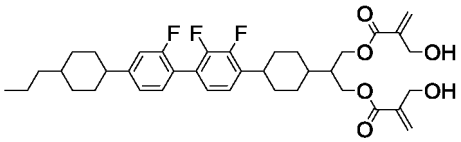
1ε-12-21



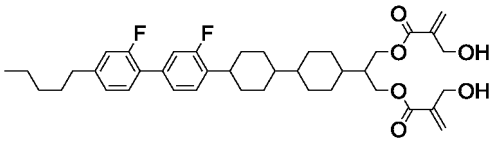
1ε-12-22



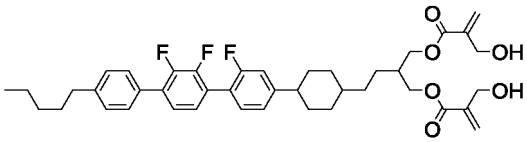
1ε-12-23



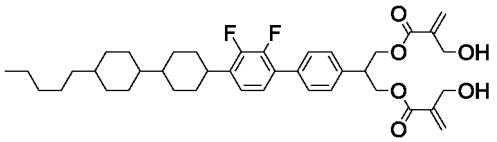
1ε-12-24



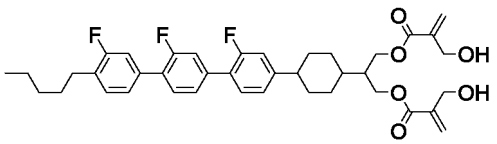
1ε-12-25



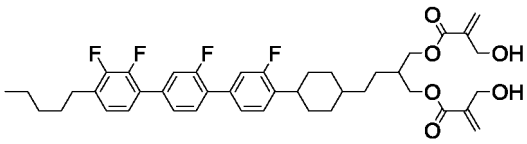
1ε-12-26



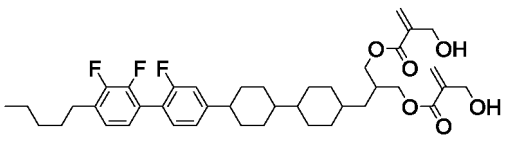
1ε-12-27



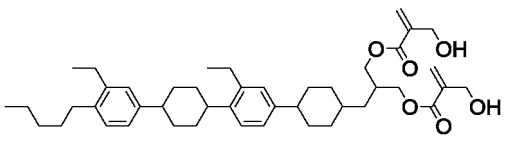
1ε-12-28



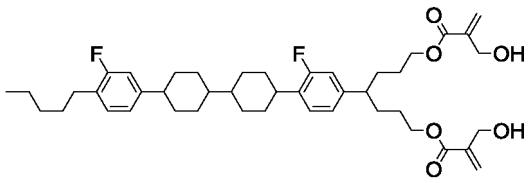
1ε-12-29



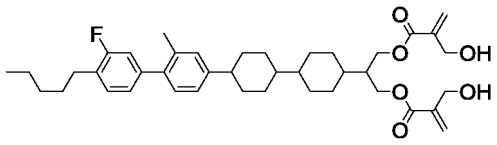
1ε-12-30



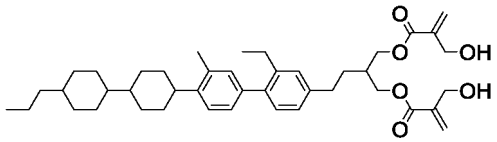
1ε-12-31



