



(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ

(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)  
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11)



1-0043178

(51)<sup>2020.01</sup> C07D 311/94; G03C 1/73; G02B 1/00

(13) B

(21) 1-2020-07179

(22) 28/05/2018

(86) PCT/EP2018/063893 28/05/2018

(87) WO 2019/228604 A1 05/12/2019

(45) 25/02/2025 443

(43) 25/03/2021 396

(73) TRANSITIONS OPTICAL, LTD. (IE)

IDA Industrial Estate Dunmore Road, Tuam, Co. Galway, Ireland

(72) WALTERS, Robert (US); CHIU, Chien-Yang (US); CHOPRA, Anu (US);  
DABIDEEN, Darrin (US); MONDAL, Sujit (US); PARISE, Nick (US); XIAO,  
Wenjing (US).

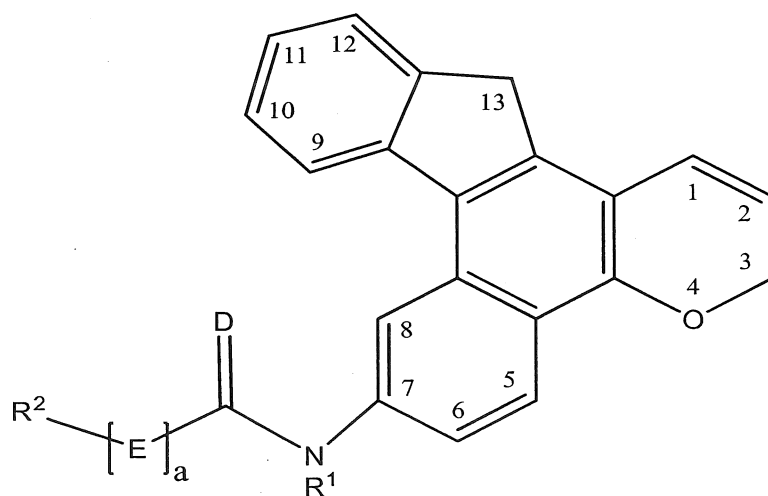
(74) Văn phòng Luật sư MINERVAS (MINERVAS)

(54) HỢP CHẤT NAPHTOPYRAN NGỪNG TỤ VÒNG INDENO QUANG SẮC VỚI  
SỰ PHỤ THUỘC VÀO NHIỆT ĐỘ ĐƯỢC GIẢM, CHẾ PHẨM VÀ VẬT PHẨM  
QUANG SẮC CHỨA HỢP CHẤT NÀY

(21) 1-2020-07179

(57) Hợp chất quang sắc có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (I)

sau đây,



Công thức (I)

trong đó D là oxy hoặc lưu huỳnh; E là oxy, lưu huỳnh, hoặc  $NR^{2'}$ ; a là 0 hoặc 1;  $R^1$  là hydro, hoặc alkyl được thế hoặc không được thế;  $R^2$  và  $R^{2'}$  được chọn một cách độc lập từ hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế; và hợp chất quang sắc này là hợp chất quang sắc thuận nghịch nhiệt.

### **Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập**

Sáng chế đề cập đến các hợp chất quang sắc liên kết vòng, như là các hợp chất naphthopyran ngưng tụ vòng indeno quang sắc, và các chế phẩm quang sắc và các vật phẩm quang sắc chứa các hợp chất quang sắc này.

### **Tình trạng kỹ thuật của sáng chế**

Các hợp chất quang sắc chuyển từ trạng thái (hoặc dạng) này sang trạng thái khác để phản ứng lại các bước sóng nhất định của bức xạ điện từ (như là, “bức xạ quang hóa”). Mỗi trạng thái có một phổ hấp thụ đặc trưng. Ví dụ, nhiều hợp chất quang sắc chuyển hóa từ trạng thái bất hoạt (ví dụ, được khử màu hoặc về cơ bản không màu) sang trạng thái hoạt hóa (ví dụ, được tạo màu) khi phơi lộ với bức xạ quang hóa. Khi bức xạ quang hóa bị loại bỏ, các hợp chất quang sắc này chuyển hóa ngược từ trạng thái hoạt hóa lại trạng thái bất hoạt. “Hợp chất quang sắc thuận nghịch nhiệt” là hợp chất quang sắc mà chuyển hóa từ trạng thái bất hoạt sang trạng thái hoạt hóa khi phản ứng lại bức xạ quang hóa, và trở về trạng thái bất hoạt khi phản ứng lại năng lượng nhiệt. Phản ứng hoạt hóa (từ bất hoạt sang hoạt hóa) chủ yếu là quang hóa trong khi phản ứng khử hoạt hóa (từ hoạt hóa sang bất hoạt) chủ yếu là nhiệt. Các hợp chất quang sắc như vậy cho thấy điều được gọi là “sự phụ thuộc vào nhiệt độ” hoặc “tác động phụ thuộc vào nhiệt độ”.

“Tác động phụ thuộc vào nhiệt độ” là kết quả của sự thay đổi trong nồng độ cân bằng giữa trạng thái bất hoạt và trạng thái hoạt hóa do nhiệt độ. Khi nhiệt độ

tăng, sự cân bằng này được dịch chuyển sang trạng thái bất hoạt (ví dụ, được khử màu). Khi nhiệt độ giảm, sự cân bằng này được dịch chuyển sang trạng thái hoạt hóa (ví dụ, được tạo màu). Các vật phẩm và nguyên liệu chứa các hợp chất quang sắc này do đó sẽ thể hiện sự phản ứng khác nhau phụ thuộc vào nhiệt độ của chúng. Do phản ứng thuận được hoạt hóa bằng ánh sáng và phản ứng nghịch được gây ra bằng nhiệt, các hợp chất quang sắc thuận nghịch nhiệt, khi được hoạt hóa, có xu hướng tối hơn ở nhiệt độ lạnh hơn và trong hơn ở nhiệt độ ấm hơn.

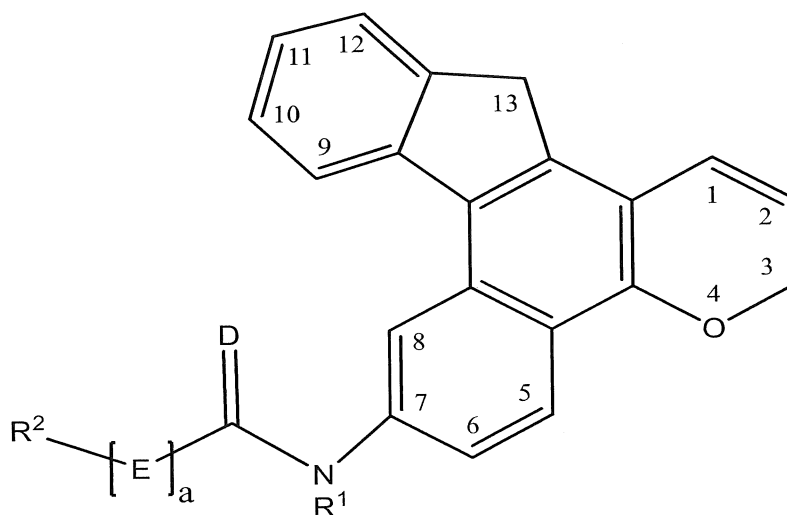
Tác động phụ thuộc vào nhiệt độ là một vấn đề đặc biệt đối với các vật phẩm quang sắc, như là các thấu kính mắt quang sắc. Sự tạo màu vật phẩm quang sắc bị tác động bởi nhiệt độ mà ở đó vật phẩm này được sử dụng. Ví dụ, vật phẩm quang sắc mà chứa hợp chất quang sắc thuận nghịch nhiệt có thể trở nên không đủ tối khi nhiệt độ môi trường xung quanh nóng và/hoặc có thể trở nên quá tối khi nhiệt độ môi trường xung quanh lạnh. “Nhiệt độ môi trường xung quanh” có nghĩa là nhiệt độ của môi trường mà tiếp xúc trực tiếp với vật phẩm quang sắc. Ví dụ, đối với các thấu kính mắt quang sắc được đeo bởi người đeo, nhiệt độ môi trường xung quanh sẽ là nhiệt độ của không khí mà tiếp xúc trực tiếp với các thấu kính mắt quang sắc.

Các hợp chất quang sắc có thể được đặc trưng với các đặc tính khác nhau, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi: tỷ lệ phai màu; sự thay đổi trong mật độ quang học ( $\Delta OD$ ); sự thay đổi trong mật độ quang học khi bão hòa ( $\Delta OD$ ); độ nhạy ( $\Delta OD$ /nhỏ nhất); hiệu suất mà tại đó hợp chất quang sắc này hấp thụ bức xạ đủ để hoạt hóa hợp chất quang sắc (độ màu); và các đặc tính lưỡng sắc (chẳng hạn như trong trường hợp của các hợp chất quang sắc có tính lưỡng sắc), mà có thể được định lượng theo các giá trị tỷ lệ hấp thụ (AR). Sự thay đổi trong mật độ quang học đo sự thay đổi từ trạng thái bất hoạt sang trạng thái hoạt hóa.

Một cách để định lượng sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các hợp chất quang sắc là bằng phép đo sự khác biệt trong mật độ quang học của trạng thái hoạt hóa ở hai nhiệt độ. Khi so sánh các hợp chất quang sắc, tất cả những thứ khác đều bằng nhau, hợp chất với sự khác biệt nhỏ hơn trong mật độ quang học giữa hai nhiệt độ ở trạng thái hoạt hóa được coi là có sự phụ thuộc vào nhiệt độ nhỏ hơn, tức là tác động phụ thuộc vào nhiệt độ giảm. Điều được mong muốn là cung cấp hợp chất quang sắc mà có sự phụ thuộc nhiệt độ giảm so với các hợp chất quang sắc tổ đã biết. Ví dụ, điều được mong muốn là cung cấp các hợp chất naphthopyran ngưng tụ vòng indeno quang sắc mới với sự phụ thuộc vào nhiệt độ giảm.

### Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Hợp chất quang sắc có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (I) sau đây,



Công thức (I)

trong đó D là oxy hoặc lưu huỳnh, E là oxy, lưu huỳnh, hoặc  $\text{NR}^{2'}$ ; a là 0 hoặc 1;  $\text{R}^1$  là hydro, alkyl được thế hoặc không được thế; mỗi  $\text{R}^2$  và  $\text{R}^{2'}$  được lựa chọn một cách độc lập từ hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc

heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế; và hợp chất quang sắc này là hợp chất quang sắc thuận nghịch nhiệt.

Các đặc điểm mà đặc trưng cho sáng chế này được chỉ ra một cách cụ thể trong các yêu cầu bảo hộ, mà được đính kèm và tạo thành một phần của sự bộc lộ này. Các đặc điểm này và các đặc điểm khác của sáng chế, các ưu điểm hoạt động của nó và các đối tượng cụ thể thu được bằng việc sử dụng nó sẽ được hiểu đầy đủ hơn từ phần mô tả chi tiết sau đây mà trong đó các phương án không giới hạn của sáng chế được minh họa và mô tả.

### **Mô tả vắn tắt các hình vẽ**

Fig. 1 minh họa sơ đồ tổng quát, Sơ đồ 1, của phương pháp mẫu cho việc sản xuất các hợp chất quang sắc theo sáng chế.

Fig. 2 minh họa sơ đồ tổng quát, Sơ đồ 2, của phương pháp mẫu khác cho việc sản xuất các hợp chất quang sắc theo sáng chế.

### **Mô tả chi tiết sáng chế**

Như được sử dụng ở đây, dạng số ít của mạo từ không xác định “một” sẽ bao gồm các tham chiếu số nhiều trừ khi được giới hạn rõ ràng và cụ thể tới một tham chiếu khác.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “bao gồm” là đồng nghĩa với “chứa”.

Trừ khi được chỉ ra khác, tất cả các phạm vi hoặc tỷ lệ được bộc lộ ở đây phải được hiểu là bao gồm bất kỳ và tất cả giá trị phụ hoặc tỷ lệ phụ được xếp vào trong đó. Ví dụ, phạm vi hoặc tỷ lệ “1 đến 10” được đề cập cần được xác định là bao gồm bất kỳ và tất cả các giá trị phụ giữa (và bao gồm) giá trị tối thiểu là 1 và giá trị tối đa là 10; nghĩa là, tất cả các giá trị phụ hoặc tỷ lệ phụ bắt đầu bằng giá

trị tối thiểu là 1 hoặc lớn hơn và kết thúc bằng giá trị tối đa là 10 hoặc thấp hơn, chẳng hạn như nhưng không bị giới hạn bởi, 1 đến 6,1, 3,5 đến 7,8, 5,5 đến 10.

Như được sử dụng ở đây, trừ khi được chỉ ra khác, sự biểu thị từ trái sang phải của các nhóm liên kết, chẳng hạn như nhóm liên kết hóa trị hai, bao gồm các hướng thích hợp khác, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, các hướng từ phải sang trái. Nhằm mục đích minh họa không giới hạn, sự biểu thị từ trái qua

phải của nhóm liên kết hóa trị hai  $\text{---}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}\text{---O}\text{---}$  hoặc tương đương  $\text{---C(O)O}\text{---}$ ,

bao gồm sự biểu thị từ phải sang trái của nó,  $\text{---O}\text{---}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}\text{---}$ , hoặc tương đương  $\text{---O(O)C}\text{---}$  hoặc  $\text{---OC(O)}\text{---}$ .

Khác với trong các ví dụ hoạt động, hoặc nếu được chỉ ra khác, tất cả các số thể hiện số lượng thành phần, các điều kiện phản ứng, v.v. được sử dụng trong bản mô tả và yêu cầu bảo hộ này phải được hiểu là được sửa đổi trong mọi trường hợp bằng thuật ngữ “khoảng”. Bởi “khoảng” có nghĩa là cộng hoặc trừ hai mươi lăm phần trăm giá trị được đề cập, chẳng hạn như cộng hoặc trừ mười phần trăm giá trị được đề cập. Tuy nhiên, điều này không nên được xác định như là giới hạn đối với bất kỳ phân tích nào về các giá trị theo học thuyết tương đương.

Như được sử dụng ở đây, các giá trị trọng lượng phân tử của các polyme, chẳng hạn như trọng lượng phân tử trung bình ( $M_w$ ) và trọng lượng phân tử trung bình số ( $M_n$ ), được xác định bằng phép sắc ký thấm gel mà sử dụng các chất chuẩn thích hợp, chẳng hạn như các chất chuẩn polystyren.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “polyme” có nghĩa là các polyme đồng nhất (ví dụ, được sản xuất từ các loại monome đơn), các copolyme (ví dụ, được sản xuất từ ít nhất hai loại monome), và các polyme ghép.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “(met)acrylat” và các thuật ngữ tương tự, chẳng hạn như “este axit (met)acrylic” có nghĩa là các dẫn xuất của axit acrylic và axit metacrylic, bao gồm các este acrylat, este metacrylat, các acrylamit, các metacrylamit, axit acrylic và axit metacrylic. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “axit (met)acrylic” có nghĩa là axit metacrylic và/hoặc axit acrylic.

Các hợp chất quang sắc theo sáng chế, với một số phương án, còn được đề cập đến ở đây như các hợp chất quang sắc có tính lưỡng sắc (chẳng hạn như, khi chúng bao gồm một hoặc nhiều nhóm kéo dài, chẳng hạn như  $L^1$ ).

Các hợp chất quang sắc theo sáng chế, như được mô tả ở đây, bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các hợp chất quang sắc được biểu thị bằng Công thức (I), Công thức (Ia), Công thức (Ib) và Công thức (Ic), trong mỗi trường hợp có thể tùy ý bao gồm thêm một hoặc nhiều phụ phẩm, mà là kết quả của sự tổng hợp các hợp chất như vậy.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “quang sắc” và các thuật ngữ tương tự, chẳng hạn như “hợp chất quang sắc” có nghĩa là có phổ hấp thụ cho ít nhất bức xạ nhìn thấy được mà thay đổi để phản ứng với sự hấp thụ của ít nhất bức xạ quang hóa. Hơn nữa, như được sử dụng ở đây thuật ngữ “vật liệu quang sắc” có nghĩa là bất kỳ chất nào được điều chỉnh để thể hiện các đặc tính quang sắc (chẳng hạn như, được điều chỉnh để có phổ hấp thụ cho ít nhất bức xạ nhìn thấy được mà thay đổi để phản ứng với sự hấp thụ của ít nhất bức xạ quang hoá) và bao gồm ít nhất một hợp chất quang sắc.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “bức xạ quang hóa” có nghĩa là bức xạ điện từ mà có khả năng gây ra phản ứng trong vật liệu, chẳng hạn như, nhưng

không bị giới hạn bởi, sự chuyển hóa vật liệu quang sắc từ dạng hoặc trạng thái này sang dạng hoặc trạng thái khác sẽ được thảo luận chi tiết hơn ở đây.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “lưỡng sắc” có nghĩa là có khả thể hấp thụ một trong hai thành phần phân cực theo hướng vuông góc với nhau của ít nhất bức xạ truyền mạnh hơn bức xạ khác.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “quang sắc-lưỡng sắc” và các thuật ngữ tương tự, chẳng hạn như “hợp chất quang sắc có tính lưỡng sắc”, có nghĩa là có và/hoặc cung cấp cả hai đặc tính quang sắc (nghĩa là có phổ hấp thụ đối với ít nhất bức xạ nhìn thấy được mà thay đổi để phản ứng với ít nhất là bức xạ quang hóa), và các đặc tính lưỡng sắc (nghĩa là có thể hấp thụ một trong hai thành phần phân cực theo hướng vuông góc với nhau của ít nhất bức xạ truyền mạnh hơn bức xạ khác).

Như được sử dụng ở đây, và trừ khi được đề cập khác hoặc giới hạn khác, thuật ngữ “vật liệu quang sắc” bao gồm các vật liệu và hợp chất quang sắc thuận nghịch nhiệt và vật liệu và hợp chất quang sắc thuận nghịch không nhiệt. Thuật ngữ “các hợp chất/vật liệu quang sắc thuận nghịch nhiệt” như được sử dụng ở đây có nghĩa là các hợp chất/vật liệu mà có thể chuyển hóa từ trạng thái thứ nhất, ví dụ “trạng thái trong”, sang trạng thái thứ hai, ví dụ “trạng thái có màu”, để phản ứng với bức xạ quang hóa, và chuyển về trạng thái thứ nhất để phản ứng với năng lượng nhiệt. Thuật ngữ “hợp chất/vật liệu quang sắc thuận nghịch không nhiệt” như được sử dụng ở đây có nghĩa là các hợp chất/vật liệu mà có thể chuyển hóa từ trạng thái thứ nhất, ví dụ “trạng thái trong”, sang trạng thái thứ hai, ví dụ “trạng thái có màu”, để phản ứng với bức xạ quang hóa, và chuyển về trạng thái thứ nhất để phản ứng với bức xạ quang hóa của (các) bước sóng về cơ bản tương tự như

(các) sự hấp thụ của trạng thái có màu (ví dụ, việc ngừng tiếp xúc với bức xạ quang hóa như vậy).