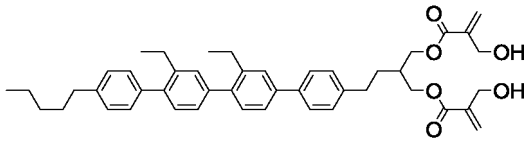
1ε-12-32



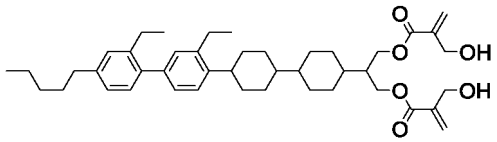
1ε-12-33



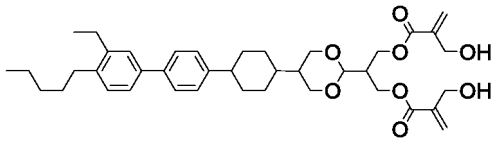
1ε-12-34



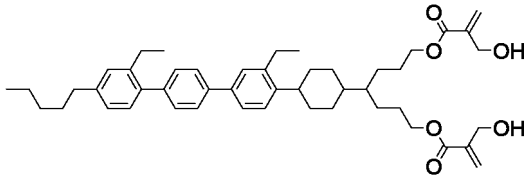
1ε-12-35



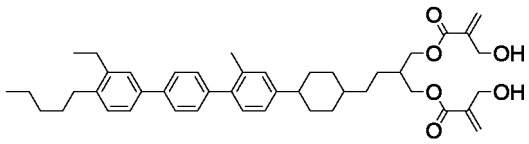
1ε-12-36



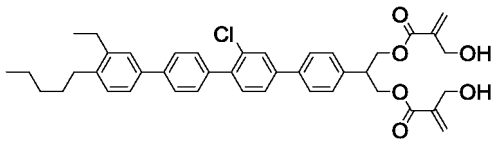
1ε-12-37



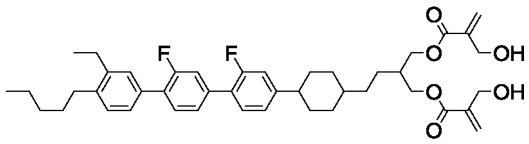
1ε-12-38



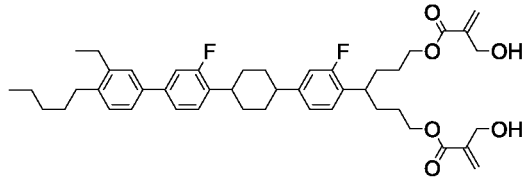
1ε-12-39

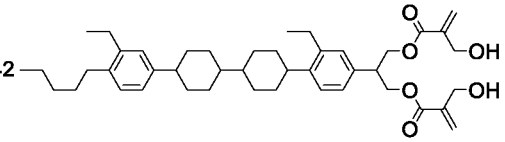


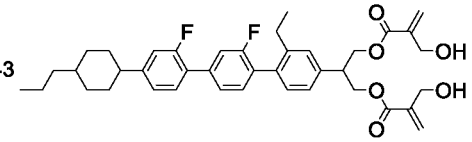
1ε-12-40

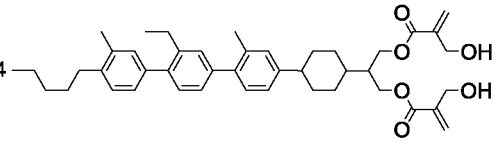


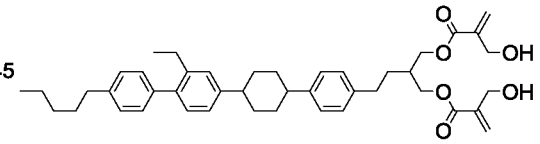
No.