Như được sử dụng ở đây, để điều chỉnh thuật ngữ “trạng thái”, thuật ngữ “thứ nhất” và “thứ hai” không nhằm đề cập đến bất kỳ thứ tự hoặc niên đại cụ thể nào, mà thay vào đó đề cập đến hai điều kiện hoặc đặc tính khác nhau. Nhằm mục đích minh họa không giới hạn, trạng thái thứ nhất và trạng thái thứ hai của hợp chất quang sắc có thể khác nhau về ít nhất một đặc tính quang học, chẳng hạn như nhưng không bị giới hạn bởi sự hấp thụ bức xạ nhìn thấy được và/hoặc tia cực tím. Do đó, theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây, các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể có phổ hấp thụ khác nhau ở mỗi trạng thái thứ nhất và trạng thái thứ hai. Ví dụ, trong khi không giới hạn ở đây, hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể trong suốt ở trạng thái thứ nhất và có màu ở trạng thái thứ hai. Ngoài ra, hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể có màu thứ nhất ở trạng thái thứ nhất và màu thứ hai ở trạng thái thứ hai.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “quang học” có nghĩa là thuộc về hoặc liên quan đến ánh sáng và/hoặc tầm nhìn. Ví dụ, theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây, vật phẩm hoặc thành phần hoặc thiết bị quang học có thể được chọn từ các vật phẩm, thành phần và thiết bị nhãn khoa; các vật phẩm, thành phần hoặc thiết bị hiển thị; cửa sổ; gương kính; hoặc các vật phẩm, chi tiết và thiết bị cảm biến tinh thể lỏng chủ động và thụ động.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “nhãn khoa” có nghĩa là thuộc về hoặc liên quan đến mắt và thị lực. Các ví dụ không giới hạn về các vật phẩm hoặc thành phần nhãn khoa bao gồm các thấu kính điều chỉnh và không điều chỉnh mà gồm kính đơn tròng hoặc kính đa tròng, mà có thể là cả thấu kính đa tròng phân đoạn hoặc không phân đoạn (chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, thấu kính

hai tròng, thấu kính ba tròng và thấu kính đa tròng), cũng như các thành phần khác được sử dụng để điều chỉnh, bảo vệ, hoặc tăng cường thị lực (về mặt thẩm mỹ hoặc mục đích khác), bao gồm nhưng không giới hạn, kính áp tròng, kính nội nhãn, kính lúp, và kính bảo vệ hoặc kính che mắt.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “hiển thị” có nghĩa là sự trình bày thông tin có thể nhìn thấy được hoặc đọc được bằng máy dưới dạng chữ, số, ký hiệu, thiết kế hoặc hình vẽ. Các ví dụ không giới hạn về các thành phần hiển thị bao gồm màn hình, màn hiển thị và các chi tiết an ninh, chẳng hạn như các dấu hiệu an ninh.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “cửa sổ” có nghĩa là một lỗ hổng được điều chỉnh để cho phép sự truyền bức xạ qua đó. Các ví dụ không giới hạn về cửa sổ bao gồm các vật phẩm trong suốt trên ô tô và máy bay, kính chắn gió, bộ lọc, cửa chớp, và công tắc quang học.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “gương kính” có nghĩa là bề mặt mà phản xạ một cách đặc biệt phần lớn ánh sáng tới.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “cảm biến tinh thể lỏng” đề cập đến cấu trúc chứa vật liệu tinh thể lỏng mà có thể được sắp xếp theo thứ tự. Một ví dụ không giới hạn về thành phần cảm biến tinh thể lỏng là màn hình tinh thể lỏng.

Như được sử dụng ở đây, các thuật ngữ mang tính mô tả không gian hoặc hướng, chẳng hạn như “trái”, “phải”, “bên trong”, “bên ngoài”, “bên trên”, “bên dưới” hoặc tương tự, liên quan đến sáng chế như được thể hiện trong các hình vẽ. Tuy nhiên cần phải hiểu rằng sáng chế có thể giả thuyết các hướng thay thế khác nhau và, theo đó, các thuật ngữ như vậy không được xác định là giới hạn.

Như được sử dụng ở đây, các thuật ngữ “được tạo thành trên”, “được đặt trên”, “được tạo ra trên”, “được áp trên”, “được ở trên” hoặc “được định vị trên” có nghĩa là được tạo thành, được đặt, được tạo ra, được áp, ở, hoặc được định vị trên nhưng không nhất thiết phải tiếp xúc trực tiếp (hoặc tiếp giáp) với thành phần bên dưới, hoặc bề mặt của thành phần bên dưới. Ví dụ, một lớp “được định vị trên” lớp nền không loại trừ sự hiện hữu của một hoặc nhiều lớp, lớp phủ, hoặc màng khác có cùng hoặc khác thành phần được nằm giữa lớp được định vị hoặc được tạo thành và chất nền.

Như được sử dụng ở đây, việc thuật lại liên quan đến các vị trí vòng như, nhưng không bị giới hạn bởi, vị trí-x (ví dụ, vị trí-3 hoặc vị trí-13) có nghĩa là vị trí cụ thể trong cấu trúc vòng, chẳng hạn như cấu trúc khung lõi, của hợp chất hóa học, chẳng hạn như các hợp chất quang sắc vòng ngưng tụ vòng indeno theo sáng chế, và được mô tả ở đây theo một số phương án bằng các chữ số trong cấu trúc vòng của các công thức hóa học đại diện chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi các Công thức (I), (Ia), (Ib) và/hoặc (Ic).

“Cấu trúc khung lõi” có nghĩa là hợp chất bao gồm ít nhất cấu trúc khung được mô tả trong Công thức liên quan. Cấu trúc khung lõi được tạo ra nhằm mục đích xác định các vị trí vòng được đánh số. Tuy nhiên, cần phải hiểu rằng, trừ khi được thể hiện một cách cụ thể ngược lại, (các) cấu trúc khung lõi có thể có một hoặc nhiều nguyên tử hoặc một hoặc nhiều nhóm (không được minh họa cụ thể trên Công thức tương ứng) mà liên kết với một hoặc nhiều các vị trí vòng được đánh số trên cấu trúc khung lõi, mà có thể giống hoặc khác nhau.

Các hợp chất quang sắc theo sáng chế được đề cập ở đây với tham chiếu tới thuật ngữ “cấu trúc khung lõi”, mà có thể được biểu thị bằng một hoặc nhiều công

thức, chẳng hạn như nhưng không bị giới hạn bởi các Công thức (I), (Ia), (Ib) và/hoặc (Ic).

Tất cả các tài liệu hoặc các phần của tài liệu, chẳng hạn như nhưng không bị giới bởi các sáng chế đã cấp và đơn đăng ký sáng chế, được đề cập ở đây, và trừ khi được chỉ ra khác, phải được xem là “được kết hợp bằng việc tham khảo” trong toàn bộ nội dung của chúng.

Như được sử dụng ở đây, sự thuật lại của nhóm “được thế”, có nghĩa là nhóm bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, nhóm alkyl, nhóm heteroxycloalkyl, nhóm aryl, và/hoặc nhóm heteroaryl, trong đó ít nhất một hydro của chúng được thay thế hoặc được thế bằng một nhóm không phải hydro, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, các nhóm alkoxy; các nhóm halo (ví dụ, F, Cl, I và Br); các nhóm hydroxyl; các nhóm thiol; các nhóm alkylthio; các nhóm xeton; các nhóm andehit; các nhóm este; các nhóm axit cacboxylic; các nhóm axit photphoric; các nhóm este axit photphoric; các nhóm axit sunfonic; các nhóm este axit sunfonic; nhóm nito; các nhóm xyano; các nhóm alkyl (bao gồm các nhóm aralkyl); các nhóm alkenyl; nhóm alkynyl; các nhóm haloalkyl; các nhóm perhaloalkyl; các nhóm heteroxycloalkyl; các nhóm aryl (bao gồm các nhóm alkaryl, bao gồm aryl được thế hydroxyl, chẳng hạn như phenol, và gồm cả aryl đa vòng liên kết vòng); các nhóm heteroaryl (bao gồm các nhóm heteroaryl đa vòng liên kết vòng); các nhóm amin, chẳng hạn như  $-N(R_{11}')(R_{12}')$  mà trong đó mỗi  $R_{11}'$  và  $R_{12}'$  được chọn độc lập, ví dụ, từ hydro, alkyl, heteroxycloalkyl, aryl, hoặc heteroaryl; các nhóm cacboxylat; các nhóm siloxan; các nhóm alkoxysilan; các nhóm polysiloxan; các nhóm amit; các nhóm cacbamat; các nhóm cacbonat; các nhóm ure; các nhóm polyeste; các nhóm polyete; các nhóm polycacbonat; các nhóm polyuretan; các

nhóm acrylat; các nhóm metacrylat; các dị vòng chứa nitơ; hoặc sự kết hợp của chúng, bao gồm các nhóm này và các ví dụ như được mô tả thêm ở đây.

“Nhóm aryl” đề cập đến gốc hydrocacbon hóa trị một vòng thơm, và thuật ngữ “thơm” đề cập đến hydrocacbon liên hợp theo vòng có độ ổn định (do sự chuyển vị) lớn hơn đáng kể so với cấu trúc tập trung giả định. Các ví dụ về nhóm aryl bao gồm nhóm aryl C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, phenyl, naphtyl, phenanthryl, và antracenylyl.

Như được sử dụng ở đây, việc thuật lại của “được thế bằng halo” và các thuật ngữ liên quan (chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, các nhóm haloalkyl, các nhóm haloalkenyl, các nhóm haloalkynyl, các nhóm haloaryl và các nhóm halo-heteroaryl) có nghĩa là nhóm mà trong đó ít nhất một, và tối đa và bao gồm tất cả các nhóm hydro có sẵn của chúng được thế bằng nhóm halo. Thuật ngữ “được thế bằng halo” bao gồm cả “được thế bằng perhalo”. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ nhóm được thế bằng perhalo và các thuật ngữ liên quan (chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, nhóm perhaloalkyl, nhóm perhaloalkenyl, nhóm perhaloalkynyl, nhóm perhaloaryl hoặc nhóm perhalo-heteroaryl) có nghĩa là nhóm mà trong đó tất cả các nhóm hydro có sẵn của chúng được thế bằng nhóm halo. Ví dụ, perhalometyl là -CX<sub>3</sub>; perhalophenyl là -C<sub>6</sub>X<sub>5</sub>, trong đó X biểu thị một hoặc nhiều nhóm halo, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi F, Cl hoặc Br.

Như được sử dụng ở đây, việc thuật lại của các nhóm “mạch thẳng hoặc phân nhánh”, chẳng hạn như alkyl mạch thẳng hoặc phân nhánh, ở đây được hiểu là bao gồm: nhóm metylen hoặc nhóm metyl; các nhóm mạch thẳng (hoặc “chuỗi thẳng”), chẳng hạn như các nhóm alkyl C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub> mạch thẳng; và các nhóm được phân nhánh phù hợp, chẳng hạn như nhóm alkyl C<sub>3</sub>-C<sub>25</sub> phân nhánh.

Thuật ngữ “alkyl” như được sử dụng ở đây, có nghĩa là alkyl  $C_1$ - $C_{25}$  mạch thẳng hoặc phân nhánh, mạch vòng hoặc không vòng. Alkyl mạch thẳng hoặc phân nhánh có thể bao gồm alkyl  $C_1$ - $C_{25}$ , chẳng hạn như alkyl  $C_1$ - $C_{20}$ , chẳng hạn như alkyl  $C_2$ - $C_{10}$ , chẳng hạn như alkyl  $C_1$ - $C_{12}$ , chẳng hạn như alkyl  $C_1$ - $C_6$ . Các ví dụ về các nhóm alkyl mà từ đó các nhóm alkyl khác nhau theo sáng chế có thể được chọn, bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các nhóm được đề cập thêm ở đây. Các nhóm alkyl có thể gồm các nhóm “xycloalkyl”. Thuật ngữ “xycloalkyl” như được sử dụng ở đây, có nghĩa là các nhóm mạch vòng phù hợp, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, các nhóm xycloalkyl  $C_3$ - $C_{12}$  (bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, alkyl  $C_5$ - $C_7$  mạch vòng, hoặc alkyl  $C_3$ - $C_{10}$  mạch vòng). Các ví dụ về nhóm xycloalkyl bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các nhóm được đề cập thêm ở đây. Thuật ngữ “xycloalkyl” như được sử dụng ở đây, cũng bao gồm: các nhóm polyxycloalkyl vòng kiểu cầu (hoặc các nhóm alkyl đa vòng kiểu cầu), chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, bixyclo[2.2.1]heptyl (hoặc norbornyl) và bixyclo[2.2.2]octyl; và các nhóm polyxycloalkyl vòng liên kết vòng (hoặc các nhóm alkyl đa vòng liên kết vòng), chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, octahydro-1H-indenyl và decahydronaphtalenyl.

Thuật ngữ “heteroxycloalkyl” như được sử dụng ở đây, có nghĩa là các nhóm mạch vòng thích hợp, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, các nhóm heteroxycloalkyl  $C_2$ - $C_{12}$ , chẳng hạn như các nhóm heteroxycloalkyl  $C_5$ - $C_7$ , chẳng hạn như các nhóm heteroxycloalkyl  $C_2$ - $C_{10}$ , và có ít nhất một nguyên tử hetero trong vòng tuần hoàn, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, O, S, N, P và sự kết hợp của chúng. Các ví dụ về các nhóm heteroxycloalkyl bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, imidazolyl, tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl và piperidinyl. Thuật ngữ “heteroxycloalkyl” như được sử dụng ở đây, cũng bao

gồm: các nhóm heteroxycloalkyl đa vòng kiểu cầu, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, 7-oxabicyclo[2.2.1]heptanyl; và các nhóm heteroxycloalkyl đa vòng liên kết vòng, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, octahydroxyclopenta[b]pyranyl, và octahydro-1H-isochromenyl.

Thuật ngữ “heteroaryl,” như được sử dụng ở đây, bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi heteroaryl C<sub>3</sub>-C<sub>18</sub>, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, heteroaryl C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub> (bao gồm các nhóm heteroaryl đa vòng liên kết vòng) và có nghĩa là nhóm aryl mà có ít nhất một nguyên tử hereto trong vòng thơm, hoặc trong ít nhất một vòng thơm trong trường hợp của nhóm heteroaryl đa vòng liên kết vòng. Các ví dụ về các nhóm heteroaryl bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, furanyl, pyranyl, pyridinyl, isoquinolin và pyrimidinyl.

Như được sử dụng trong bản mô tả này, thuật ngữ “nhóm aryl-alkyl đa vòng liên kết vòng” và các thuật ngữ tương tự như, nhóm alkyl-aryl đa vòng liên kết vòng, nhóm polyxyclo-aryl-alkyl vòng liên kết vòng và nhóm polyxyclo-alkyl-aryl vòng liên kết vòng có nghĩa là một nhóm đa vòng liên kết vòng mà bao gồm ít nhất một vòng aryl và ít nhất một vòng xycloalkyl mà được liên kết vòng với nhau để tạo thành cấu trúc vòng liên kết vòng. Cho mục đích minh họa không giới hạn, các ví dụ của các nhóm polycyclic-aryl-alkyl vòng liên kết vòng bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi indenyl, 9H-florenyl, xyclopentanaphthenyl và indacenyl.

Thuật ngữ “aralkyl” như được sử dụng ở đây, bao gồm nhưng không bị giới hạn bởi aralkyl C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>, chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi aralkyl C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>, và có nghĩa là nhóm alkyl được thế bằng nhóm aryl. Các ví dụ của nhóm aralkyl bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, benzyl và phenetyl.

Các nhóm alkyl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, metyl, etyl, propyl, isopropyl, butyl, isobutyl, sec-butyl, tert-butyl, pentyl, neopentyl, hexyl, heptyl, octyl, nonyl và dexyl. Các nhóm alkenyl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, vinyl, allyl và propenyl. Các nhóm alkynyl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, etynyl, 1-propynyl, 2-propynyl, 1-butylnyl và 2-butylnyl. Các nhóm xycloalkyl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các phần tử thể xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, và xyclooctyl. Các nhóm heteroxycloalkyl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, imidazolyl, tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl và piperidiny. Các nhóm aryl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, phenyl, naphtyl, antracynyl, phenantrenyl và tetracenyl (bao gồm các chất đồng phân thuộc cấu trúc của chúng). Các nhóm heteroaryl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, furanyl, pyranly, pyridinyl, isoquinolinyl và pyrimidinyl. Các nhóm aralkyl mang tính đại diện bao gồm, nhưng không giới hạn, benzyl và phenetyl.

Thuật ngữ “các dị vòng chứa nito” như được sử dụng ở đây, bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, vòng chứa nito mà ở đó vòng chứa nito được liên kết thông qua vòng nito. Các ví dụ của dị vòng chứa nito bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các amin mạch vòng, chẳng hạn như mocpholin, piperidin, và pyrrolidin; và các dị vòng thơm, chẳng hạn như imidazol, pyrrol, indol và cacbazol.

Như được sử dụng ở đây, “ít nhất một trong số” đồng nghĩa với “một hoặc nhiều trong số”, cho dù các thành phần được liệt kê một cách liên tiếp hoặc không liên tiếp. Ví dụ, mỗi cụm từ “ít nhất một trong số A, B và C” và “ít nhất một trong số A, B hoặc C” có nghĩa là bất kỳ một trong số A, B hoặc C hoặc bất kỳ sự kết

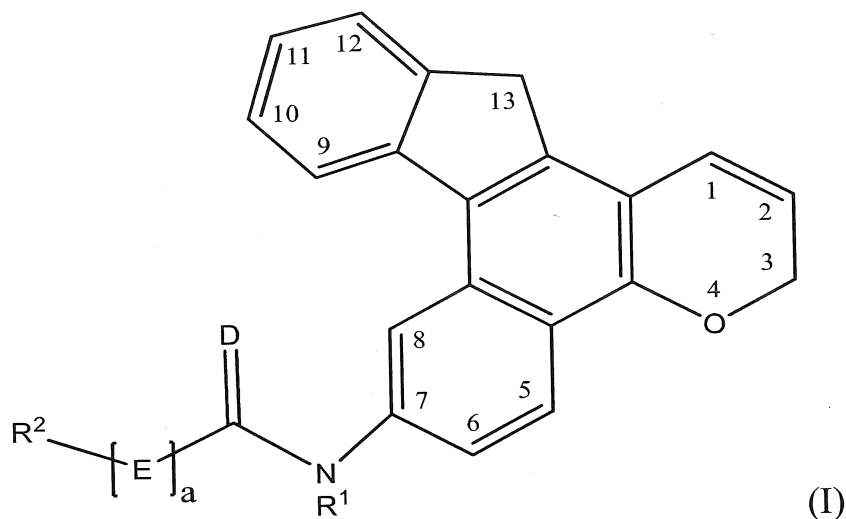
hợp nào của hai hoặc nhiều hơn của A, B hoặc C. Ví dụ, A đơn; hoặc B đơn; hoặc C đơn; hoặc A và B; hoặc A và C; hoặc B và C; hoặc tất cả A, B và C.

Như được sử dụng ở đây, “được chọn từ” hoặc “được lựa chọn từ” đồng nghĩa với “ít nhất một trong số”, cho dù các thành phần được liệt kê một cách liên tiếp hoặc không liên tiếp. Ví dụ, mỗi cụm từ “được chọn từ A, B và C” và “được chọn từ A, B hoặc C” đều có nghĩa là bất kỳ một trong số A, B hoặc C hoặc bất kỳ sự kết hợp nào của bất kỳ hai hoặc nhiều hơn của A, B, hoặc C. Ví dụ, A đơn; hoặc B đơn; hoặc C đơn; hoặc A và B; hoặc A và C; hoặc B và C; hoặc tất cả A, B và C.

Các nội dung đề cập của sáng chế có thể mô tả các đặc điểm nhất định như là “cụ thể” hoặc “tốt hơn” trong một số giới hạn nhất định (ví dụ, “tốt hơn”, “tốt hơn nữa”, hoặc “tốt nhất”, trong một số giới hạn nhất định). Cần phải hiểu rằng sáng chế không bị giới hạn ở các giới hạn cụ thể hoặc tốt hơn này mà bao gồm toàn bộ phạm vi của sự bộc lộ.

Sáng chế chứa, bao gồm, hoặc gồm phần lớn của các khía cạnh sau đây của sáng chế, trong bất kỳ sự kết hợp nào.

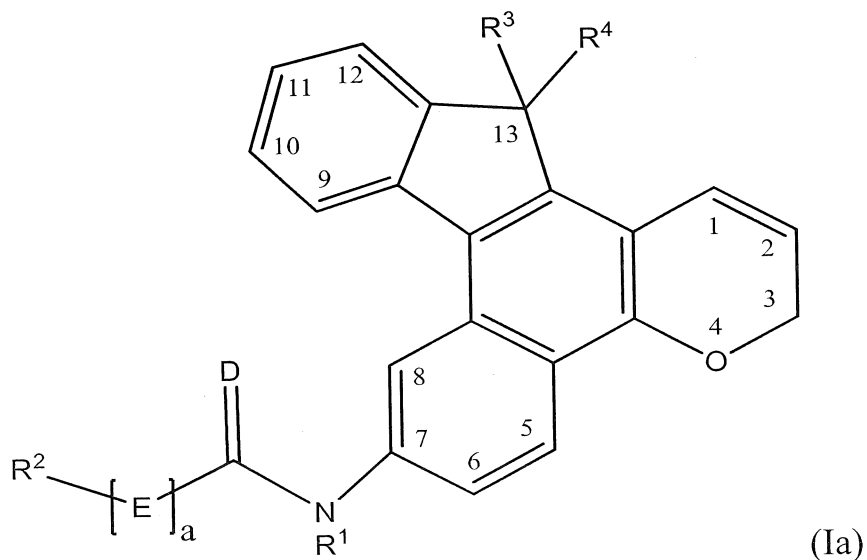
Các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được biểu thị bằng một hoặc nhiều cấu trúc khung lõi mà được mô tả dưới đây. Mỗi vị trí vòng được đánh số sẵn (ví dụ: 1, 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12 và/hoặc 13) của cấu trúc khung lõi của Công thức (I) có thể có liên kết cộng hóa trị với hydro hoặc nhóm khác hydro, ví dụ, chẳng hạn như nhóm được mô tả ở đây. Các ví dụ về các nhóm như vậy được mô tả dưới đây.