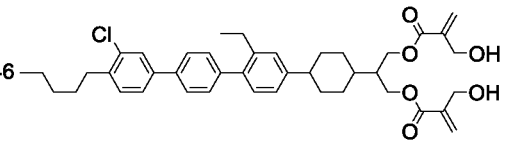
1ε-12-41 

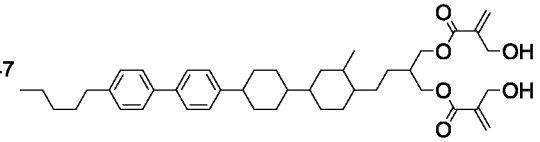
1ε-12-42 

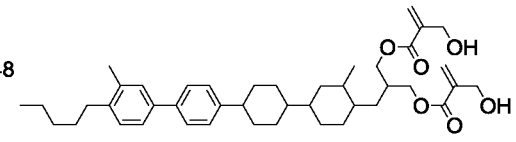
1ε-12-43 

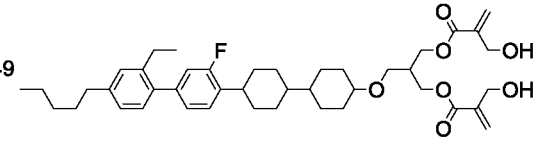
1ε-12-44 

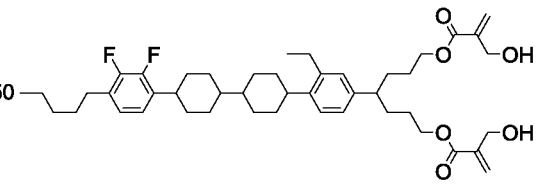
1ε-12-45 

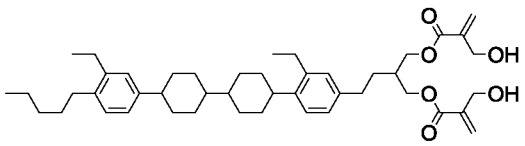
1ε-12-46 

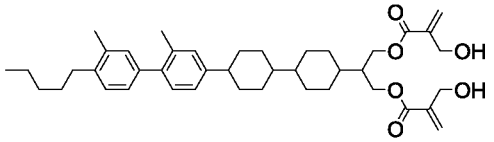
1ε-12-47 

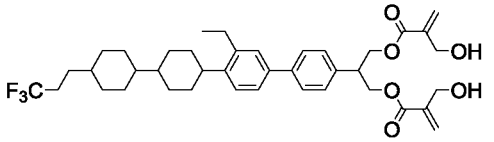
1ε-12-48 

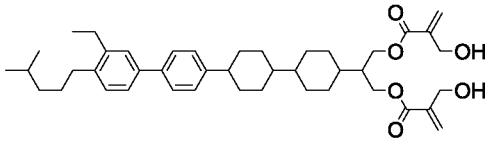
1ε-12-49 

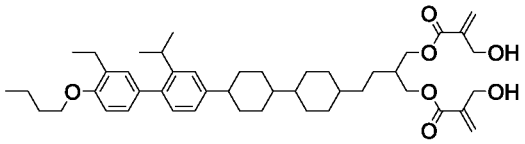
1ε-12-50 

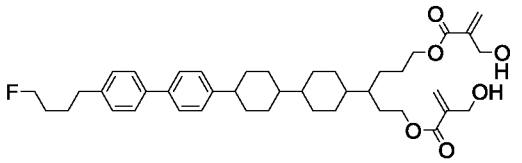
1ε-12-51 

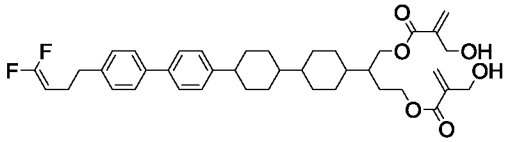
1ε-12-52 

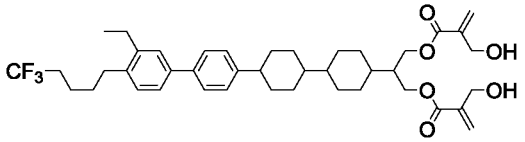
1ε-12-53 

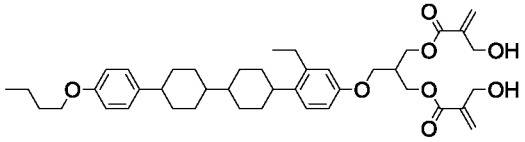
1ε-12-54 

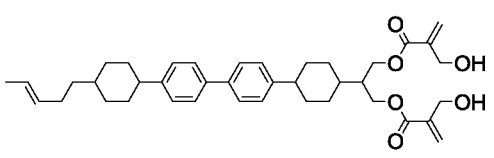
1ε-12-55 

1ε-12-56 

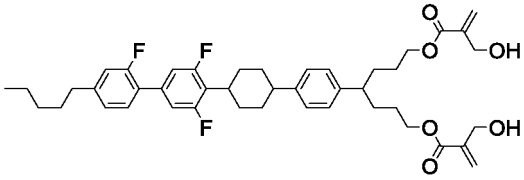
1ε-12-57 

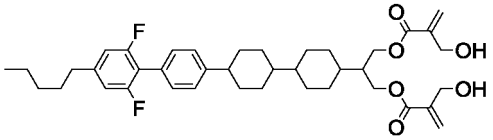
1ε-12-58 

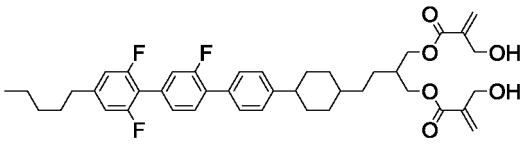
1ε-12-59 

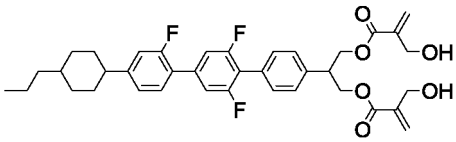
1ε-12-60 

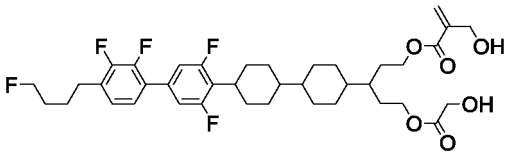
No.