Tham chiếu đến Công thức (I), D là oxy hoặc lưu huỳnh; E là oxy, lưu huỳnh, hoặc NR<sup>2'</sup>; a là 0 hoặc 1; R<sup>1</sup> là hydro, hoặc alkyl được thế hoặc không được thế; và mỗi R<sup>2</sup> và R<sup>2'</sup> được chọn một cách độc lập từ hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế, với điều kiện là khi R<sup>2</sup> là aryl được thế hoặc là heteroaryl được thế, phần tử thế không chứa nhóm thiom hoặc nhóm mạch vòng, và với điều kiện là khi E là oxy hoặc lưu huỳnh, R<sup>2</sup> không phải là hydro. Các ví dụ của các nhóm alkyl mà từ đó R<sup>1</sup> có thể được chọn bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, alkyl C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> được thế hoặc không được thế. Ví dụ, R<sup>1</sup> có thể được chọn từ hydro hoặc metyl. Các ví dụ về các nhóm alkyl mà từ đó R<sup>2</sup> và R<sup>2'</sup> có thể được chọn bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi alkyl được thế hoặc không được thế. Ví dụ, R<sup>2</sup> và R<sup>2'</sup> có thể được chọn từ metyl, phenyl, alkoxyphenyl, ví dụ, 4-metoxypheyl và 2-metoxypheyl; haloalkyl phenyl, ví dụ, phenyl được thế bằng perhaloalkyl và 4-triflometyl phenyl; amin phenyl, ví dụ, 4-đimetylamin phenyl; alkyl phenyl, ví dụ, 2-metyl phenyl; hoặc hydroxyphenyl, ví dụ, 2-hydroxyphenyl.

Mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, mỗi phần tử thế aryl, và mỗi phần tử thế heteroaryl ở đây trong mỗi trường hợp có thể được chọn độc lập từ một hoặc nhiều halogen, xyano, nitơ, alkyl, alkenyl, alkynyl, haloalkyl, perhaloalkyl, heteroxycloalkyl, aryl, heteroaryl, alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, anđehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alkoxyasilan, polysiloxan, amit, amin, cacbamat, cacbonat, ure, nhóm polyeste, nhóm polyete, nhóm polycarbonat, nhóm polyuretan, nhóm acrylat, nhóm metacrylat, aryl amino, ví dụ, điphenyl amino; alkyl amin, ví dụ, đimetyl amin; amino mạch vòng, ví dụ, mocpholin, piperidin, hoặc pyrrolidin; các dị vòng thơm, ví dụ, imidazol, pyrrol, indol và cacbazol; hoặc sự kết hợp của chúng; hoặc bất kỳ nhóm nào khác miễn là nó không ảnh hưởng bất lợi đến các đặc tính hoạt động của hợp chất này, ví dụ, các đặc tính hiệu suất quang sắc của hợp chất. Mỗi phần tử thế amin có thể là amin bậc một, bậc hai hoặc bậc ba.

Ngoài ra hoặc theo cách khác, các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được biểu thị bằng cấu trúc khung lõi của Công thức (Ia):



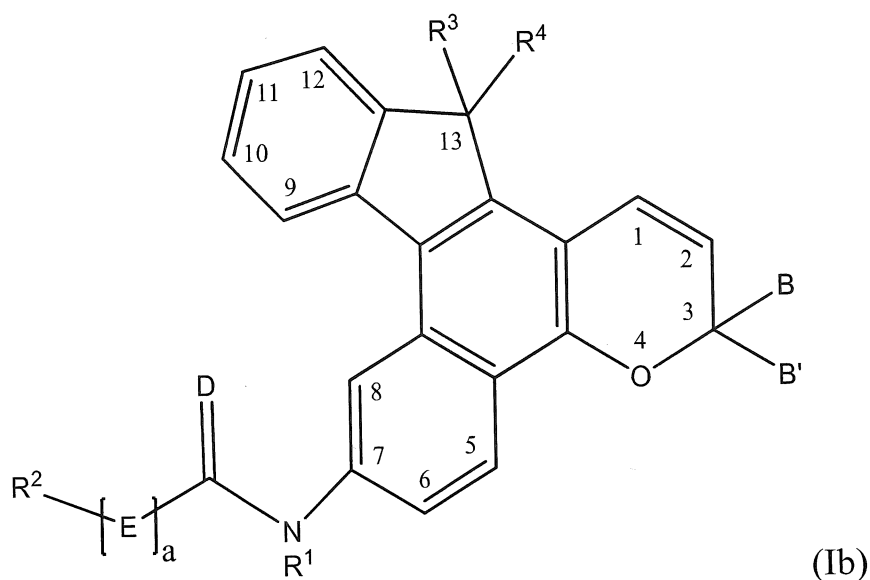
Với sự tham chiếu đến Công thức (Ia), D, E, a,  $R^1$ ,  $R^2$ , và  $R^{2'}$  được mô tả trước đó theo Công thức (I)

Như được mô tả trên đây, các vị trí vòng được đánh số còn lại (ví dụ: 1, 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11 và/hoặc 12) của cấu trúc khung lõi của Công thức (Ia) không có phần tử thế được minh họa cụ thể có thể có liên kết cộng hóa trị với hydro hoặc nhóm khác với hydro, chẳng hạn như nhóm được mô tả ở đây.

Với sự tham chiếu đến Công thức (Ia), mỗi  $R^3$  và  $R^4$  được chọn một cách độc lập từ hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế, aryl được thế hoặc không được thế, hoặc heteroaryl được thế hoặc không được thế; alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alkoxysilan, hoặc polysiloxan; nhóm chứa polyeste, polyete, polycarbonat, polyuretan hoặc sự kết hợp của chúng; hoặc  $R^3$  và  $R^4$  cùng nhau tạo thành vòng béo có 3 đến 20 nguyên tử cacbon cạnh vòng, vòng đa vòng ngưng tụ có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với vòng béo ở trên, dị vòng có 3 đến 20 nguyên tử cạnh vòng, hoặc vòng đa vòng ngưng tụ có vòng thơm hoặc vòng dị vòng thơm ngưng tụ với dị vòng ở trên, cùng với nguyên tử cacbon vị trí số 13 được liên kết với nó. Ví dụ,  $R^3$  và  $R^4$  có thể cùng nhau tạo thành phần tử thế spiro mà được chọn từ vòng spiro-cacboxyclic được thế hoặc không được thế, vòng spiro-dị vòng được thế hoặc không được thế, vòng spiro-cacboxyclic và vòng spiro dị vòng được phân đốt với 0, 1 hoặc 2 vòng aryl, mỗi phần tử thế vòng spiro độc lập là alkyl. Ví dụ,  $R^3$  và  $R^4$  có thể được chọn một cách độc lập từ alkyl được thế hoặc không được thế hoặc heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế. Ví dụ,  $R^3$  và  $R^4$  có thể được chọn từ dimetyl hoặc di-n-propyl.

Với sự tham chiếu đến Công thức (Ia), mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, mỗi phần tử thế aryl, và mỗi phần tử thế heteroaryl có thể được chọn một cách độc lập trong mỗi trường hợp từ một hoặc nhiều phần tử thế được mô tả ở trên.

Ngoài ra hoặc theo cách khác, các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được biểu thị bằng cấu trúc khung lõi của Công thức (Ib):



Với sự tham chiếu đến Công thức (Ib), D, E, a, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, và R<sup>2'</sup>, R<sup>3</sup>, và R<sup>4</sup> như được mô tả trước đó theo Công thức (I) và/hoặc (Ia).

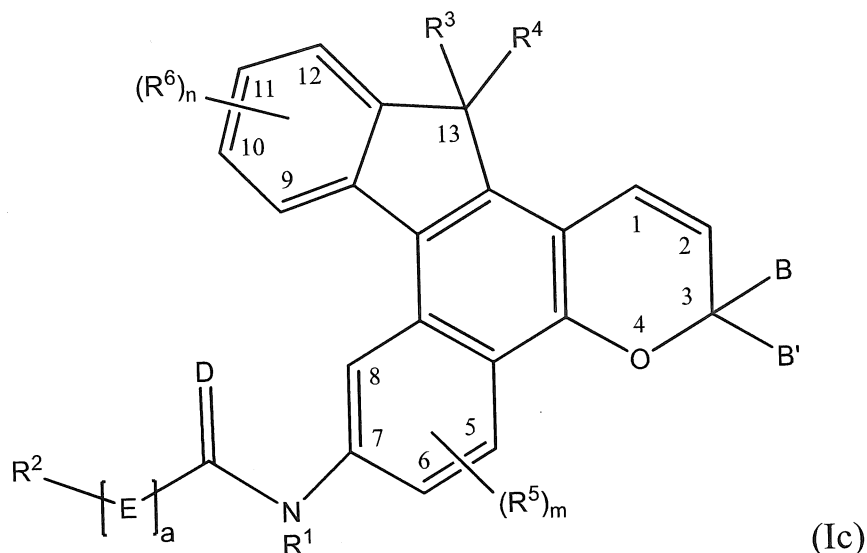
Như đã mô tả ở trên, các vị trí vòng được đánh số còn lại (ví dụ, 1, 2, 5, 6, 8, 9, 10, 11 và/hoặc 12) của cấu trúc khung lõi của Công thức (Ib) mà không có phần tử thế được minh họa cụ thể có thể có liên kết cộng hóa trị với hydro hoặc nhóm khác với hydro, ví dụ, chẳng hạn như nhóm được mô tả ở đây.

Với sự tham chiếu đến Công thức (Ib), mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, alkenyl được thế hoặc không được thế, hoặc alkynyl được thế hoặc không

được thế, hoặc B và B' cùng tạo thành vòng béo có 3 đến 20 nguyên tử cacbon cạnh vòng, vòng đa vòng ngưng tụ có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với vòng béo ở trên, dị vòng mà có 3 đến 20 nguyên tử cạnh vòng, hoặc vòng đa vòng ngưng tụ có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với dị vòng ở trên, cùng với nguyên tử cacbon ở vị trí số 3 được liên kết với nó. Ví dụ, B và B' có thể cùng tạo thành phần tử thể spiro được chọn từ vòng spiro-cacbocyclic được thế hoặc không được thế, vòng spiro-dị vòng được thế hoặc không được thế, vòng spiro-cacbocyclic và vòng spiro-dị vòng được phân đốt với 0, 1 hoặc 2 vòng aryl, mỗi phần tử thể vòng spiro độc lập là alkyl. Ví dụ, mỗi B và B' có thể được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế.

Với sự tham chiếu đến Công thức (Ib), mỗi phần tử thể aryl và mỗi phần tử thể heteroaryl có thể được chọn một cách độc lập từ một hoặc nhiều phần tử thể được mô tả ở trên. Ví dụ, B và B' có thể được chọn một cách độc lập từ phenyl được thế hoặc không được thế, ví dụ, phenyl được thế bằng  $-(OC_2H_4)_3-OH$  và  $-(OC_2H_4)_3-acrylat$ ; alkoxyphenyl, ví dụ, 4-metoxyphenyl và 4-butoxyphenyl; halo phenyl, ví dụ, 4-florophenyl; và mocpholino phenyl, ví dụ, 4-mocpholino phenyl.

Ngoài ra hoặc theo cách khác, các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được biểu thị bằng cấu trúc khung lõi của Công thức (Ic):



Với sự tham chiếu đến Công thức (Ic), D, E, a, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>2'</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, B, và B' như được mô tả trước đó đối với các Công thức (I) và/hoặc (Ia) và/hoặc (Ib).

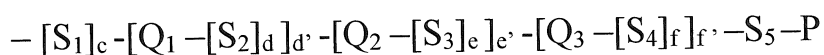
Như được mô tả trên đây, các vị trí vòng được đánh số còn lại (ví dụ, 1 và 2) của cấu trúc khung lõi của Công thức (Ic) mà không có phần tử thế được minh họa cụ thể có thể có liên kết cộng hóa trị với hydro hoặc nhóm khác với hydro, ví dụ, chẳng hạn như nhóm được mô tả ở đây.

Với sự tham chiếu đến Công thức (Ic), m là 0 đến 3, n là 0 đến 4, R<sup>5</sup> độc lập đối với mỗi m, và R<sup>6</sup> độc lập đối với mỗi n, đều được chọn một cách độc lập từ hydroxyl; xyano; (met)acrylat; amino; nhóm L<sup>1</sup> kéo dài; halogen được chọn từ flo, clo, brom, hoặc iot; alkyl được thế hoặc không được thế; alkenyl được thế hoặc không được thế; alkynyl được thế hoặc không được thế; haloalkyl; perhaloalkyl; este boronic hoặc axit boronic; polyete, polyeste, polycarbonat, hoặc polyuretan; aryl được thế hoặc không được thế; heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế; heteroaryl được thế hoặc không được thế; dị vòng chứa nitơ; hoặc alkoxy được thế hoặc không được thế, alkylthio được thế hoặc không được thế, aryloxy được thế hoặc không được thế, arylthio được thế hoặc không được thế, xeton,

andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, amit, ure, siloxan, alkoxy silan, polysiloxan, cacbonat, hoặc cacbamat. Ví dụ,  $R^5$  độc lập đối với mỗi m và  $R^6$  độc lập đối với mỗi n, có thể được chọn một cách độc lập từ halogen, alkoxy, perhaloalkyl, aryl được thế hoặc không được thế; aryl amino, ví dụ, điphenyl amino; alkyl amino, ví dụ, dimetyl amino; amino mạch vòng, ví dụ, morpholino, piperidino, hoặc pyrrolidino; các dị vòng thơm; ví dụ, imidazol, pyrrol, indol, hoặc cacbazol. Ví dụ, alkoxy có thể là alkoxy  $C_1$ - $C_6$ . Ví dụ, haloalkyl có thể là haloalkyl  $C_1$ - $C_{20}$ . Ví dụ, perhaloalkyl có thể là perhaloalkyl  $C_1$ - $C_{20}$ .

Với sự tham chiếu đến Công thức (Ic), mỗi nhóm  $L^1$  kéo dài có thể được biểu thị một cách độc lập bằng Công thức (2) sau đây,

Công thức (2)



trong đó:

(a)  $Q_1$ ,  $Q_2$ , và  $Q_3$  cho mỗi lần xuất hiện, là nhóm hóa trị hai được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có aryl không được thế, aryl được thế, heteroaryl không được thế, heteroaryl được thế, xycloalkyl không được thế, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl không được thế, hoặc heteroxycloalkyl được thế;

trong đó các phần tử thế aryl, các phần tử thế heteroaryl, các phần tử thế xycloalkyl, và các phần tử thế heteroxycloalkyl được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có P, các mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly( $C_1$ - $C_{18}$  alkoxy),  $C_1$ - $C_{18}$  alkoxyacarbonyl,  $C_1$ - $C_{18}$  alkylacarbonyl,  $C_1$ - $C_{18}$  alkoxyacarbonyloxy, aryloxyacarbonyloxy, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkoxy, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkoxyacarbonyl, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylacarbonyl, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylamino, di-(perfloro( $C_1$ -

$C_{18}$ alkyl)amino, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylthio,  $C_1$ - $C_{18}$  alkylthio,  $C_3$ - $C_{10}$  xycloalkoxy, hoặc alkyl;

(b) c, d, e và f được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; và mỗi  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ , và  $S_5$  được chọn một cách độc lập đối với mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm được chọn từ nhóm gồm có:

(i) alkylen, alkylen được thế, haloalkylen, haloalkylen được thế,  $-\text{Si}(\text{CH}_2)_g-$ , và  $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$ , trong đó g cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; h cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 16; và các phần tử thế của alkylen và haloalkylen được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có alkyl hoặc aryl;

(ii)  $-\text{N}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{N}-$ ,  $-\text{C}(\text{Z}')_2-\text{C}(\text{Z}')_2-$ ,  $-\text{N}(\text{Z})-\text{C}(\text{Z})_2-$ , và liên kết đơn, trong đó Z cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có hydro, alkyl hoặc aryl, và  $\text{Z}'$  cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có alkyl hoặc aryl; hoặc

(iii)  $-\text{O}-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-$ ,  $-\text{C}\equiv\text{C}-$ ,  $-\text{N}=\text{N}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{S}(=\text{O})-$ ,  $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})-$ ,

$-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O}-$ ,  $-\text{O}(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O}-$  và nhóm alkylen  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{24}$  mạch thẳng hoặc phân nhánh, nhóm alkylen  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{24}$  không được thế, được thế một lần bằng xiano hoặc halogen, hoặc được thế nhiều lần bằng halogen,

với điều kiện là khi hai đơn vị đệm chứa các dị nguyên tử được liên kết với nhau thì các đơn vị đệm này được liên kết sao cho các dị nguyên tử không được liên kết trực tiếp với nhau;

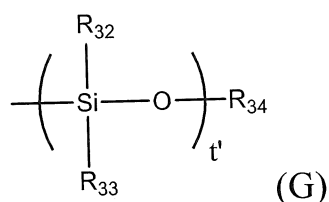
(c) P là hydro; và

(d)  $d'$ ,  $e'$  và  $f'$  được chọn một cách độc lập từ 0, 1, 2, 3 và 4, với điều kiện tổng của  $d' + e' + f'$  ít nhất là 1.

Ví dụ, R<sup>6</sup> có thể là nhóm L<sup>1</sup> kéo dài tại vị trí số 10.

Với sự tham chiếu thêm đến Công thức (Ic), mỗi phần tử thể alkyl, mỗi phần tử thể aryl, mỗi phần tử thể heteroxycloalkyl, và mỗi phần tử thể heteroaryl, trong mỗi trường hợp có thể được chọn một cách độc lập từ một hoặc nhiều phần tử thể được mô tả ở trên. Hơn nữa, R<sup>5</sup> có thể là một nhóm halo ở vị trí số 5, ví dụ, nhóm flo; hoặc R<sup>5</sup> có thể là nhóm alkoxy ở vị trí số 6, ví dụ, metoxy. Hơn nữa, R<sup>6</sup> có thể là nhóm di-triflorometyl ở các vị trí số 10 và/hoặc 12; hoặc R<sup>6</sup> có thể là triflorometyl, phenyl, metoxy, hoặc alkylthio ở vị trí số 11.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “polysiloxan” chẳng hạn như đối với các phần tử thể của các nhóm khác nhau của hợp chất quang sắc theo sáng chế, bao gồm vật liệu được biểu thị bằng Công thức (G) sau:



Với sự tham chiếu đến Công thức (G), chỉ số dưới t' là từ 2 đến 200, chẳng hạn như từ 2 đến 100, hoặc 2 đến 50, hoặc từ 2 đến 25, hoặc từ 2 đến 15, hoặc từ 2 đến 10, hoặc từ 2 đến 5, trong mỗi trường hợp bao gồm các giá trị được thuật lại. Với sự tham chiếu thêm đến Công thức (G): R<sub>32</sub> và R<sub>33</sub> đối với mỗi t', được chọn một cách độc lập từ alkyl hoặc aryl; và R<sub>34</sub> được chọn từ hydro, alkyl hoặc aryl. Theo một số phương án: R<sub>32</sub> và R<sub>33</sub> đối với mỗi t', được chọn một cách độc lập từ metyl, etyl, hoặc phenyl; và R<sub>34</sub> được chọn từ hydro, metyl, etyl, hoặc phenyl.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “polysiloxan” chẳng hạn như liên quan đến các phần tử thể của các nhóm khác nhau của các hợp chất quang sắc theo sáng

$$\text{---Si---} \left( \text{O---Si---} \left( \text{O---Si---R}_{37} \right) \right)_{w'} \text{---} \left( \text{R}_{35} \right)_{u'} \left( \text{R}_{36} \right)_{v'} \text{---} \right)_{x'} \text{(H)}$$

26

Các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được sử dụng kết hợp với hỗn hợp của các hợp chất quang sắc khác. Ví dụ, mặc dù không giới hạn ở đây, hỗn hợp của các hợp chất quang sắc có thể được sử dụng để đạt được các màu được hoạt hóa nhất định, chẳng hạn như màu xám gần trung tính hoặc màu nâu gần trung tính. Tham khảo, ví dụ, Patent Hoa Kỳ số 5645767, cột 12, dòng 66 đến cột 13, dòng 19, trong đó mô tả các thông số mà xác định các màu xám và màu nâu trung tính.

Các ví dụ về các nhóm hợp chất quang sắc khác mà có thể được sử dụng kết hợp với các hợp chất quang sắc theo sáng chế, bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các naphtopyran ngưng tụ vòng indeno, các naphto[1,2-b]pyran, các naphto[2,1-b]pyran, các spirofloroeno[1,2-b]pyran, các phenantrenopyran, các quinolinopyran, các floroanthenopyran, các spiropyran, các benzoxazin, các naphtoxazin, các spiro(indolin)naphtoxazin, các spiro(indolin)pyridobenzoxazin, các spiro(indolin)floranthnoxazin, các spiro(indolin)quinoxazin, các fulgide, các fulgimide, các diaryleten, các diarylalkyleten, diarylalkenylethenes, các hợp chất quang sắc thuận nghịch nhiệt, và các hợp chất quang sắc thuận nghịch không nhiệt, và hỗn hợp của chúng. Các ví dụ khác về các hợp chất quang sắc khác mà có thể được sử dụng kết hợp với các hợp chất quang sắc theo sáng chế bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các hợp chất được bộc lộ tại cột 34, dòng 20 đến cột 35, dòng 13 của US 9028728 B2.

Các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được sản xuất theo các phương pháp kỹ thuật đã được công nhận. Nhằm mục đích minh họa không giới hạn và với sự tham chiếu đến các Fig. 1 và 2, các sơ đồ tổng hợp chung, các Sơ đồ 1 và 2, để sản xuất các hợp chất quang sắc theo sáng chế được mô tả như sau. Phần mô tả chi tiết hơn về việc sản xuất các hợp chất quang sắc theo sáng chế được đề xuất

thêm ở đây trong các Ví dụ. Trong các Fig. 1 và 2, các nhóm khác nhau, chẳng hạn như D, E, a,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^{2'}$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ , B, và B', và các chỉ số dưới liên quan, chẳng hạn như m và n, của các chất trung gian, các chất phản ứng và/hoặc hợp chất khác nhau được thuật lại, mỗi chất được mô tả trước đó ở đây, và/hoặc biểu thị các tiền chất của các nhóm như vậy.

Fig. 1 minh họa phản ứng ghép chéo được xúc tác với nhiều nguồn paladi khác nhau và sự kết hợp phối tử để chuyển hóa các aryl halogenua, các triflat, hoặc các tosylat thành nhóm amit. Ví dụ, xem công bố Ikawa, et al. J. Am. Chem. Soc., 2007, 129, 13007.

Fig. 2 minh họa rằng nhóm aryl-NH<sub>2</sub> có thể được tạo ra bằng việc chuyển hóa nhóm aryl-bromit thành nhóm (bis)trimetylsilyl amin bằng cách sử dụng các điều kiện ghép chéo paladi theo sau bước thủy phân thành nhóm amino với axit. Ví dụ, xem công bố Lee, et al., Org. Lett., 2001, 3, 2729.

Việc chuyển hóa từ nhóm aryl-NH<sub>2</sub> thành cacbamat (Bước A) có thể được thực hiện bằng việc cho aryl-NH<sub>2</sub> phản ứng với dialkyl cacbonat. Ví dụ, xem Tundo, et al. J. Org. Chem., 2005, 70, 2219.

Việc chuyển hóa nhóm aryl-NH<sub>2</sub> thành nhóm aryl-ure (Bước B) có thể được thực hiện bằng phản ứng của aryl-NH<sub>2</sub> với nhóm isoxyanat được thế. Phản ứng này có thể được xúc tác bởi chất xúc tác uretan thông thường, chẳng hạn như dibutyltin dilaurat hoặc các trialkyl amin.

Theo sáng chế, cũng có thể tạo ra các hợp chất quang sắc, mà bao gồm ít nhất một hợp chất quang sắc theo sáng chế, chẳng hạn như các hợp chất được biểu thị bằng Công thức (I), (Ia), (Ib), hoặc (Ic), như được mô tả trước đó ở đây.

Thành phần quang sắc có thể bao gồm: (i) vật liệu hữu cơ, trong đó vật liệu hữu cơ ít nhất là một trong các vật liệu polyme, vật liệu oligome hoặc vật liệu monome; và (ii) hợp chất quang sắc theo sáng chế, mà được đưa vào ít nhất một phần của vật liệu hữu cơ. Hợp chất quang sắc này có thể được kết hợp vào một phần của vật liệu hữu cơ bằng các phương pháp bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, ít nhất một trong số việc trộn hoặc liên kết hợp chất quang sắc với vật liệu hữu cơ hoặc tiền chất của vật liệu hữu cơ. Như được sử dụng ở đây liên quan đến việc kết hợp các hợp chất quang sắc vào vật liệu hữu cơ, các thuật ngữ “pha trộn” và “được pha trộn” có nghĩa là hợp chất/vật liệu quang sắc được trộn lẫn hoặc hòa lẫn với ít nhất một phần của vật liệu hữu cơ, nhưng không liên kết với vật liệu hữu cơ. Ngoài ra, như được sử dụng ở đây liên quan đến việc kết hợp các hợp chất quang sắc vào vật liệu hữu cơ, các thuật ngữ “liên kết” hoặc “được liên kết” có nghĩa là hợp chất/vật liệu quang sắc được liên kết, chẳng hạn như bằng một hoặc nhiều liên kết cộng hóa trị, với một phần của vật liệu hữu cơ hoặc tiền chất của chúng. Ví dụ, mặc dù không giới hạn ở đây, vật liệu quang sắc có thể được liên kết với vật liệu hữu cơ thông qua phân tử thể phản ứng.

Khi vật liệu hữu cơ là vật liệu polyme, hợp chất quang sắc này có thể được kết hợp vào ít nhất một phần của vật liệu polyme hoặc ít nhất một phần của vật liệu monome hoặc vật liệu oligome mà từ đó vật liệu polyme được tạo thành. Ví dụ, (các) hợp chất quang sắc theo sáng chế mà có phân tử thể phản ứng có thể được liên kết với vật liệu hữu cơ như monome, oligome hoặc polyme có nhóm với một nửa phản ứng có thể được phản ứng, hoặc một nửa phản ứng có thể được phản ứng như đồng monome trong phản ứng trùng hợp mà từ đó vật liệu hữu cơ được tạo thành, ví dụ, trong quá trình đồng trùng hợp.

Như được đề cập trên đây, các chế phẩm quang sắc theo sáng chế có thể bao gồm vật liệu hữu cơ được chọn từ vật liệu polyme, vật liệu oligome và/hoặc vật liệu monome, theo một số phương án. Các ví dụ về vật liệu polyme mà có thể được sử dụng với các chế phẩm quang sắc theo sáng chế bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi: poly(cacbonat), các copolyme của etylen và vinyl axetat; các copolyme của etylen và vinyl alcohol; các copolyme của etylen, vinyl axetat, và vinyl alcohol (chẳng hạn như các chất mà là kết quả sự xà phòng hóa một phần các copolyme của etylen và vinyl axetat); xenluloza axetat butyrat; poly(uretan); poly(acrylat); poly(metacrylat); các epoxy; các polyme chức aminoplast; poly(anhydrit); poly(urea uretan); các polyme N-alkoxymetyl(met)acrylamit; poly(siloxan); poly(silan); và sự kết hợp và các hỗn hợp của chúng. Các nhóm và ví dụ khác về các vật liệu polyme có thể được sử dụng với các chế phẩm quang sắc theo sáng chế bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các chất được bộc lộ tại cột 39, dòng 45 đến cột 40, dòng 67 của US 9028728 B2.

Chế phẩm quang sắc theo sáng chế có thể bao gồm ít nhất một trong số, vật liệu quang sắc bổ sung (bao gồm một hoặc nhiều trong số các vật liệu và hợp chất quang sắc khác được mô tả trước ở đây), chất khơi mào quang, chất khơi mào nhiệt, chất ức chế trùng hợp, dung môi, chất ổn định ánh sáng, chất ổn định nhiệt, chất trợ tháo khuôn, chất kiểm soát lưu biến, chất làm đều màu, chất loại bỏ gốc tự do, và/hoặc chất tăng cường kết dính.

Chế phẩm quang sắc theo sáng chế có thể là chế phẩm lớp phủ quang sắc. Các chế phẩm lớp phủ quang sắc theo sáng chế có thể bao gồm: hợp chất quang sắc theo sáng chế, như được mô tả trước đó ở đây liên quan đến Công thức (I), (Ia), (Ib), hoặc (Ic); chế phẩm nhựa mà có thể lưu hóa một cách tùy ý; và dung môi tùy chọn. Chế phẩm lớp phủ quang sắc có thể ở dạng lớp phủ lỏng và lớp phủ

bột mà được công nhận trong kỹ thuật. Các chế phẩm lớp phủ quang sắc theo sáng chế có thể là các chế phẩm phủ nhựa nhiệt dẻo hoặc nhiệt rắn. Chế phẩm lớp phủ quang sắc có thể là chế phẩm lớp phủ có thể lưu hóa được hoặc rắn nhiệt.

Chế phẩm nhựa có thể lưu hóa của các chế phẩm phủ quang sắc có thể lưu hóa theo sáng chế có thể bao gồm: chất phản ứng thứ nhất (hoặc thành phần) mà có các nhóm chức, ví dụ, chất phản ứng polyme chức epoxit; và chất phản ứng thứ hai (hoặc thành phần) mà là chất liên kết chéo có các nhóm chức có khả năng phản ứng gần và có thể tạo các liên kết cộng hóa trị với các nhóm chức của chất phản ứng thứ nhất. Mỗi chất phản ứng thứ nhất và thứ hai của chế phẩm nhựa có thể lưu hóa của chế phẩm phủ quang sắc có thể lưu hóa, có thể chứa một cách độc lập một hoặc nhiều loại chức, và mỗi chất phản ứng thứ nhất và thứ hai hiện hữu với lượng đủ để tạo ra các lớp phủ quang sắc đã lưu hóa mà có sự kết hợp mong muốn của các đặc tính vật lý, ví dụ, độ mịn, độ trong quang học, độ bền dung môi, và độ cứng.

Ví dụ về các chế phẩm nhựa có thể lưu hóa mà có thể được sử dụng với chế phẩm phủ quang sắc có thể lưu hóa theo sáng chế bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi: các chế phẩm nhựa có thể lưu hóa bao gồm polyme chức epoxit (ví dụ, các polyme (met)acrylic chứa dư lượng glycidyl (met)acrylat) và chất liên kết chéo phản ứng với epoxit (ví dụ, chứa các hydro hoạt tính, chẳng hạn như các hydroxyl, các thiol và các amin); và các chế phẩm nhựa có thể lưu hóa chứa polyme chức hydro hoạt tính (ví dụ, hydroxyl, thiol, và/hoặc polyme chức amin) và chất liên kết chéo chức isoxyanat bị chặn (hoặc bị khóa). Bởi “chất liên kết chéo chức isoxyanat bị chặn (hoặc bị khóa)” có nghĩa là chất liên kết chéo có hai hoặc nhiều nhóm isoxyanat bị chặn mà có thể bỏ chặn (hoặc bỏ khóa) trong các điều kiện lưu hóa (ví dụ, ở nhiệt độ cao) để tạo thành các nhóm isoxyanat tự do

và các nhóm không bị chặn. Các nhóm isoxyanat tự do được tạo thành bằng việc bỏ chặn của chất liên kết chéo tốt hơn là có khả năng phản ứng và tạo thành các liên kết cộng hóa trị về cơ bản là vĩnh viễn với các nhóm hydro hoạt tính của polyme chức hydro hoạt tính (ví dụ, với các nhóm hydroxy của polyme chức hydroxy). Các ví dụ khác về chế phẩm nhựa có thể lưu hóa mà có thể được sử dụng với chế phẩm phủ quang sắc có thể lưu hóa theo sáng chế bao gồm, nhưng không bị giới hạn bởi, các chế phẩm được bộc lộ trong: các đoạn [0176] đến [0190] của WO 2016/142496 A1; và các đoạn [0005], [0037] đến [0051], [0056] đến [0059] và [0063] đến [0065] của WO 2017/030545 A1.

Các chế phẩm phủ quang sắc có thể lưu hóa theo sáng chế, một cách tùy chọn, có thể chứa các chất phụ gia như sáp cho dòng chảy và việc làm ẩm, các chất kiểm soát dòng chảy, ví dụ, poly(2-ethylhexyl) acrylat, nhựa hỗ trợ để điều chỉnh và tối ưu hóa các đặc tính lớp phủ, các chất chống oxy hóa và các chất hấp thụ tia cực tím (UV). Ví dụ của các chất chống oxy hóa và các chất hấp thụ ánh sáng UV hữu ích bao gồm các chất có sẵn trên thị trường từ BASF dưới các nhãn hiệu IRGANOX và TINUVIN. Các chất phụ gia tùy chọn này, khi được sử dụng, thường có hàm lượng lên đến 20 phần trăm theo trọng lượng (ví dụ, từ 0,5 đến 10 phần trăm trọng lượng), dựa trên tổng trọng lượng của các chất rắn nhựa của chế phẩm nhựa có thể lưu hóa.

Các chế phẩm quang sắc, các vật phẩm quang sắc và các chế phẩm phủ quang sắc theo sáng chế có thể chứa thêm các chất phụ gia được công nhận trong lĩnh vực kỹ thuật để phụ trợ hoặc hỗ trợ quá trình xử lý và/hoặc hiệu suất của các chế phẩm hoặc sản phẩm này. Ví dụ không giới hạn về các chất phụ gia như vậy bao gồm các chất khơi mào quang, các chất khơi mào nhiệt, các chất ức chế trùng hợp, các dung môi, các chất ổn định ánh sáng (chẳng hạn như, nhưng không bị giới

hạn bởi, các chất hấp thụ tia cực tím và các chất ổn định ánh sáng, chẳng hạn như chất ổn định ánh sáng amin ngăn cản chất lỏng (HALS)), các chất ổn định nhiệt, các chất trợ tháo khuôn, các chất kiểm soát lưu biến, chất làm đều màu (chẳng hạn như, nhưng không bị giới hạn bởi, chất hoạt động bề mặt), chất loại bỏ gốc tự do, chất tăng cường kết dính (như hexandiol diacrylat và các chất ghép cặp), và sự kết hợp và các hỗn hợp của chúng.

Các hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được sử dụng với lượng (hoặc tỷ lệ) sao cho các chế phẩm, vật liệu hoặc lớp nền hữu cơ (ví dụ, các vật phẩm quang sắc và các lớp phủ quang sắc) mà trong đó các hợp chất quang sắc được kết hợp hoặc được liên kết bằng cách khác biểu hiện các đặc tính quang học mong muốn. Lượng và các loại vật liệu quang sắc có thể được chọn sao cho chế phẩm, vật liệu hoặc lớp nền hữu cơ là trong hoặc không màu khi hợp chất quang sắc ở dạng đóng (ví dụ, ở trạng thái được khử màu hoặc bất hoạt), và có thể thể hiện màu sắc kết quả được mong muốn khi hợp chất quang sắc (chẳng hạn như naphthopyran quang sắc liên kết vòng vòng ideno theo sáng chế) ở dạng mở (ví dụ, khi được hoạt hóa bằng bức xạ quang hóa). Lượng chính xác của vật liệu quang sắc mà được sử dụng trong các chế phẩm và vật phẩm quang sắc khác nhau mà được mô tả ở đây là không quan trọng với điều kiện là lượng đủ được sử dụng để tạo ra hiệu quả mong muốn. Lượng cụ thể của vật liệu quang sắc mà được sử dụng có thể phụ thuộc vào nhiều yếu tố, chẳng hạn như nhưng không bị giới hạn bởi, đặc tính hấp thụ của hợp chất quang sắc, màu sắc và mật độ của màu sắc mong muốn khi hoạt hóa, và phương pháp được sử dụng để kết hợp hoặc liên kết vật liệu quang sắc với lớp nền. Các chế phẩm quang sắc theo sáng chế có thể bao gồm hợp chất quang sắc theo sáng chế, mà chứa các hợp chất được biểu thị bằng Công thức (I), (Ia), (Ib), hoặc (Ic) trong lượng từ 0,01 đến 40 phần trăm trọng lượng,

chẳng hạn như từ 0,05 đến 15 phần trăm trọng lượng, chẳng hạn như từ 0,1 đến 5 phần trăm trọng lượng, dựa trên trọng lượng của chế phẩm quang sắc. Nhằm cho mục đích minh họa không giới hạn, lượng hợp chất/vật liệu quang sắc chứa các hợp chất được biểu thị bằng Công thức (I), (Ia), (Ib) hoặc (Ic) mà được kết hợp vào vật liệu hữu cơ có thể nằm trong biên độ 0,01 đến 40 phần trăm trọng lượng, chẳng hạn như từ 0,05 đến 15 phần trăm trọng lượng, chẳng hạn như từ 0,1 đến 5 phần trăm trọng lượng, dựa trên trọng lượng của vật liệu hữu cơ.

Sáng chế cũng đề cập đến các vật phẩm quang sắc mà gồm một hoặc nhiều hợp chất quang sắc theo sáng chế, chẳng hạn như được biểu thị bằng Công thức (I), (Ia), (Ib) hoặc (Ic). Các vật phẩm quang sắc có thể được sản xuất bằng các phương pháp được công nhận trong kỹ thuật, chẳng hạn như bằng phương pháp hấp thụ, phương pháp đúc tại chỗ, phương pháp phủ, phương pháp phủ khuôn, phương pháp đúc tràn, và phương pháp cán mỏng.

Ví dụ, các vật phẩm quang sắc có thể được chọn từ các vật phẩm nhãn khoa, các vật phẩm hiển thị, cửa sổ, gương kính, các vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng chủ động, và các vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng thụ động.

Ví dụ, các vật phẩm quang sắc theo sáng chế có thể là các vật phẩm nhãn khoa, và các vật phẩm nhãn khoa này có thể được chọn từ các thấu kính điều chỉnh, các thấu kính không điều chỉnh, kính áp tròng, kính nội nhãn, kính lúp, kính bảo vệ và kính che mắt.

Ví dụ, các vật phẩm quang sắc theo sáng chế này có thể là các vật phẩm hiển thị và các vật phẩm hiển thị này có thể được chọn từ các màn hình, màn hiển thị và các chi tiết an ninh.

Sáng chế được mô tả cụ thể hơn theo các ví dụ sau đây, mà chỉ nhằm mục đích minh họa, do nhiều sự sửa đổi và các biến thể trong đó sẽ xuất hiện đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật.

### **Ví dụ thực hiện sáng chế**

Các ví dụ sau đây được đưa ra để minh họa các hợp chất quang sắc theo sáng chế, cụ thể là sự cải thiện trong sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các hợp chất quang sắc theo sáng chế. Phần 1 cung cấp các mô tả về sự tổng hợp các hợp chất quang sắc theo sáng chế. Phần 2 cung cấp sự đánh giá về hiệu suất quang sắc của các hợp chất quang sắc theo sáng chế so với các hợp chất quang sắc so sánh.

#### **Phần 1: Sự tổng hợp các hợp chất quang sắc**

##### **Ví dụ 1**

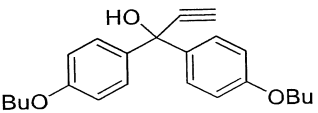
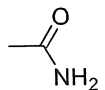
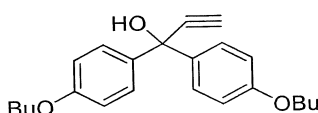
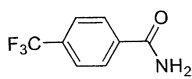
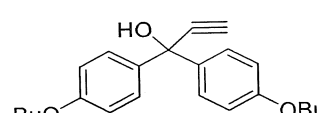
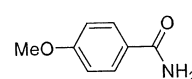
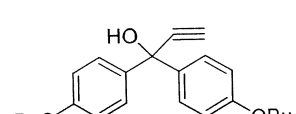
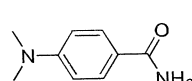
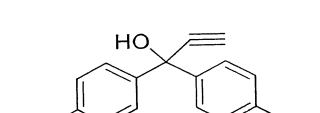
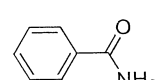
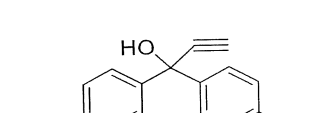
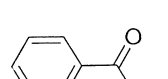
##### **Bước 1**

2-Bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol (5 g) được thêm vào bình thót cổ đáy tròn chứa 100 mL  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  với việc khuấy, sau đó thêm vào axit p-toluensulfonic (0,2 g). Dung dịch 1,1-bis(4-butoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol (4,1 g trong 25 ml  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) được thêm một cách từ từ vào hỗn hợp phản ứng và gia nhiệt đến hồi lưu. Sau ba giờ, 1,1-bis(4-butoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol (0,5 g trong 10 ml  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) bổ sung được thêm vào. Sau một giờ bổ sung ở sự hồi lưu, dung dịch này được làm mát đến nhiệt độ phòng, và được đưa qua silica plug bằng việc sử dụng  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  làm dung môi rửa giải hấp, sau đó được cô đặc trong chân không. Chất kết tinh từ etyl axetat/hexan/metanol cho hiệu suất 81% của 7-bromo-3,3-bis(4-butoxyphenyl)-11-phenyl-13,13-dipropyl-3,13-dihydrobenzo[h]indeno[2,1-f] crome, như được xác nhận bằng  $^1\text{H}$  NMR.