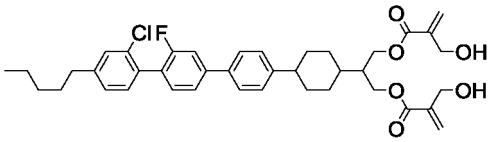
1ε-12-61 

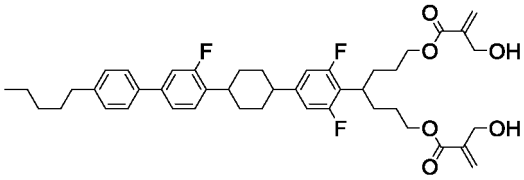
1ε-12-62 

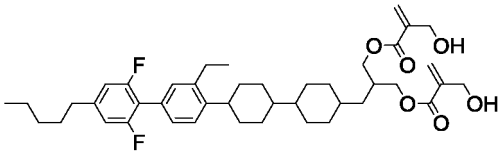
1ε-12-63 

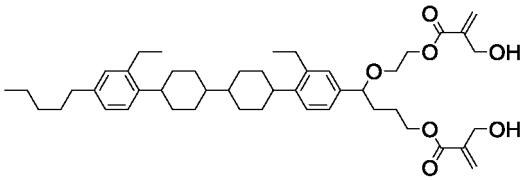
1ε-12-64 

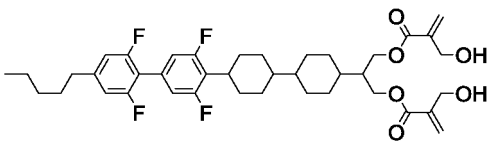
1ε-12-65 

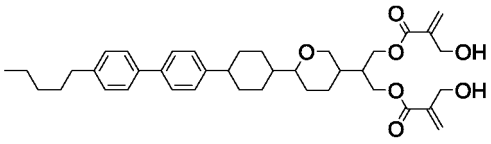
1ε-12-66 

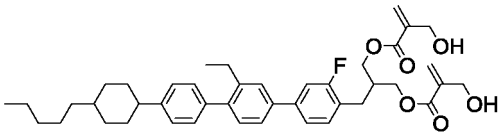
1ε-12-67 

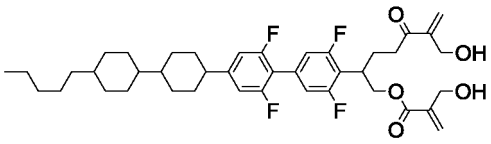
1ε-12-68 

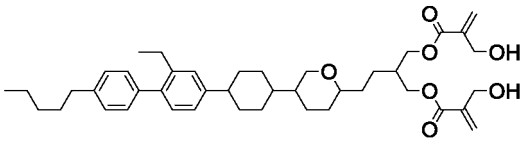
1ε-12-69 

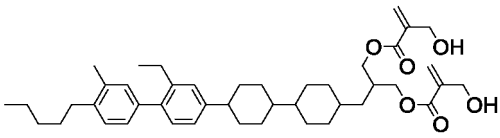
1ε-12-70 

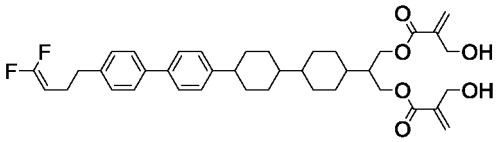
1ε-12-71 

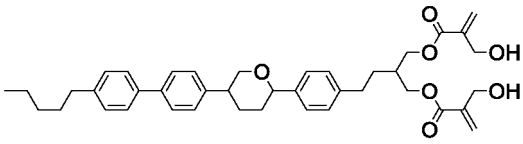
1ε-12-72 

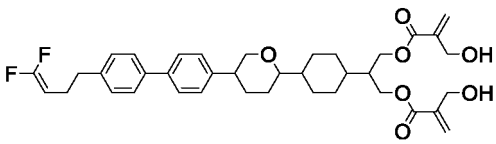
1ε-12-73 

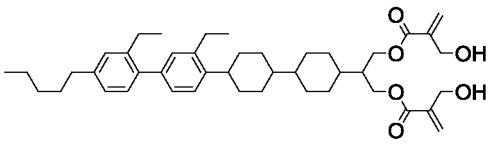
1ε-12-74 

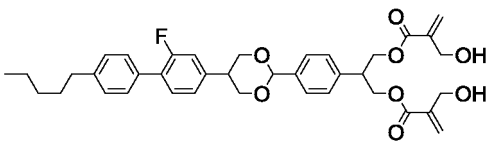
1ε-12-75 

1ε-12-76 

1ε-12-77 

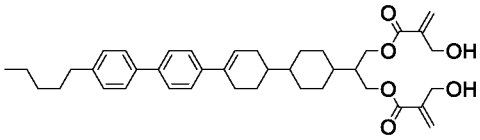
1ε-12-78 

1ε-12-79 

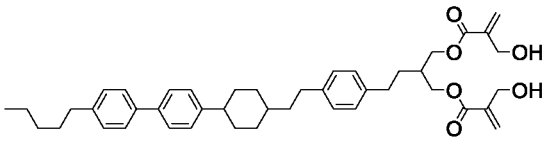
1ε-12-80 

No.

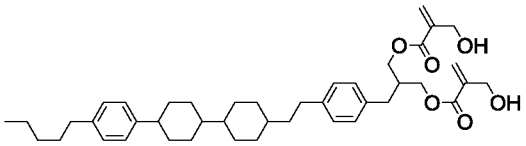
1ε-12-81



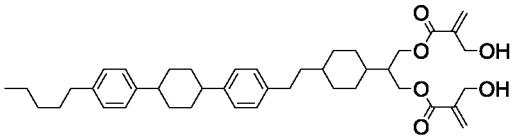
1ε-12-82



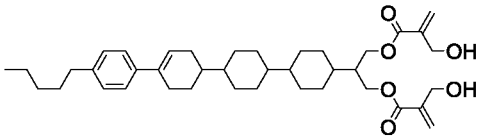
1ε-12-83



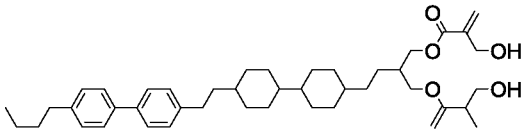
1ε-12-84



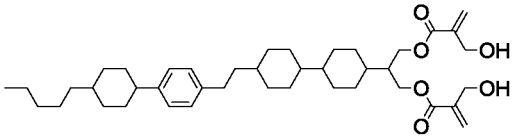
1ε-12-85



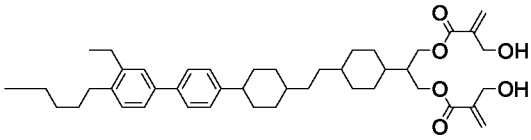
1ε-12-86



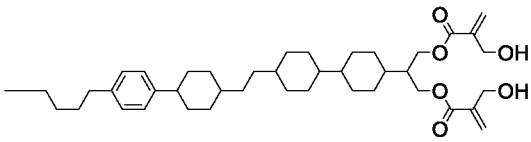
1ε-12-87



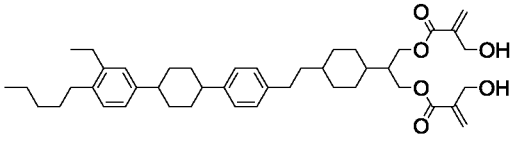
1ε-12-88



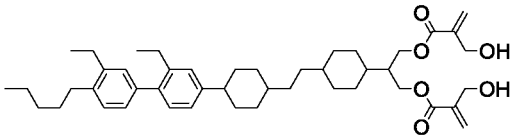
1ε-12-89



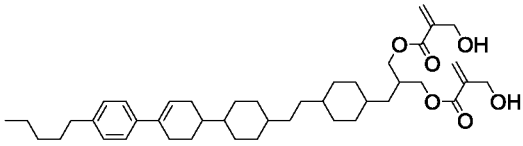
1ε-12-90



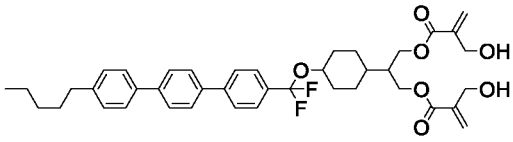
1ε-12-91



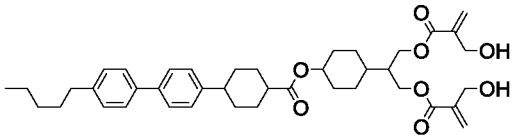
1ε-12-92



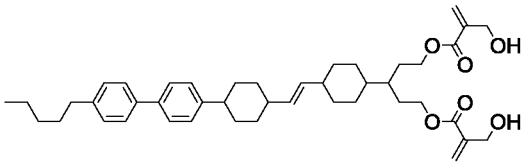
1ε-12-93



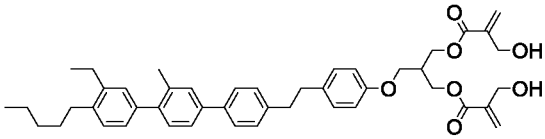
1ε-12-94



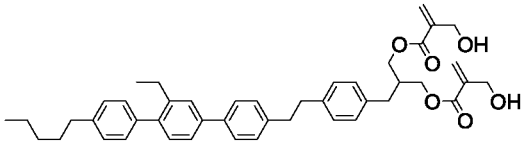
1ε-12-95



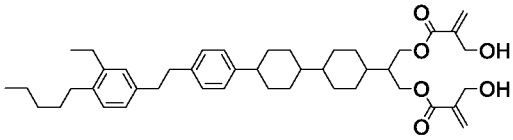
1ε-12-96



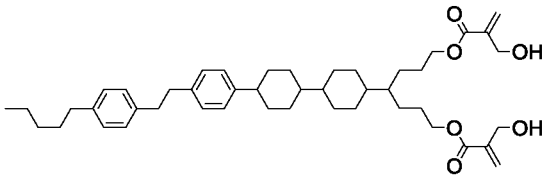
1ε-12-97



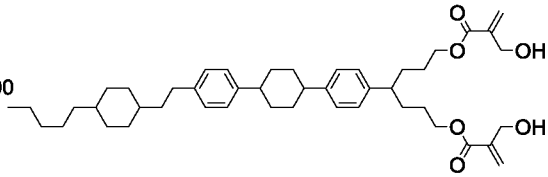
1ε-12-98



1ε-12-99



1ε-12-100



【産業上の利用可能性】

【０６５２】