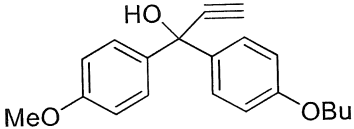
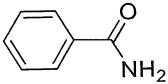
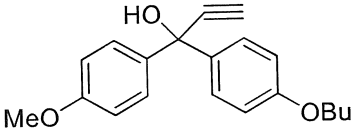
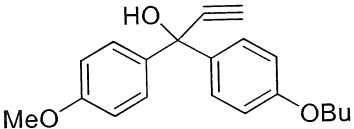
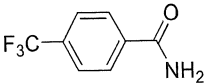
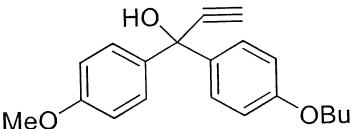
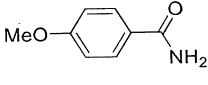
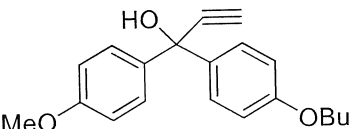
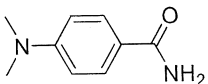
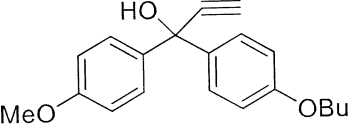
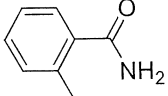
##### **Bước 2**

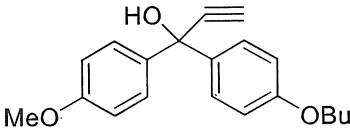
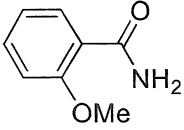
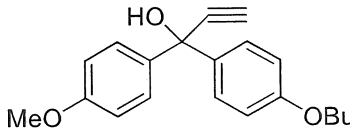
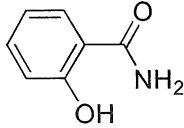
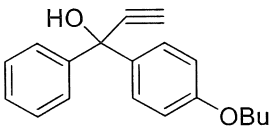
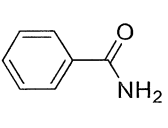
Sản phẩm của bước 1 ở trên (3 g) và benzamit (0,68 g) được thêm dưới môi trường không khí  $N_2$  vào bình thót hai cổ đáy tròn chứa 100 mL toluen và etanol (tỷ lệ thể tích 9:1). Cho  $CS_2CO_3$  (4,8 g) và 4,5-Bis(điphenylphosphino)-9,9-dimetylxanthen(Xantphos) (0,54 g) vào hỗn hợp này cùng với việc khuấy. Dung dịch này được phun với nitơ trong 10 phút. Tris(đibenzylideneaxeton)dipaladi(0) (0,35 g) được thêm vào và hỗn hợp được gia nhiệt đến hồi lưu. Sau hai giờ hồi lưu, hỗn hợp phản ứng này được làm mát đến nhiệt độ phòng sau đó được thêm nước đá lạnh vào. Độ pH được điều chỉnh để  $pH < 7$  bằng việc sử dụng HCl đậm đặc, sau đó chiết suất bằng etyl axetat (EtOAc). Lớp hữu cơ này được cô đặc, được hòa tan trong 50 mL  $CH_2Cl_2$  và được làm khô bằng  $MgSO_4$  khan. Dung dịch này được đưa qua silica plug ngăn bằng việc sử dụng EtOAc/Hexan (1:2) làm dung môi rửa giải hấp. Phần mong muốn đã thu được, được cô đặc và được kết tủa từ metanol để tạo ra sản phẩm có cấu trúc được minh họa trong Bảng 3.

Các thuốc tạo màu quang sắc bổ sung được sản xuất theo quy trình đối với Ví dụ 1. Đối với mỗi ví dụ, benzo[c]florene-5-ol được thế một cách thích hợp đã được sử dụng thay thế 22-bromo-9-phenyl-7,7-đipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol trong Bước 1, như được chỉ ra trong Bảng 1 để tạo ra mẫu thế mong muốn trong sản phẩm cuối cùng. Ngoài ra, 1,1-bis(4-butoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol trong Bước 1 đã được thay thế bằng lượng đẳng mol của 1,1-prop-2-yn-1-ol được thế (“propargyl alcohol”) mà được chỉ ra trong cột “Bước 1” theo Bảng 2. Ngoài ra, benzamit của Ví dụ 1, Bước 2, đã được thế bằng lượng đẳng mol của amit mà được chỉ ra trong cột “Amit” theo Bảng 1.

| Bảng 1. Các thành phần phản ứng đối với các Ví dụ 2-23 |                                                       |                                                                                      |                                                                                       |
|--------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| Số                                                     | benzo[c]florene-5-ol được thế                         | Propargyl alcohol                                                                    | Amit                                                                                  |
| Ví dụ 2                                                | 2-bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol |    |    |
| Ví dụ 3                                                | 2-bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol |    |    |
| Ví dụ 4                                                | 2-bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol |   |  |
| Ví dụ 5                                                | 2-bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol |  |  |
| Ví dụ 6                                                | 2-bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol |  |  |
| Ví dụ 7                                                | 2-bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol |  |  |

|             |                                                                             |  |  |
|-------------|-----------------------------------------------------------------------------|--|--|
| Ví dụ<br>8  | 2-bromo-9-phenyl-7,7-<br>dipropyl-7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol           |  |  |
| Ví dụ<br>9  | 2-bromo-7,7-<br>dimethyl-9-<br>phenyl-7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol       |  |  |
| Ví dụ<br>10 | 2-bromo-7,7-<br>dipropyl-7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol                    |  |  |
| Ví dụ<br>11 | 2-bromo-7,7-<br>dipropyl-7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol                    |  |  |
| Ví dụ<br>12 | 2-bromo-9-<br>methoxy-7,7-<br>dipropyl-7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol      |  |  |
| Ví dụ<br>13 | 2-bromo-9-<br>methoxy-7,7-<br>dimethyl-7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol      |  |  |
| Ví dụ<br>14 | 2-bromo-9-<br>(methylthio)-7,7-<br>dipropyl-7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol |  |  |

|             |                                                                                   |                                                                                      |                                                                                       |
|-------------|-----------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| Ví dụ<br>15 | 2-bromo-7,7-<br>đimetyl-9-<br>(triflorometyl)-<br>7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol |    |    |
| Ví dụ<br>16 | 2-bromo-7,7-<br>đimetyl-9-<br>(triflorometyl)-<br>7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol |    |    |
| Ví dụ<br>17 | 2-bromo-7,7-<br>đimetyl-9-<br>(triflorometyl)-<br>7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol |   |   |
| Ví dụ<br>18 | 2-bromo-7,7-<br>đimetyl-9-<br>(triflorometyl)-<br>7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol |  |  |
| Ví dụ<br>19 | 2-bromo-7,7-<br>đimetyl-9-<br>(triflorometyl)-<br>7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol |  |  |
| Ví dụ<br>20 | 2-bromo-7,7-<br>đimetyl-9-<br>(triflorometyl)-<br>7H-<br>benzo[c]florene-5-<br>ol |  |  |

|          |                                                                  |                                                                                      |                                                                                       |
|----------|------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
|          | benzo[c]florene-5-ol                                             |                                                                                      |                                                                                       |
| Ví dụ 21 | 2-bromo-7,7-dimethyl-9-(trifluoromethyl)-7H-benzo[c]florene-5-ol |    |    |
| Ví dụ 22 | 2-bromo-7,7-dimethyl-9-(trifluoromethyl)-7H-benzo[c]florene-5-ol |    |    |
| Ví dụ 23 | 2-bromo-7,7-dimethyl-9-(trifluoromethyl)-7H-benzo[c]florene-5-ol |  |  |

Ví dụ 24-26

Ví dụ 24

Bước 1

3-Methoxy-7,7-dimethyl-8,10-bis(trifluoromethyl)-7H-benzo[c]florene-2,5-diol (10 g) được thêm vào bình thót cổ đáy tròn chứa 200 mL CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> trong nitơ và được làm ấm đến 40°C cho đến khi được hòa tan hoàn toàn. Sau đó axit p-Toluensulfonic (0,044 g) được thêm vào. Dung dịch 1-(4-methoxyphenyl)-1-phenylprop-2-yn-1-ol (5,5 g) trong 25 mL CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> được thêm một cách từ từ vào hỗn hợp phản ứng ở 40°C cùng với việc khuấy, sau đó được gia nhiệt đến hồi lưu

qua đêm. Hỗn hợp phản ứng này được rửa với dung dịch nước  $\text{NaHCO}_3$  và được làm khô bằng  $\text{MgSO}_4$  khan. Sau khi loại bỏ dung môi trong chân không, phần dư được kết hợp với thể tích tối thiểu của  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  và sau đó đi qua silica gel plug với dung môi rửa giải  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ . Tiếp đó dung môi được loại bỏ và sản phẩm được kết tinh từ ete dietyl. Sản phẩm này được đặc trưng bởi  $^1\text{H}$  NMR là 6-metoxý-3-(4-metoxýphenyl)-13,13-đimetyl-3-phenyl-10,12-bis(triflorometyl)-3,13-đihydrobenzo[h]indeno[2,1-f]cromen-7-ol. Hiệu suất là 82%.

### Bước 2

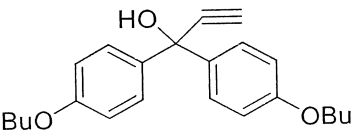
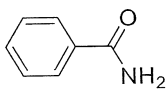
Sản phẩm của Bước 1 trên đây (10 g; 0,015 mol) được hòa tan trong 150 ml  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , sau đó thêm trietylamin (4,6 g) vào cùng với việc khuấy đều. Triflorometansulfonic anhydrit (5,08 g) được thêm từng giọt cùng với việc khuấy trong nitơ ở nhiệt độ đóng băng. Khi việc thêm vào được hoàn tất, phản ứng này được đưa về nhiệt độ phòng và khuấy trong một giờ. Dung dịch được cô đặc và đi qua silica gel plug. Dung môi được loại bỏ và phần còn dư được rửa bằng các hexan. Sản phẩm được đặc trưng bởi  $^1\text{H}$  NMR là 6-metoxý-3-(4-metoxýphenyl)-13,13-đimetyl-3-phenyl-10,12-bis(triflorometyl)-3,13-đihydrobenzo[h]indeno[2,1-f]cromen-7-yl triflorometansulfonat. Hiệu suất là 85%.

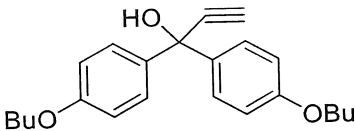
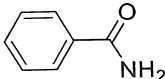
### Bước 3

Sản phẩm của bước 2 trên đây (0,5 g) và benzamit (0,11 g) được thêm vào nitơ trong bình thót hai cổ đáy tròn chứa 50 mL toluen và EtOH (tỷ lệ thể tích 9:1) với máy khuấy từ. Sau đó,  $\text{Cs}_2\text{CO}_3$  (0,8 g) và Xanthphos (0,09 g) được thêm vào cùng với việc khuấy. Dung dịch được phun với nitơ trong 10 phút sau đó bổ sung tris(đibenzylideneaxeton)dipaladi(0) (0,06 g) sau đó gia nhiệt đến hồi lưu. Sau 2

giờ hồi lưu, phản ứng được làm mát đến nhiệt độ phòng sau đó được thêm nước đá lạnh vào. Độ pH được điều chỉnh đến nhỏ hơn 7 bằng việc sử dụng HCl đặc. Hỗn hợp này được chiết bằng EtOAc, và sự cô đặc lớp hữu cơ bằng sự bay hơi. Phần còn dư được hòa tan trong 50 mL CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, được làm khô bằng MgSO<sub>4</sub> khan, và được đưa qua silica gel plug ngăn bằng việc sử dụng EtOAc/Hexan (1:2) làm dung môi rửa giải hấp. Phần mong muốn được thu lại, cô đặc, và sản phẩm được kết tủa từ metanol để sản xuất sản phẩm rắn có cấu trúc như được minh họa trong Bảng 3.

Thuốc tạo màu quang sắc bổ sung được sản xuất theo quy trình của Ví dụ 24. Đối với mỗi ví dụ, benzo[c]florene-5-ol được thế thích hợp đã được sử dụng thay thế 2-bromo-9-phenyl-7,7-đipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol ở Bước 1, như được chỉ ra trong Bảng 1 để tạo ra dạng thay thế mong muốn trong sản phẩm cuối cùng. Ngoài ra, 1-(4-metoxyphenyl)-1-phenylprop-2-yn-1-ol của Bước 1 đã được thay thế bằng lượng đẳng mol của 1,1-prop-2-yn-1-ol được thế (“propargyl alcohol”) mà được chỉ ra trong cột “Bước 1” theo Bảng 2. Ngoài ra, benzamit của Ví dụ 24, Bước 3, đã được thay thế bằng lượng đẳng mol của amit mà được chỉ ra trong cột “Amit” theo Bảng 2.

| Bảng 2. Các thành phần phản ứng cho các Ví dụ 25-26 |                                                  |                                                                                      |                                                                                       |
|-----------------------------------------------------|--------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| Số                                                  | benzo[c]florene-5-ol được thế                    | Propargyl alcohol                                                                    | Amit                                                                                  |
| Ví dụ 25                                            | 3-metoxy-7,7-đimetyl-7H-benzo[c]florene-2,5-diol |  |  |

|             |                                                                         |                                                                                    |                                                                                     |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| Ví dụ<br>26 | 3-metoxi-7,7-<br>đimetyl-9-phenyl-<br>7H-<br>benzo[c]flore-<br>2,5-diol |  |  |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|

## Ví dụ 27

Sản phẩm của Ví dụ 24 (1 g) được hòa tan trong 25 mL tetrahydrofuran (THF) trong nitơ, sau đó được nhúng chìm vào bể nước đá. Hỗn hợp này được thêm n-BuLi (1,6 M trong hexan) (1 mL) và hỗn hợp được khuấy trong 10 phút, sau đó methyl iodua (0,22 g; 0,1 mL) được thêm vào. Hỗn hợp phản ứng này được lấy ra khỏi bể nước đá và khuấy trong một giờ ở nhiệt độ phòng sau đó nước được đổ vào, điều chỉnh đến pH < 7 bằng HCl pha loãng sau đó được chiết bằng EtOAc. Dung môi được loại bỏ và phần còn dư được chạy qua silica gel plug bằng việc sử dụng Hexan và EtOAc 20% trong hơn 30 phút. Sản phẩm được xác nhận bằng NMR như có cấu trúc đồng nhất với N-methyl amit được minh họa trong Bảng 3.

## Ví dụ 28

Quy trình của Ví dụ 27 sau đó bằng việc sử dụng sản phẩm của Ví dụ 23 thay cho sản phẩm của Ví dụ 24.

## Ví dụ 29

## Bước 1

2-Bromo-9-phenyl-7,7-dipropyl-7H-benzo[c]flore-5-ol (2,5 g; 3,46 mmol) được thêm vào bình thót ba cổ đáy tròn chứa 100 mL toluen dưới lớp phủ nitơ ở nhiệt độ phòng. Dung dịch này được phun với nitơ trong năm phút, sau đó 1M liti bis(trimetylsilyl) amit trong THF (17,3 mL; 17,3 mmol) và

Bis(dibenzylidenaxeton)paladi(0) (0,199 g; 0,346 mmol) được thêm vào theo đó bằng 1M Tri-tert-butylphosphin trong Toluene (0,242 mL; 0,242 mmol). Sau ba mươi phút ở nhiệt độ phòng, hỗn hợp phản ứng này được đổ vào nước theo sau đó bằng việc bổ sung amoni clorua bão hòa với việc khuấy mạnh. Dung dịch này được chiết bằng etyl axetat và lớp hữu cơ được làm khô với NaSO<sub>4</sub> khan, được lọc và dung môi được loại bỏ bằng việc bay hơi. Phần còn dư được đưa qua cột CombiFlash<sup>®</sup> Rf (có sẵn về mặt thương mại từ Teledyne Isco) với EtOAc/Hexan (1: 4) làm dung môi rửa giải hấp. Phần mong muốn được thu lại, cô đặc và kết tinh lại từ các hexan và metanol để tạo ra 3,3-bis(4-metoxypheyl)-11-phenyl-13,13-dipropyl-3,13-dihydrobenzo[h]indeno[2,1- f]cromen-7-amin. Hiệu suất là 78%.

## Bước 2

Sản phẩm của Bước 1 trên đây (0,8 g; 1,22 mmol) được thêm vào lọ nhỏ bằng thủy tinh 20 ml chứa dimetyl cacbonat (4,38 g; 48,6 mmol) và kali tert-butoxit (0,164 g; 1,5 mmol) với việc khuấy. Bằng việc sử dụng tấm nóng, phản ứng này được gia nhiệt đến khi sôi trong tám phút và sau đó lọ nhỏ được lấy ra khỏi nguồn nhiệt. Sau khi chiết với etyl axetat, dung dịch được làm khô qua NaSO<sub>4</sub> khan, được lọc, và dung môi được loại bỏ bằng việc bay hơi. Phần còn dư được đưa qua cột CombiFlash<sup>®</sup> Rf (có sẵn về mặt thương mại từ Teledyne Isco) với EtOAc/Hexan (1:4) làm dung môi rửa giải hấp. Sản phẩm được kết tinh lại từ các hexan và metanol để tạo ra sản phẩm cacbamat tương ứng như được minh họa trong Bảng 3.

## Ví dụ 30

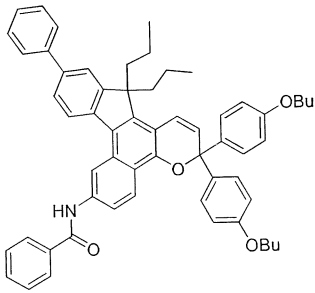
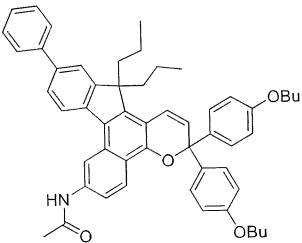
Quy trình của Ví dụ 29 được theo sau bằng việc sử dụng 2-bromo-9-metoxy-7,7-đipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol thay thế 2-Bromo-9-phenyl-7,7-đipropyl-7H-benzo[c]florene-5-ol để tạo ra cacbamate tương ứng như được minh họa trong Bảng 3.