化合物（１）は、化学的に高い安定性、液晶分子を配向させる高い能力、液晶組成物への高い溶解度を有し、そして液晶表示素子に用いた場合の電圧保持率が大きい。化合物（

１）を含む液晶組成物は、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性、大きな弾性定数などの特性の少なくとも１つを充足する。この組成物を含む本願の液晶表示素子は、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するので、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いることができる。さらに、化合物（１）が少なくとも１つの環より構成されたメソゲン部位と極性基とを有する重合性化合物であり、重合により配向制御層となり得るため、本願の液晶表示素子はポリイミド配向膜等の配向膜を別途形成する必要がない。

【０６５３】

本明細書中で引用する刊行物、特許出願および特許を含むすべての文献を、各文献を個々に具体的に示し、参照して組み込むのと、また、その内容のすべてをここで述べるのと同じ程度で、参照してここに組み込む。

【０６５４】

本発明の説明に関連して（特に以下の請求項に関連して）用いられる名詞および同様な指示語の使用は、本明細書中で特に指摘したり、明らかに文脈と矛盾したりしない限り、単数および複数の両方に及ぶものと解釈される。語句「備える」、「有する」、「含む」および「包含する」は、特に断りのない限り、オープンエンドターム（すなわち「～を含むが限定しない」という意味）として解釈される。本明細書中の数値範囲の具陳は、本明細書中で特に指摘しない限り、単にその範囲内に該当する各値を個々に言及するための略記法としての役割を果たすことだけを意図しており、各値は、本明細書中で個々に列挙されたかのように、明細書に組み込まれる。本明細書中で説明されるすべての方法は、本明細書中で特に指摘したり、明らかに文脈と矛盾したりしない限り、あらゆる適切な順番で行うことができる。本明細書中で使用するあらゆる例または例示的な言い回し（例えば「など」）は、特に主張しない限り、単に本発明をよりよく説明することだけを意図し、本発明の範囲に対する制限を設けるものではない。明細書中のいかなる言い回しも、本発明の実施に不可欠である、請求項に記載されていない要素を示すものとは解釈されないものとする。