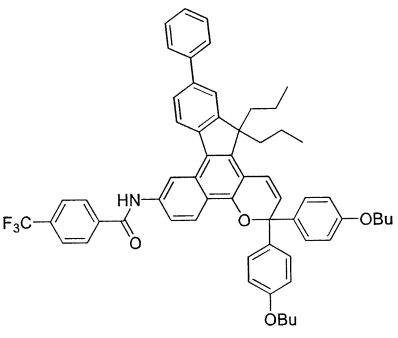
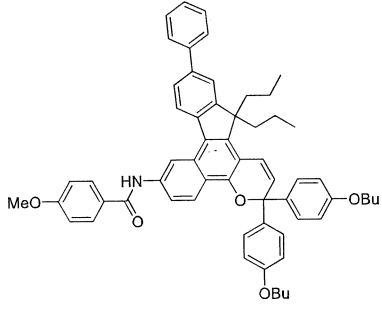
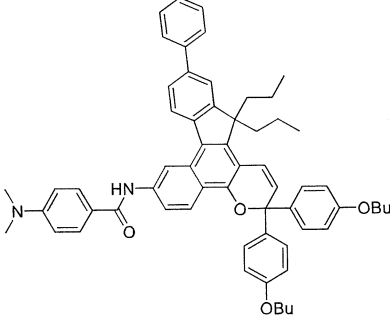
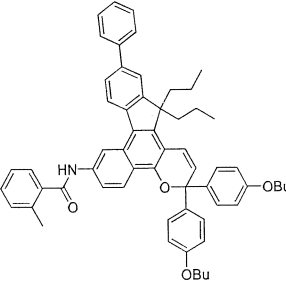
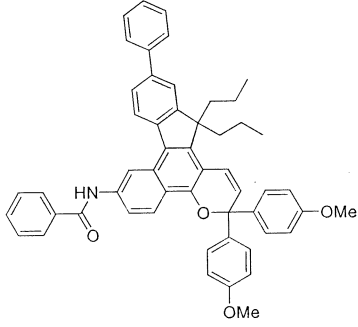
### Ví dụ 31

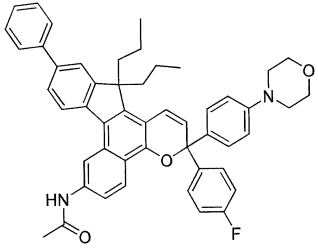
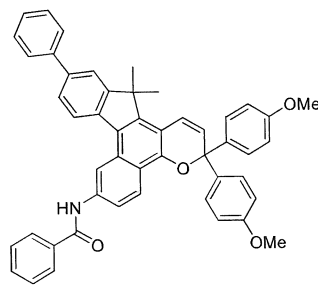
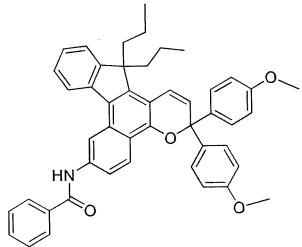
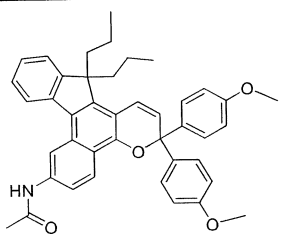
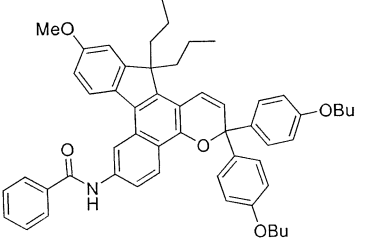
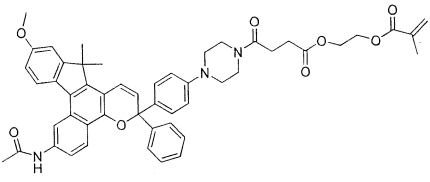
Sản phẩm của Bước 1, Ví dụ 29 (0,4 g; 0,608 mmol) được thêm vào bình thót phản ứng chứa 10 mL điclorometan và Hexyl isoxyanat (0,092g; 0,73 mmol) với việc khuấy, theo sau đó bằng việc bổ sung một giọt đã pha loãng của tributyl thiếc dilaurat. Dung dịch này được khuấy trong 10 phút ở nhiệt độ phòng vào thời điểm chất kết tủa được tạo thành trong bình thót. Kết tủa này được thu lại và xác định là ure tương ứng như được minh họa trong Bảng 3.

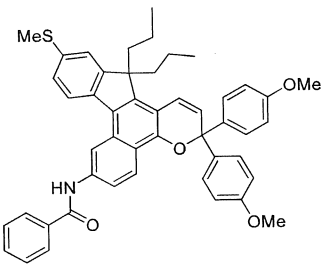
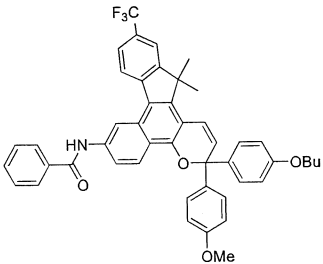
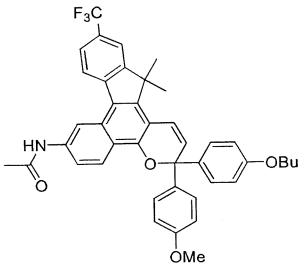
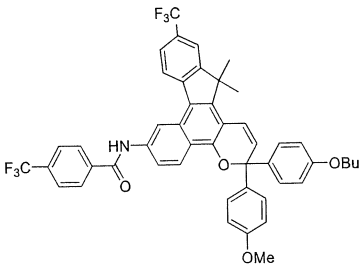
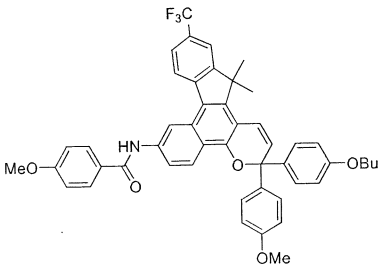
Sản phẩm cuối cùng của các Ví dụ 1-31 đã được tóm tắt trong Bảng 3, với hiệu suất của bước cuối cùng và các phương pháp đặc trưng.

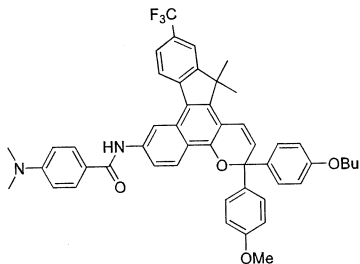
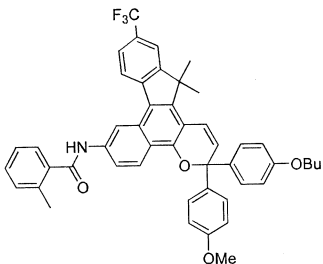
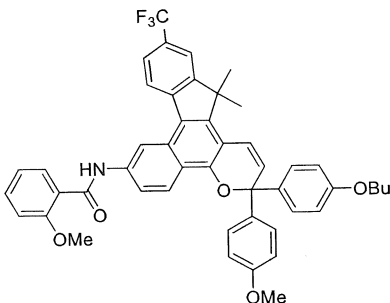
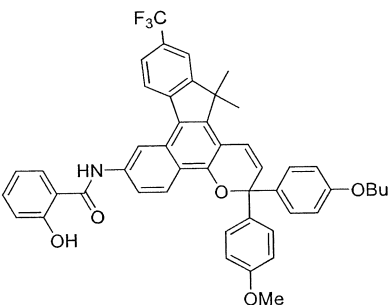
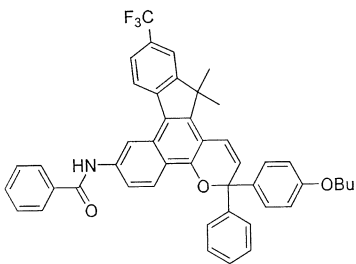
Bảng 3. Tóm tắt các ví dụ

| Ví dụ   | Cấu trúc                                                                            | Hiệu suất <sup>1</sup> (%) | Đặc tính<br>1 = <sup>1</sup> H NMR<br>2 = khối phổ |
|---------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|----------------------------------------------------|
| Ví dụ 1 |  | 72                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 2 |  | 71                         | 1, 2                                               |

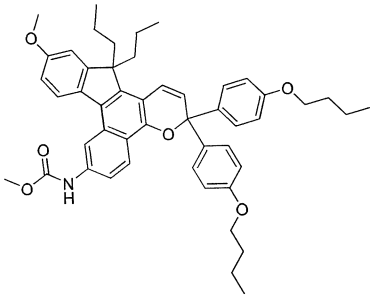
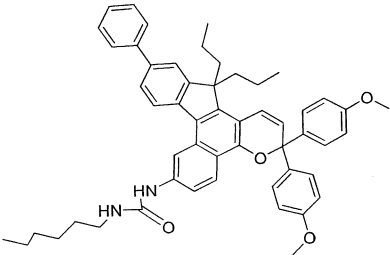
| Ví dụ   | Cấu trúc                                                                            | Hiệu suất <sup>1</sup> (%) | Đặc tính<br>1 = <sup>1</sup> H NMR<br>2 = khối phổ |
|---------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|----------------------------------------------------|
| Ví dụ 3 |    | 75                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 4 |   | 68                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 5 |  | 65                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 6 |  | 70                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 7 |  | 75                         | 1, 2                                               |

| Ví dụ    | Cấu trúc                                                                            | Hiệu suất <sup>1</sup> (%) | Đặc tính<br>1 = <sup>1</sup> H NMR<br>2 = khối phổ |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|----------------------------------------------------|
| Ví dụ 8  |    | 65                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 9  |    | 63                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 10 |   | 62                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 11 |  | 65                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 12 |  | 83                         | 1                                                  |
| Ví dụ 13 |  | 60                         | 1, 2                                               |

| Ví dụ    | Cấu trúc                                                                            | Hiệu suất <sup>1</sup> (%) | Đặc tính<br>1 = <sup>1</sup> H NMR<br>2 = khối phổ |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|----------------------------------------------------|
| Ví dụ 14 |    | 56                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 15 |    | 78                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 16 |   | 72                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 17 |  | 75                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 18 |  | 70                         | 1, 2                                               |

| Ví dụ    | Cấu trúc                                                                            | Hiệu suất <sup>1</sup> (%) | Đặc tính<br>1 = <sup>1</sup> H NMR<br>2 = khối phổ |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|----------------------------------------------------|
| Ví dụ 19 |    | 65                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 20 |    | 72                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 21 |   | 68                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 22 |  | 62                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 23 |  | 75                         | 1, 2                                               |

| Ví dụ    | Cấu trúc | Hiệu suất <sup>1</sup> (%) | Đặc tính<br>1 = <sup>1</sup> H NMR<br>2 = khối phổ |
|----------|----------|----------------------------|----------------------------------------------------|
| Ví dụ 24 |          | 70                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 25 |          | 65                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 26 |          | 72                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 27 |          | 70                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 28 |          | 72                         | 1, 2                                               |
| Ví dụ 29 |          |                            | 1, 2                                               |

| Ví dụ    | Cấu trúc                                                                          | Hiệu suất <sup>1</sup> (%) | Đặc tính<br>1 = <sup>1</sup> H NMR<br>2 = khối phổ |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|----------------------------------------------------|
| Ví dụ 30 |  |                            | 1, 2                                               |
| Ví dụ 31 |  |                            | 2                                                  |

<sup>1</sup> Hiệu suất được báo cáo tương ứng với bước tạo liên kết Cacbon-Nitơ tại vị trí số 7

## Phần 2: Các kết quả

Mỗi chất tạo màu quang sắc từ các Ví dụ 1 đến 14 và 24 đến 31, và mỗi ví dụ so sánh mà được minh họa trong Bảng 4 đã được kết hợp vào hệ thống phủ polyuretan như được mô tả trong Patent Hoa Kỳ số 8608988 các ví dụ 1-3 ở cùng % số mol và được áp ở cùng độ dày lớp phủ. Tất cả các mẫu được lưu hóa ở 125°C trong 1 giờ.

Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các mẫu được xác định bằng việc đo sự thay đổi trong mật độ quang học từ trạng thái được khử màu sang trạng thái được làm tối ở hai nhiệt độ, 10°C và 35°C bằng việc sử dụng các phương pháp được mô tả dưới đây. Trước khi kiểm tra sự phụ thuộc vào nhiệt độ, mỗi thấu kính được phủ được điều chỉnh bằng việc thử nhất tiếp xúc với ánh sáng tia cực tím 365 nanomet trong 10 phút ở khoảng cách khoảng 14 cm để hoạt hóa các vật liệu quang sắc.

Mật độ thông lượng bức xạ UVA (315 đến 380 nm) tại các thấu kính được đo bằng máy đo quang phổ LICOR® Model Li-1800 và được phát hiện là 22,2 oat trên mét vuông. Các thấu kính tiếp đó được đặt dưới đèn halogen cường độ cao 500 oat trong 10 phút ở khoảng cách khoảng 36 cm để khử màu (bất hoạt) các vật liệu quang sắc. Độ chiếu sáng tại các thấu kính được đo bằng máy quang phổ LICOR® và được phát hiện là 21,9 Klux. Các thấu kính sau đó được để trong môi trường tối ở nhiệt độ phòng (từ 70 đến 75°F, hoặc 21 đến 24°C) trong ít nhất 1 giờ trước khi kiểm tra trên giá quang học. Trước khi đo bằng giá quang học, các thấu kính được đo độ hấp thụ tia cực tím ở 390 nanomet. Giá quang học BMP được trang bị hai đèn hồ quang Xenon 150 oat ORIEL® Model #66057 đặt ở các góc vuông với nhau. Đường dẫn ánh sáng từ Đèn 1 được dẫn qua bộ lọc thông dải 3 mm SCFIOTT® KG-2 và các bộ lọc mật độ trung tính thích hợp mà góp phần vào mức độ mật độ thông lượng bức xạ của tia UV và ánh sáng nhìn thấy được một phần cần thiết. Đường dẫn ánh sáng từ Đèn 2 được dẫn qua bộ lọc thông dải 3 mm SCFIOTT® KG-2, bộ lọc cắt dải ngắn 400 nm SCFIOTT® và các bộ lọc mật độ trung tính thích hợp để cung cấp độ chiếu ánh sáng nhìn thấy được bổ sung. Bộ tách chùm 50% đục lỗ 2 in x 2 in, ở 45° để mỗi đèn được sử dụng để trộn hai chùm sáng. Sự kết hợp của các bộ lọc mật độ trung tính và sự điều khiển điện áp của đèn hồ quang Xenon được sử dụng để điều chỉnh cường độ của mật độ thông lượng bức xạ. Phần mềm độc quyền, cụ thể là BMPSoft phiên bản 2.1e được sử dụng trên BMP để kiểm soát thời gian, mật độ thông lượng bức xạ, cảm biến không khí và nhiệt độ mẫu, sự chắn sáng, sự lựa chọn bộ lọc và đo phản ứng. Máy quang phổ ZEISS®, Model MCS 501, với cáp sợi quang để phân phối ánh sáng qua các thấu kính được sử dụng để phản ứng và đo màu sắc. Các phép đo phản ứng chói được thu lại trên mỗi thấu kính. Công suất đầu ra của giá quang

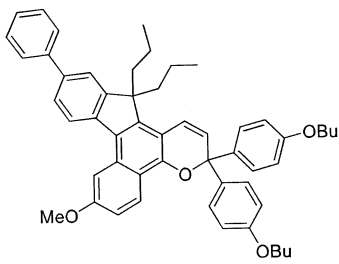
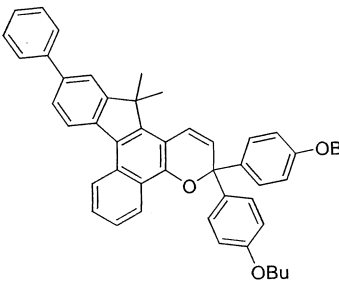
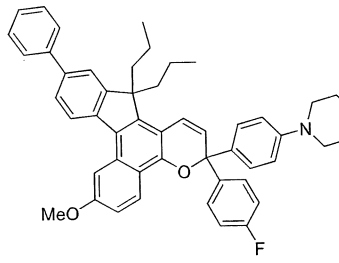
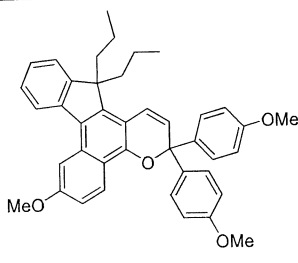
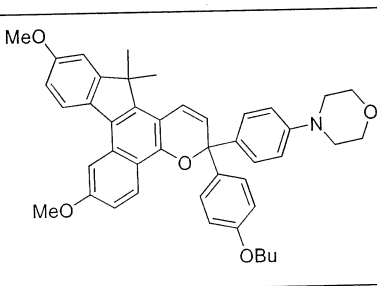
học, cụ thể là, lượng ánh sáng mà thấu kính được tiếp xúc, được điều chỉnh thành 6,7 oat trên mét vuông UVA ( $\text{W/m}^2$ ), được kết hợp từ 315-380 nm và độ rọi 50 Klux, được kết hợp từ 380-780 nm. Phép đo của điểm đặt công suất này được thực hiện bằng việc sử dụng bộ cảm biến độ rọi và máy quang phổ đã định cỡ Zeiss. Cảm biến mẫu các thấu kính được trang bị với khoang hở thạch anh và mâm cặp mẫu định tâm. Nhiệt độ trong cảm biến mẫu được kiểm soát ở  $10^\circ\text{C}$  và  $35^\circ\text{C}$  thông qua phần mềm với bộ mô phỏng môi trường Facis, Model FX-10 đã cải tiến. Phép đo phản ứng quang sắc động và phép đo màu của mẫu được thực hiện bằng việc sử dụng cùng máy quang phổ Zeiss, với cáp sợi quang để truyền ánh sáng từ đèn halogen vonfram và đi xuyên qua mẫu vật. Chùm ánh sáng giám sát chuẩn trực từ cáp sợi quang được duy trì vuông góc với mẫu thử trong khi đi qua mẫu vật và được dẫn vào bộ phận cáp sợi quang đang nhận mà được gắn với máy quang phổ. Điểm chính xác của vị trí của mẫu vật trong cảm biến mẫu là ở nơi chùm hồ quang xenon hoạt hóa và chùm ánh sáng giám sát giao nhau để tạo thành hai vòng tròn đồng tâm của ánh sáng. Góc tới của chùm hồ quang xenon tại điểm đặt mẫu là  $= 30^\circ$  so với phương vuông góc. Các phép đo phản ứng, xét về sự thay đổi trong mật độ quang học ( $\Delta\text{OD}$ ) từ trạng thái bất hoạt hoặc khử màu sang trạng thái hoạt hóa hoặc có màu được xác định bằng việc thiết lập đường truyền bất hoạt ban đầu, việc mở màn chắn từ (các) đèn Xenon và việc đo độ truyền qua sự hoạt hóa vào các khoảng thời gian được chọn. Sự thay đổi trong mật độ quang học ở nhiệt độ đã định được xác định theo công thức:  $\Delta\text{OD}_{\text{temp}} = \log(10)(\% \text{ Tb}/\% \text{ Ta})$ , trong đó  $\% \text{ Tb}$  là phần trăm độ truyền ở trạng thái khử màu,  $\% \text{ Ta}$  là phần trăm độ truyền ở trạng thái được hoạt hóa mà cả hai được đo ở nhiệt độ đó. Các phép đo mật độ quang học dựa trên mật độ quang học chói.

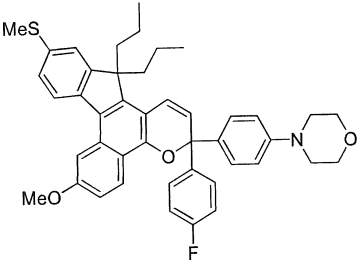
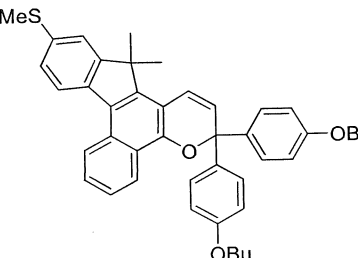
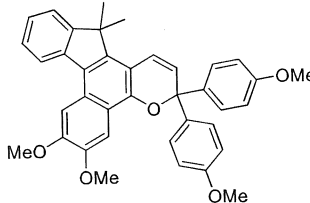
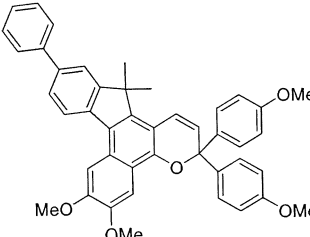
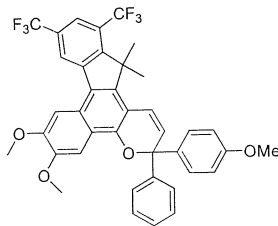
Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các mẫu được xác định bằng việc sử dụng các thay đổi của mật độ quang học ở cả 10°C và 35°C. Phép đo này được tính bằng phần trăm hao hụt của phản ứng rọi giữa hai nhiệt độ,  $\% \Delta OD \text{ hao hụt} = 100 * (1 - \Delta OD_{35} / \Delta OD_{10})$ . Thời gian hoạt hóa là 15 phút ở 35 °C và 30 phút ở 10 °C. Các kết quả được báo cáo trong Bảng 4 là  $\% \Delta OD$  hao hụt.  $\% \Delta OD$  hao hụt càng thấp thì sự phụ thuộc vào nhiệt độ càng tốt.

Bảng 4 thể hiện sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các ví dụ được chọn với các ví dụ so sánh, được nhóm lại theo các phần tử thể. Cấu trúc của các ví dụ này được tìm thấy trong Bảng 3.

Bảng 4

| Ví dụ / Ví dụ so sánh |  | $\% \Delta OD$ hao hụt |
|-----------------------|--|------------------------|
| Ví dụ 1               |  | 46                     |
| Ví dụ 2               |  | 46,1                   |
| Ví dụ 3               |  | 43,8                   |
| Ví dụ 4               |  | 43                     |
| Ví dụ 5               |  | 41,7                   |
| Ví dụ 6               |  | 46,1                   |
| Ví dụ 7               |  | 42,9                   |
| Ví dụ 8               |  | 41,5                   |
| Ví dụ 9               |  | 42,4                   |
| Ví dụ 29              |  | 45                     |
| Ví dụ 31              |  | 33                     |

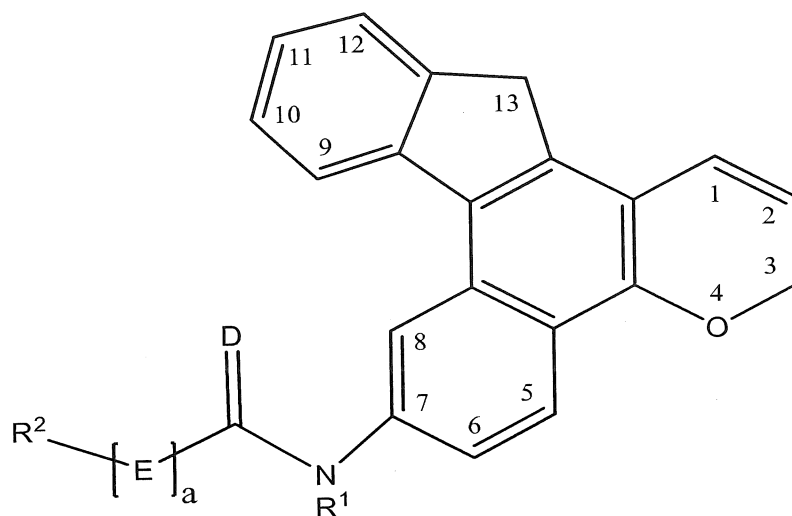
| Ví dụ / Ví dụ so sánh |                                                                                      | % $\Delta$ OD hao hụt |
|-----------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| CE-32                 |    | 53,6                  |
| CE-33                 |    | 55                    |
| CE-34                 |   | 55,5                  |
| Ví dụ 10              |                                                                                      | 47,1                  |
| Ví dụ 11              |                                                                                      | 45,5                  |
| CE-35                 |  | 54,9                  |
| Ví dụ 12              |                                                                                      | 38,8                  |
| Ví dụ 30              |                                                                                      | 42                    |
| CE-36                 |  | 50                    |
| Ví dụ 14              |                                                                                      | 41,6                  |

| Ví dụ / Ví dụ so sánh |                                                                                      | % $\Delta$ OD hao hụt |
|-----------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| CE-37                 |    | 51                    |
| CE-38                 |    | 55                    |
| Ví dụ 25              |                                                                                      | 47,3                  |
| CE-39                 |   | 55,3                  |
| Ví dụ 26              |                                                                                      | 44,6                  |
| CE-40                 |  | 53,7                  |
| Ví dụ 24              |                                                                                      | 63,4                  |
| Ví dụ 27              |                                                                                      | 60,8                  |
| CE-41                 |  | 65                    |

Các kết quả được thể hiện trong Bảng 4 chứng minh rõ ràng sự cải thiện về sự phụ thuộc vào nhiệt độ do sự hiện hữu của amit, cacbamat hoặc ure ở vị trí số 7 khi so sánh trực tiếp với các hợp chất tương tự mà có nhóm hydro hoặc metoxy ở các vị trí giống nhau.

Sáng chế còn có thể được đặc trưng thêm bởi một hoặc nhiều điểm không giới hạn sau đây.

Điểm 1. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (1):



Công thức (1)

trong đó,

D là oxy hoặc lưu huỳnh;

E là oxy, lưu huỳnh, hoặc  $\text{NR}^{2'}$ ;

a là 0 hoặc 1;

$\text{R}^1$  là hydro hoặc alkyl được thế hoặc không được thế;

mỗi  $R^2$  và  $R^{2'}$  được chọn một cách độc lập từ hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế;

với điều kiện là khi  $R^2$  là aryl được thế hoặc heteroaryl được thế, phần tử thế không chứa nhóm thiom hoặc nhóm mạch vòng; và

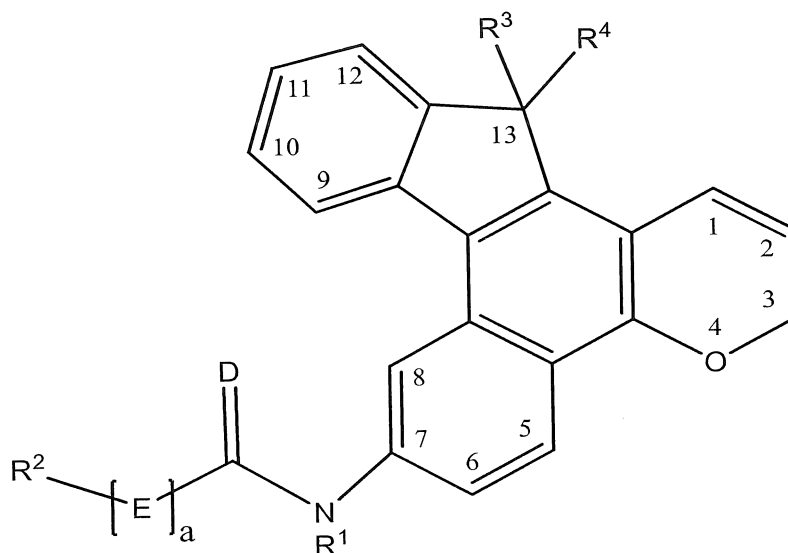
với điều kiện là khi E là oxy hoặc lưu huỳnh,  $R^2$  không phải là hydro.

Điểm 2. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 1, trong đó,

$R^1$  là hydro hoặc alkyl, và

$R^2$  là alkyl, hoặc aryl được thế hoặc không được thế.

Điểm 3. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 1 hoặc 2, có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (1a):



Công thức (1a)

trong đó,

$R^3$  và  $R^4$  được chọn một cách độc lập từ

(i) hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế, allyl, aryl được thế hoặc không được thế, hoặc heteroaryl được thế hoặc không được thế;

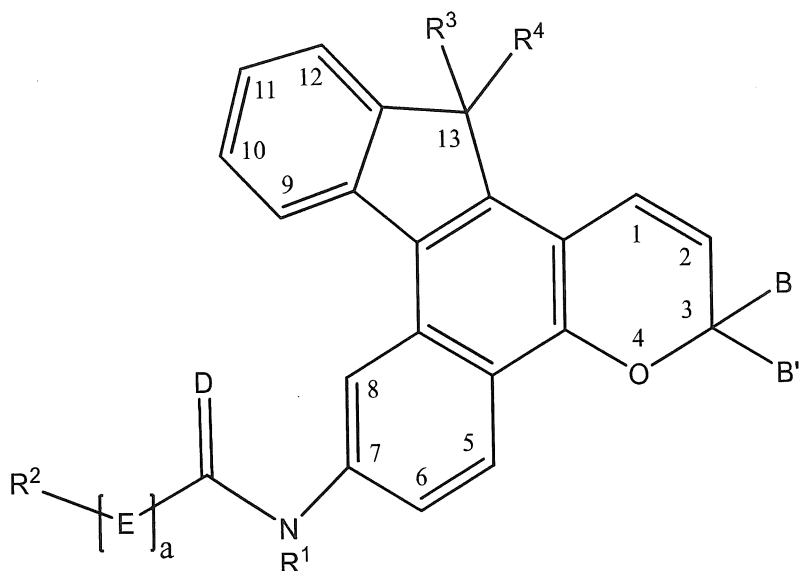
(ii) alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alcoxysilan, hoặc polysiloxan;

(iii) nhóm chứa polyeste, polyete, polycacbonat, polyuretan hoặc sự kết hợp của chúng; hoặc

(iv)  $R^3$  và  $R^4$  cùng tạo thành phần tử thế spiro được chọn từ spiro-cacboxyclic được thế hoặc không được thế chứa 3 đến 10 nguyên tử cacbon, vòng spiro-heterocyclic được thế hoặc không được thế chứa 1 hoặc 2 nguyên tử oxy và 3 đến 10 nguyên tử cacbon bao gồm nguyên tử spirocacbon, vòng spiro-cacboxyclic và vòng spiro-heterocyclic được phân đốt với 0, 1 hoặc 2 vòng benzen, mỗi phần tử thế vòng spiro độc lập là alkyl.

Điểm 4. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 3, trong đó mỗi  $R^3$  và  $R^4$  được chọn một cách độc lập từ alkyl được thế hoặc không được thế.

Điểm 5. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 3 hoặc 4, có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (1b):



Công thức (1b)

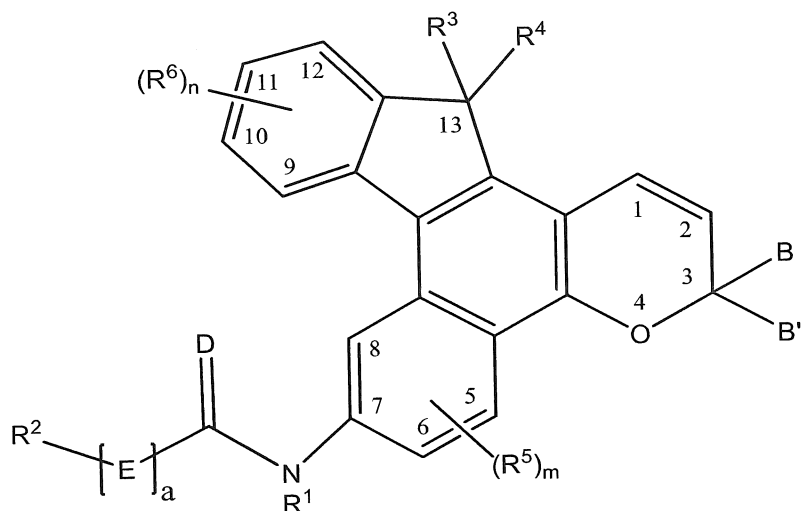
trong đó,

B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, alkenyl được thế hoặc không được thế, hoặc alkynyl được thế hoặc không được thế, hoặc B và B' cùng tạo thành cấu trúc vòng.

Điểm 6. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 5, trong đó mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế.

Điểm 7. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 5, trong đó mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế.

Điểm 8. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 5 đến 7, có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (1c):



Công thức (1c)

trong đó,

$m$  là 0 đến 3, và  $n$  là 0 đến 4; và

$R^5$  độc lập đối với mỗi  $m$ , và  $R^6$  độc lập đối với mỗi  $n$ , được chọn một cách độc lập từ:

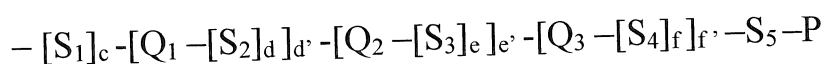
- i. hydroxyl;
- ii. xyano;
- iii. acrylat hoặc metacrylat;
- iv. amino hoặc dị vòng chứa nito;
- v. nhóm  $L^1$  kéo dài;
- vi. halogen được chọn từ flo, clo, brom, hoặc iot;
- vii. alkyl được thế hoặc không được thế;
- viii. haloalkyl;
- ix. perhaloalkyl;
- x. este boronic hoặc axit boronic;
- xi. polyete, polyeste, polycacbonat, hoặc polyuretan;

- xii. aryl được thế hoặc không được thế;
- xiii. heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế;
- xiv. heteroaryl được thế hoặc không được thế; hoặc
- xv. alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, amit, ure, siloxan, alkoxysilan, polysiloxan, cacbonat, hoặc cacbamat.

Điểm 9. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 8, trong đó  $R^5$  độc lập đối với mỗi m và  $R^6$  độc lập đối với mỗi n, được chọn một cách độc lập từ halogen, alkyoxy, perhaloalkyl, hoặc aryl được thế hoặc không được thế.

Điểm 10. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 8, trong đó mỗi nhóm  $L^1$  kéo dài được biểu thị một cách độc lập bằng Công thức (III) sau đây,

#### Công thức III



trong đó:

(a)  $Q_1$ ,  $Q_2$ , và  $Q_3$  cho mỗi lần xuất hiện, là nhóm hóa trị hai được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có aryl không được thế, aryl được thế, heteroaryl không được thế, heteroaryl được thế, xycloalkyl không được thế, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl không được thế, hoặc heteroxycloalkyl được thế;

trong đó các phần tử thế aryl, các phần tử thế heteroaryl, các phần tử thế xycloalkyl, và các phần tử thế heteroxycloalkyl được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có P, các mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly( $C_1$ - $C_{18}$  alkoxy),  $C_1$ - $C_{18}$  alkoxycarbonyl,  $C_1$ - $C_{18}$  alkylcarbonyl,  $C_1$ - $C_{18}$  alkoxycarbonyloxy, aryloxy carbonyloxy, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkoxy, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkoxycarbonyl, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylcarbonyl, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylamino, di-(perfloro( $C_1$ -

$C_{18}$ )alkyl)amino, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylthio,  $C_1$ - $C_{18}$  alkylthio,  $C_3$ - $C_{10}$  xycloalkoxy, hoặc  $C_1$ - $C_{18}$  alkyl;

(b) c, d, e và f được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; và mỗi  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ , và  $S_5$  được chọn một cách độc lập đối với mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm mà được chọn từ nhóm gồm có:

(i) alkylen, alkylen được thế, haloalkylen, haloalkylen được thế,  $-\text{Si}(\text{CH}_2)_g-$ , hoặc  $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$ , trong đó g cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; h cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 16; và các phần tử thế của alkylen và haloalkylen được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có  $C_1$ - $C_{18}$  alkyl hoặc aryl;

(ii)  $-\text{N}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{N}-$ ,  $-\text{C}(\text{Z}')_2-\text{C}(\text{Z}')_2-$ ,  $-\text{N}(\text{Z})-\text{C}(\text{Z})_2-$ , và liên kết đơn, trong đó Z cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có hydro,  $C_1$ - $C_{18}$  alkyl, hoặc aryl, và  $\text{Z}'$  cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có alkyl hoặc aryl; hoặc

(iii)  $-\text{O}-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-$ ,  $-\text{C}\equiv\text{C}-$ ,  $-\text{N}=\text{N}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{S}(=\text{O})-$ ,  $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})-$ ,  $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O}-$ ,  $-\text{O}(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O}-$  và chất còn dư alkylen  $C_1$ - $C_{24}$  mạch thẳng hoặc phân nhánh, chất còn dư alkylen  $C_1$ - $C_{24}$  không được thế, được thế một lần bằng xyano hoặc halogen, hoặc được thế nhiều lần bằng halogen,

với điều kiện là khi hai đơn vị đệm mà gồm các dị nguyên tử được liên kết với nhau thì các đơn vị đệm này được liên kết sao cho các dị nguyên tử khác không bị liên kết trực tiếp với nhau;

(c) P là hydro; và

(d)  $d'$ ,  $e'$  và  $f'$  được chọn một cách độc lập từ 0, 1, 2, 3 và 4, với điều kiện là tổng của  $d' + e' + f'$  ít nhất là 1.

Điểm 11. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 10, trong đó mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, mỗi phần tử thế aryl, hoặc mỗi phần tử thế heteroaryl, trong mỗi trường hợp được chọn một cách độc lập từ halogen, xyano, nitơ, alkyl, alkenyl, alkynyl, haloalkyl, perhaloalkyl, heteroxycloalkyl, aryl, heteroaryl, alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alkoxyasilan, polysiloxan, amit, amin, cacbamat, nhóm polyeste, nhóm polyete, nhóm polycacbonat, nhóm polyuretan, nhóm acrylat, nhóm metacrylat hoặc sự kết hợp của chúng.

Điểm 12. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 11, trong đó mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, mỗi phần tử thế aryl, hoặc mỗi phần tử thế heteroaryl tiếp theo có thể được thế bằng alkyl, haloalkyl, perhaloalkyl, aryl, heteroaryl, phenylalkyl, monoalkyl được thế phenylalkyl, monoalkoxy được thế phenylalkyl, alkoxyalkyl, heteroxycloalkyl, polysiloxan, hydroxyl, ete, polyete, polyeste, nhóm acrylat, nhóm metacrylat, polycacbonat, halogen, hoặc sự kết hợp của chúng.

Điểm 13. Chế phẩm quang sắc chứa naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 12.

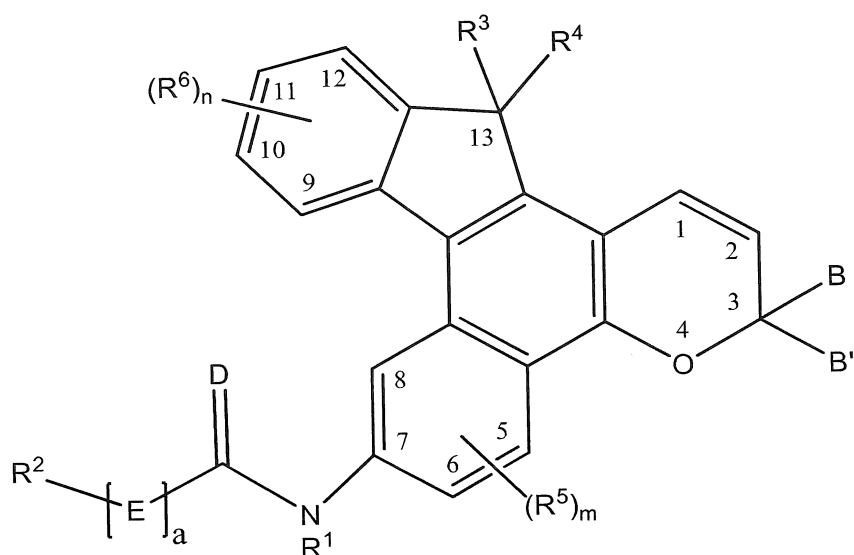
Điểm 14. Chế phẩm quang sắc chứa naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 12, trong đó vật phẩm quang sắc được chọn từ các vật phẩm nhãn khoa, vật phẩm hiển thị, cửa sổ, kính, vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng chủ động hoặc vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng thụ động.

Điểm 15. Vật phẩm quang sắc theo điểm 14, trong đó vật phẩm quang sắc được chọn từ các vật phẩm nhãn khoa, và các vật phẩm nhãn khoa này có thể được

chọn từ thấu kính điều chỉnh, thấu kính không điều chỉnh, kính áp tròng, kính nội nhãn, kính lúp, kính bảo vệ và kính che mắt.

Điểm 16. Vật phẩm quang sắc theo điểm 15, trong đó vật phẩm quang sắc được chọn từ các vật phẩm hiển thị, và các vật phẩm hiển thị này có thể được chọn từ các màn hình, màn hiển thị và các chi tiết an ninh.

Điểm 17. Naphtopyran ngưng tụ vòng ideno được biểu thị bằng Công thức (Ic):



Công thức (Ic)

trong đó,

D là oxy hoặc lưu huỳnh;

E là oxy, lưu huỳnh, hoặc  $\text{NR}^{2'}$ ;

a là 0 hoặc 1;

$\text{R}^1$  là hydro, hoặc alkyl được thế hoặc không được thế;

mỗi  $\text{R}^2$  và  $\text{R}^{2'}$  được chọn một cách độc lập từ hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc heterocycloalkyl được thế hoặc không được thế;

với điều kiện là khi  $R^2$  aryl được thế hoặc heteroaryl được thế, phần tử thế không chứa nhóm thiom hoặc nhóm mạch vòng;

với điều kiện là khi E là oxy hoặc lưu huỳnh,  $R^2$  không phải là hydro;

m là 0 đến 3;

n là 0 đến 4; và

$R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ , B, và B' được chọn một cách độc lập từ hydro hoặc nhóm khác ngoài hydro.

Điểm 18. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 17, trong đó,

$R^1$  là hydro hoặc alkyl được thế, và

$R^2$  là alkyl được thế hoặc không được thế, hoặc aryl được thế hoặc không được thế.

Điểm 19. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 17 hoặc 18, trong đó,

$R^3$  và  $R^4$  được chọn một cách độc lập từ

(i) hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế, allyl, aryl được thế hoặc không được thế, hoặc heteroaryl được thế hoặc không được thế

(ii) alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alkoxysilan, hoặc polysiloxan;

(iii) nhóm chứa polyeste, polyete, polycacbonat, polyuretan hoặc sự kết hợp của chúng; hoặc

(iv)  $R^3$  và  $R^4$  cùng nhau tạo thành vòng béo có 3 đến 20 nguyên tử cacbon cạnh vòng, vòng đa vòng ngưng tụ có vòng thiom hoặc dị vòng thiom liên kết vòng tới vòng béo ở trên, dị vòng có 3 đến 20 nguyên tử cạnh vòng, hoặc vòng đa vòng

ngưng tụ có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với dị vòng ở trên, cùng với nguyên tử cacbon vị trí số 13 được liên kết với nó.