【０６５５】

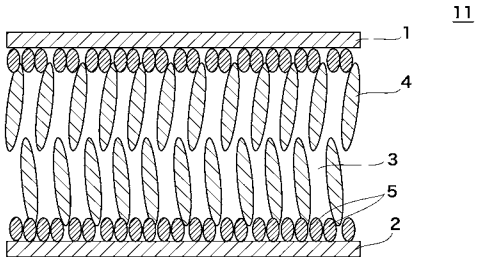
本明細書中では、本発明を実施するため本発明者が知っている最良の形態を含め、本発明の好ましい実施の形態について説明している。当業者にとっては、上記説明を読んだ上で、これらの好ましい実施の形態の変形が明らかとなろう。本発明者は、熟練者が適宜このような変形を適用することを予期しており、本明細書中で具体的に説明される以外の方法で本発明が実施されることを予定している。従って本発明は、準拠法で許されているように、本明細書に添付された請求項に記載の内容の変更および均等物をすべて含む。さらに、本明細書中で特に指摘したり、明らかに文脈と矛盾したりしない限り、すべての変形における上記要素のいずれの組み合わせも本発明に包含される。

【符号の説明】

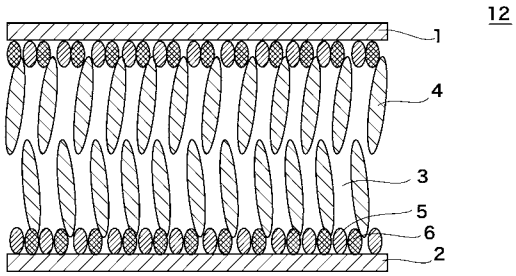
【０６５６】

１　　カラーフィルタ基板
２　　アレイ基板
３　　液晶組成物
４　　液晶性化合物
５　　重合性極性化合物、配向性モノマー、化合物（１）
６　　重合性化合物、反応性モノマー、化合物（１６）
７　　配向膜
８　　重合性化合物
１１、１２　素子
２１　　従来の素子

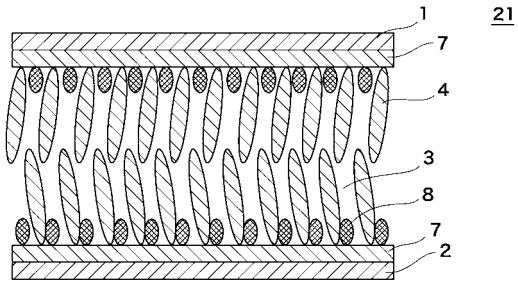
【図１】



【図２】



【図３】



【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2017/028326

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C09K19/54(2006.01)i, *C09K19/12*(2006.01)i, *C09K19/14*(2006.01)i, *C09K19/18*(2006.01)i, *C09K19/20*(2006.01)i, *C09K19/30*(2006.01)i, *C09K19/32*(2006.01)i, *C09K19/34*(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)
C09K19/54, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, 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 1996-2017
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2017 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2017

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y A	WO 2016/114093 A1 (JNC Corp., JNC Petrochemical Corp.), 21 July 2016 (21.07.2016), paragraphs [0123], [0140] to [0276] & TW 201632589 A	1,2,8-11,13,14 12 3-7
Y A	JP 2015-163908 A (Sharp Corp.), 10 September 2015 (10.09.2015), paragraph [0005] & US 2015/0177571 A1 paragraph [0005] & WO 2013/191004 A1	12 1-11,13,14

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

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

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
13 September 2017 (13.09.17)	26 September 2017 (26.09.17)
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3,Kasumigaseki,Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915,Japan	Authorized officer Telephone No.

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (January 2015)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2017/028326

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P,X P,A	JP 6070973 B1 (JNC Corp., JNC Petrochemical Corp.), 01 February 2017 (01.02.2017), claims 1 to 3; paragraphs [0001] to [0160] & WO 2017/104154 A1	1-3,8-11,13,14 4-7,12

Form PCT/ISA/210 (continuation of second sheet) (January 2015)

国際調査報告 | 国際出願番号 PCT／JP2017／028326

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. C09K19/54(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/18(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/32(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i, G02F1/1337(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. C09K19/54, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/18, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/32, C09K19/34, G02F1/1337

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922－1996年
日本国公開実用新案公報	1971－2017年
日本国実用新案登録公報	1996－2017年
日本国登録実用新案公報	1994－2017年

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）

C. 関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	WO 2016/114093 A1（ＪＮＣ株式会社、ＪＮＣ石油化学株式会社）2016.07.21, 【０１２３】【０１４０】～【０２７６】	1,2,8-11,13,14
Y	& TW 201632589 A	12
A		3-7
Y	JP 2015-163908 A（シャープ株式会社）2015.09.10, 【０００５】 &	12
A	US 2015/0177571 A1 【０００５】& WO 2013/191004 A1	1-11,13,14

☑ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊ 引用文献のカテゴリー
「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
１３．０９．２０１７	２６．０９．２０１７

国際調査機関の名称及びあて先
日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ）
郵便番号１００－８９１５
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

特許庁審査官（権限のある職員） ２Ｌ ３８１２
廣田 かおり
電話番号 ０３－３５８１－１１０１ 内線 ３２９５

国際調査報告

国際出願番号 ＰＣＴ／ＪＰ２０１７／０２８３２６

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
Ｐ，Ｘ	JP 6070973 B1 （ＪＮＣ株式会社、ＪＮＣ石油化学株式会社） 2017.02.01, 【請求項１】～【請求項３】【０００１】～【０１６０】	1-3, 8-11, 13, 14
Ｐ，Ａ	& WO 2017/104154 A1	4-7, 12

フロントページの続き

(81)指定国 AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(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),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),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,JO,JP,KE,KG,KH,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

(74)代理人 100100398
弁理士 柴田 茂夫
(72)発明者 片野 裕子
千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者 近藤 史尚
千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者 荻田 和寛
千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者 遠藤 浩史
千葉県市原市五井海岸５番地の１ ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内

Ｆターム(参考) 2H290 BD04 DA01 DA03
4H027 BA01 BA11 BB11 BD02 BD03 BD04 BD05 BD07 BD11 BD12
CD01 CD05 CG05 CK05 CM01 CM05 CP05 CQ01 CQ04 CQ05
CR04 CT01 CT02 CT04 CT05 CU05 CW01 DH05 DL05

（注）この公表は、国際事務局（ＷＩＰＯ）により国際公開された公報を基に作成したものである。なおこの公表に係る日本語特許出願（日本語実用新案登録出願）の国際公開の効果は、特許法第１８４条の１０第１項(実用新案法第４８条の１３第２項）により生ずるものであり、本掲載とは関係ありません。

专利名称(译)	液晶表示素子、表示装置		
公开(公告)号	JPWO2018025974A1	公开(公告)日	2019-06-06
申请号	JP2018531990	申请日	2017-08-03
[标]申请(专利权)人(译)	捷恩智株式会社		
申请(专利权)人(译)	家长株式会社 家长石油化学株式会社		
[标]发明人	片野裕子 近藤史尚 遠藤浩史		
发明人	片野 裕子 近藤 史尚 荻田 和寛 遠藤 浩史		
IPC分类号	G02F1/1337 C09K19/54 C09K19/56 C09K19/38		
CPC分类号	C09K19/12 C09K19/14 C09K19/18 C09K19/20 C09K19/30 C09K19/32 C09K19/34 C09K19/54 G02F1/1337		
FI分类号	G02F1/1337.520 C09K19/54.Z C09K19/56 C09K19/38		
F-TERM分类号	2H290/BD04 2H290/DA01 2H290/DA03 4H027/BA01 4H027/BA11 4H027/BB11 4H027/BD02 4H027/BD03 4H027/BD04 4H027/BD05 4H027/BD07 4H027/BD11 4H027/BD12 4H027/CD01 4H027/CD05 4H027/CG05 4H027/CK05 4H027/CM01 4H027/CM05 4H027/CP05 4H027/CQ01 4H027/CQ04 4H027/CQ05 4H027/CR04 4H027/CT01 4H027/CT02 4H027/CT04 4H027/CT05 4H027/CU05 4H027/CW01 4H027/DH05 4H027/DL05		
代理人(译)	金井俊之 石川县隆		
优先权	2016153266 2016-08-03 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明是一种液晶显示装置，其具有例如可使用该装置的温度范围宽，响应时间短，电压保持率高，阈值电压低，对比度大，寿命长等特征。本发明的液晶显示元件包括：第一基板；形成在第一基板上的多个像素电极；第二基板；以及形成在第二基板上并面对像素电极的像素电极。以及在像素电极和对电极之间包含液晶组合物的液晶层；由包含作为液晶组合物的一种成分的取向单体的聚合物形成的取向控制层。 并且在第一基板侧和第二基板侧的每一个上形成取向控制层。 由于取向单体是具有由至少一个环和极性基团组成的介晶部分的可聚合极性化合物，因此本发明的液晶显示装置是通过取向控制层形成的液晶，而没有形成取向膜。 组合物中的液晶化合物可以垂直取向。