Điểm 20. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 17 đến 19, trong đó mỗi  $R^3$  và  $R^4$  được chọn một cách độc lập từ alkyl được thế hoặc không được thế.

Điểm 21. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 17 đến 20, trong đó,

B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, alkenyl được thế hoặc không được thế, hoặc alkynyl được thế hoặc không được thế, hoặc B và B' được kết hợp với nhau tạo thành phần tử thế spiro mà được chọn từ vòng spiro-cacbonat được thế hoặc không được thế, vòng spiro-dị vòng được thế hoặc không được thế, vòng spiro-cacbocyclic hoặc vòng spiro-dị vòng được phân đốt với 0, 1 hoặc 2 vòng aryl, mỗi phần tử thế vòng spiro độc lập là alkyl.

Điểm 22. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 17 đến 21, trong đó mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế.

Điểm 23. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo các điểm 21 hoặc 22, trong đó mỗi phần tử thế aryl trong mỗi trường hợp được chọn một cách độc lập từ aryl amin, alkyl amin, các amino mạch vòng, các dị vòng thơm, hoặc sự kết hợp của chúng.

Điểm 24. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 21 đến 23, trong đó mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ phenyl được thế hoặc không được thế, alkoxyphenyl, halo phenyl, hoặc mocpholino phenyl.

Điểm 25. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 17 đến 24, trong đó,

m là 0 đến 3, và n là 0 đến 4;

$R^5$  độc lập đối với mỗi m, và  $R^6$  độc lập đối với mỗi n, được chọn một cách độc lập từ:

- i. hydroxyl;
- ii. xyano;
- iii. (met)acrylat;
- iv. amino hoặc dị vòng chứa nito;
- v. nhóm  $L^1$  kéo dài;
- vi. halogen được chọn từ flo, clo, bromo, hoặc iot;
- vii. alkyl được thế hoặc không được thế;
- viii. alkenyl được thế hoặc không được thế;
- ix. alkynyl được thế hoặc không được thế;
- x. haloalkyl;
- xi. perhaloalkyl;
- xii. este boronic hoặc axit boronic;
- xiii. polyete, polyeste, polycacbonat, hoặc polyuretan;
- xiv. aryl được thế hoặc không được thế;
- xv. heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế;
- xvi. heteroaryl được thế hoặc không được thế; hoặc
- xvii. alkoxy được thế hoặc không được thế, alkylthio được thế hoặc không được thế, aryloxy được thế hoặc không được thế, arylthio

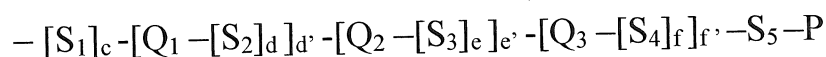
được thế hoặc không được thế, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, amit, ure, siloxan, alkoxyasilan, polysiloxan, cacbonat, hoặc cacbamat.

Điểm 26. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 25, trong đó  $R^6$  ở vị trí số 10 và là nhóm  $L^1$  kéo dài.

Điểm 27. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 25 hoặc 26, trong đó  $R^5$  độc lập với mỗi m và  $R^6$  độc lập đối với mỗi n, được chọn một cách độc lập từ halogen, alkyoxy, perhaloalkyl, hoặc aryl được thế hoặc không được thế.

Điểm 28. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 25 đến 27, trong đó mỗi nhóm  $L^1$  kéo dài được biểu thị một cách độc lập bằng Công thức (2) sau đây,

Công thức (2)



trong đó:

(a)  $Q_1$ ,  $Q_2$ , và  $Q_3$  cho mỗi lần xuất hiện, là nhóm hóa trị hai được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có aryl không được thế, aryl được thế, heteroaryl không được thế, heteroaryl được thế, xycloalkyl không được thế, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl không được thế, hoặc heteroxycloalkyl được thế;

trong đó các phần tử thế aryl, các phần tử thế heteroaryl, các phần tử thế xycloalkyl, và các phần tử thế heteroxycloalkyl được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có P, các mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly( $C_1$ - $C_{18}$  alkoxy),  $C_1$ - $C_{18}$  alkoxyacarbonyl,  $C_1$ - $C_{18}$  alkylacarbonyl,  $C_1$ - $C_{18}$  alkoxyacarbonyloxy, aryloxyacarbonyloxy, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkoxy, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkoxyacarbonyl, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylacarbonyl, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylamin, di-(perfloro( $C_1$ -

$C_{18}$ alkyl)amino, perfloro( $C_1$ - $C_{18}$ )alkylthio,  $C_1$ - $C_{18}$  alkylthio,  $C_3$ - $C_{10}$  xycloalkoxy, hoặc  $C_1$ - $C_{18}$  alkyl;

(b) c, d, e và f được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; và mỗi  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ , và  $S_5$  được chọn một cách độc lập cho mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm mà được chọn từ nhóm gồm có:

(i) alkylen, alkylen được thế, haloalkylen, haloalkylen được thế,  $-\text{Si}(\text{CH}_2)_g-$ , và  $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$ , trong đó g cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; h cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 16; và các phần tử thế của alkylen và haloalkylen được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có  $C_1$ - $C_{18}$  alkyl hoặc aryl;

(ii)  $-\text{N}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{N}-$ ,  $-\text{C}(\text{Z}')_2-\text{C}(\text{Z}')_2-$ ,  $-\text{N}(\text{Z})-\text{C}(\text{Z})_2-$ , và liên kết đơn, trong đó Z cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm bao gồm hydro,  $C_1$ - $C_{18}$  alkyl, hoặc aryl, và  $\text{Z}'$  cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có  $C_1$ - $C_{18}$  alkyl hoặc aryl; và

(iii)  $-\text{O}-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-$ ,  $-\text{C}\equiv\text{C}-$ ,  $-\text{N}=\text{N}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{S}(=\text{O})-$ ,  $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})-$ ,  $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O}-$ ,  $-\text{O}(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O}-$  và chất còn dư alkylen  $C_1$ - $C_{24}$  mạch thẳng hoặc phân nhánh, chất còn dư alkylen  $C_1$ - $C_{24}$  không được thế, được thế một lần bằng xyano hoặc halogen, hoặc được thế nhiều lần bằng halogen,

với điều kiện là khi hai đơn vị đệm mà gồm các dị nguyên tử được liên kết với nhau thì các đơn vị đệm này được liên kết sao cho các dị nguyên tử không bị liên kết trực tiếp với nhau;

(c) P là hydro; và

(d)  $d'$ ,  $e'$  và  $f'$  được chọn một cách độc lập từ 0, 1, 2, 3 và 4, với điều kiện là tổng của  $d' + e' + f'$  ít nhất là 1.

Điều 29. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 17 đến 28, trong đó mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế aryl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, và mỗi phần tử thế heteroaryl, trong mỗi trường hợp được chọn một cách độc lập từ halogen, xyano, nitơ, alkyl, alkenyl, alkynyl, haloalkyl, perhaloalkyl, heteroxycloalkyl, aryl, heteroaryl, alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alkoxysilan, polysiloxan, amit, amin, cacbonat, nhóm polyeste, nhóm polyete, nhóm polycacbonat, nhóm polyurethane, nhóm acrylat, nhóm metacrylat hoặc sự kết hợp của chúng.

Điều 30. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 29, trong đó mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế aryl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, hoặc mỗi phần tử thế heteroaryl, trong mỗi trường hợp tiếp theo được thế một cách độc lập bằng nhóm acrylat hoặc nhóm metacrylat.

Điều 31. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 30, trong đó công thức này bao gồm ít nhất một phần tử thế bổ sung, trùng hoặc khác nhau, nằm trên ít nhất một vị trí có sẵn trên cấu trúc khung lõi trong số các vị trí 1 đến 13 mà mô tả trong đó.

Điều 32. Naphthopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 31, trong đó ít nhất một phần tử thế bổ sung được chọn một cách độc lập từ nhóm alkyl, nhóm heteroxycloalkyl, nhóm aryl, nhóm heteroaryl, nhóm thiol, nhóm alkylthio, nhóm xeton, nhóm andehit, nhóm este, nhóm axit cacboxylic, nhóm axit photphoric, nhóm este axit photphoric, nhóm axit sulfonic, nhóm este axit sulfonic, nhóm nitơ, nhóm xyano, nhóm alkyl, nhóm aralkyl, nhóm alkenyl, nhóm alkynyl, nhóm haloalkyl, nhóm perhaloalkyl, nhóm heteroxycloalkyl, nhóm aryl, nhóm alkaryl, nhóm aryl được thế bằng hydroxyl, nhóm aryl được thế bằng alkoxy, nhóm aryl được thế bằng heteroxycloalkyl, nhóm aryl được thế bằng halo, nhóm aryl đa vòng

ngưng tụ, nhóm heteroaryl, nhóm heteroaryl đa vòng ngưng tụ, nhóm amin, nhóm cacboxylat, nhóm siloxan, nhóm alkoxysilan, nhóm polysiloxan, nhóm amit, nhóm cacbamat, nhóm cacbonat, nhóm ure, nhóm polyeste, nhóm polyete, nhóm polycarbonat, nhóm polyuretan, nhóm acrylat, nhóm metacrylat, nhóm amino aryl, nhóm amino mạch vòng, nhóm heteroaromatic hoặc sự kết hợp của chúng.

Điểm 33. Chế phẩm quang sắc có chứa naphthopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 17 đến 32.

Điểm 34. Chế phẩm quang sắc có chứa naphthopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 17 đến 32, trong đó vật phẩm quang sắc được chọn từ các vật phẩm nhãn khoa, vật phẩm hiển thị, cửa sổ, gương kính, vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng chủ động hoặc vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng thụ động.

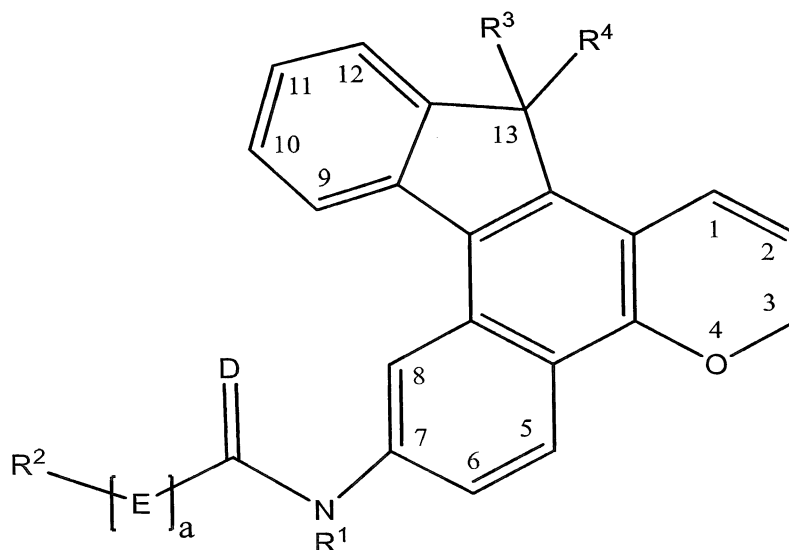
Điểm 35. Vật phẩm quang sắc theo điểm 34, trong đó vật phẩm quang sắc được chọn từ các vật phẩm nhãn khoa, và các vật phẩm nhãn khoa này có thể được chọn từ thấu kính điều chỉnh, thấu kính không điều chỉnh, kính áp tròng, kính nội nhãn, kính lúp, kính bảo vệ và kính che mắt.

Điểm 36. Vật phẩm quang sắc theo điểm 35, trong đó vật phẩm quang sắc được chọn từ các vật phẩm hiển thị và các vật phẩm hiển thị này có thể được chọn từ các màn hình, màn hiển thị và các chi tiết an ninh.

Sáng chế đã được mô tả với sự tham khảo đến các chi tiết riêng của các ví dụ cụ thể của nó. Không có ý định coi các chi tiết như vậy như là các giới hạn phạm vi của sáng chế ngoại trừ trong phạm vi và biên độ mà các chi tiết này được bao gồm trong các yêu cầu bảo hộ đi kèm.

## YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (Ia):



(Công thức Ia)

trong đó,

D là oxy hoặc lưu huỳnh;

E là oxy, lưu huỳnh, hoặc  $\text{NR}^{2'}$ ;

a là 0 hoặc 1;

$\text{R}^1$  là hydro, hoặc alkyl được thế hoặc không được thế;

mỗi  $\text{R}^2$  và  $\text{R}^{2'}$  được chọn một cách độc lập từ hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế;

với điều kiện là khi  $\text{R}^2$  là aryl được thế hoặc heteroaryl được thế, các phần tử thế không chứa nhóm thơm hoặc nhóm mạch vòng; và

với điều kiện là khi E là oxy hoặc lưu huỳnh,  $\text{R}^2$  không phải là hydro;

và

trong đó,  $R^3$  và  $R^4$  được chọn một cách độc lập từ

(i) hydro, alkyl được thế hoặc không được thế, heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế, allyl, aryl được thế hoặc không được thế, hoặc heteroaryl được thế hoặc không được thế;

(ii) alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alkoxyasilan, hoặc polysiloxan;

(iii) nhóm gồm polyeste, polyete, polycarbonat, polyuretan hoặc các sự kết hợp của chúng; hoặc

(iv)  $R^3$  và  $R^4$  cùng nhau tạo thành vòng béo có từ 3 đến 20 nguyên tử cacbon cạnh vòng, vòng đa vòng ngưng tụ có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với vòng béo ở trên, dị vòng có 3 đến 20 nguyên tử cạnh vòng, hoặc vòng đa vòng có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với dị vòng ở trên, cùng với nguyên tử cacbon vị trí số 13 được liên kết với nó.

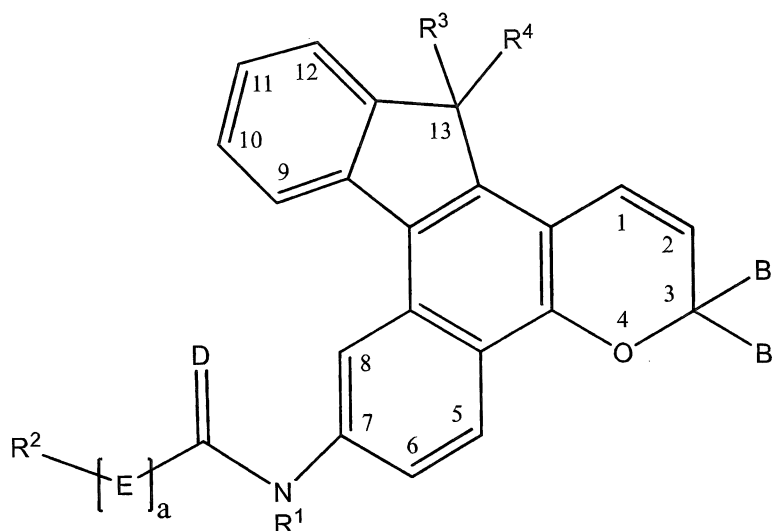
2. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 1, trong đó,

$R^1$  là hydro hoặc alkyl được thế, và

$R^2$  là alkyl được thế hoặc không được thế, hoặc aryl được thế hoặc không được thế.

3. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 1 hoặc 2, trong đó mỗi  $R^3$  và  $R^4$  được chọn một cách độc lập từ alkyl được thế hoặc không được thế.

4. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (Ib):



(Công thức Ib)

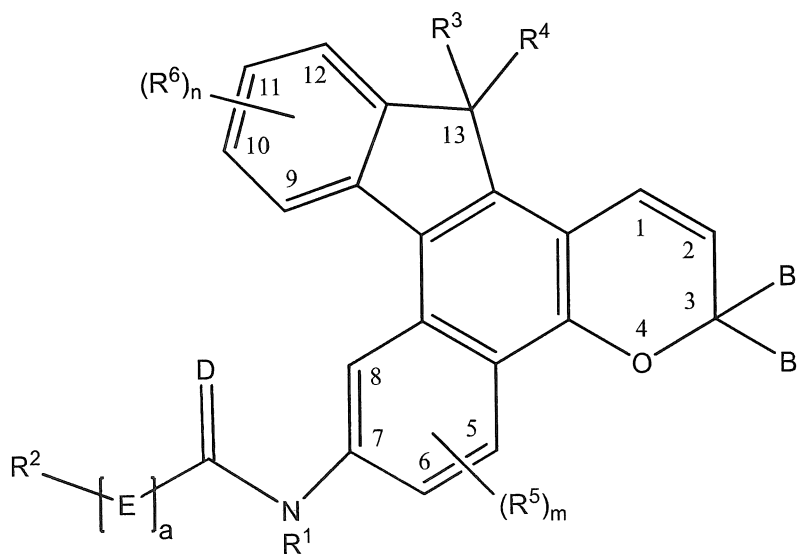
trong đó,

mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế, heteroaryl được thế hoặc không được thế, alkenyl được thế hoặc không được thế, hoặc alkynyl được thế hoặc không được thế, hoặc B và B' được kết hợp với nhau tạo thành vòng béo có từ 3 đến 20 nguyên tử cacbon cạnh vòng, vòng đa vòng ngưng tụ mà có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với vòng béo ở trên, dị vòng có từ 3 đến 20 nguyên tử cạnh vòng, hoặc vòng đa vòng ngưng tụ có vòng thơm hoặc dị vòng thơm ngưng tụ với dị vòng ở trên, cùng với nguyên tử cacbon vị trí số 3 được liên kết với nó, các phần tử thế còn lại như được xác định trong điểm 1.

5. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 4, trong đó mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ aryl được thế hoặc không được thế.

6. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 4 hoặc 5, trong đó mỗi B và B' được chọn một cách độc lập từ phenyl được thế hoặc không được thế, alkoxyphenyl, halo phenyl, và mocpholino phenyl.

7. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno có cấu trúc khung lõi được biểu thị bằng Công thức (Ic):



(Công thức Ic)

trong đó,

$m$  là 0 đến 3, và  $n$  là 0 đến 4; và

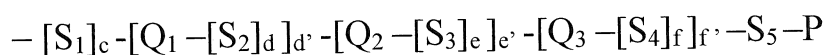
$R^5$  độc lập đối với mỗi  $m$ , và  $R^6$  độc lập đối với mỗi  $n$ , mà mỗi một trong số chúng được chọn một cách độc lập từ:

- i. hydroxyl;
- ii. xyano;
- iii. (met)acrylat;
- iv. Amino hoặc dị vòng chứa nito;
- v. nhóm  $L^1$  kéo dài;
- vi. halogen được chọn từ flo, clo, brom, hoặc iot;
- vii. alkyl được thế hoặc không được thế;
- viii. alkenyl được thế hoặc không được thế;
- ix. alkynyl được thế hoặc không được thế;

- x. haloalkyl;
- xi. perhaloalkyl;
- xii. este boronic hoặc axit boronic;
- xiii. polyete, polyeste, polycacbonat, hoặc polyuretan;
- xiv. aryl được thế hoặc không được thế;
- xv. heteroxycloalkyl được thế hoặc không được thế;
- xvi. heteroaryl được thế hoặc không được thế; hoặc
- xvii. alkoxy được thế hoặc không được thế, alkylthio được thế hoặc không được thế, aryloxy được thế hoặc không được thế, arylthio được thế hoặc không được thế, xeton, andehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, amit, ure, siloxan, alkoxyasilan, polysiloxan, cacbonat, hoặc cacbammat;

trong đó mỗi nhóm  $L^1$  kéo dài được biểu thị một cách độc lập bằng Công thức (2) sau đây,

Công thức (2)



trong đó:

(a)  $Q_1$ ,  $Q_2$ , và  $Q_3$  cho mỗi lần xuất hiện, là nhóm hóa trị hai được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có aryl không được thế, aryl được thế, heteroaryl không được thế, heteroaryl được thế, xycloalkyl không được thế, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl không được thế, hoặc heteroxycloalkyl được thế;

trong đó các phần tử thế aryl, phần tử thế heteroaryl, phần tử thế xycloalkyl, và phần tử thế heteroxycloalkyl được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có P, các mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly( $C_1$ - $C_{18}$  alkoxy),  $C_1$ - $C_{18}$  alkoxyacbonyl,

$C_1-C_{18}$  alkylcacybonyl,  $C_1-C_{18}$  alkoxycacybonyloxy, aryloxycacybonyloxy, perfloro( $C_1-C_{18}$ )alkoxy, perfloro( $C_1-C_{18}$ )alkoxycacybonyl, perfloro( $C_1-C_{18}$ )alkylcacybonyl, perfloro( $C_1-C_{18}$ )alkylamino, di-(perfloro( $C_1-C_{18}$ )alkyl)amino, perfloro( $C_1-C_{18}$ )alkylthio,  $C_1-C_{18}$  alkylthio,  $C_3-C_{10}$  xycloalkoxy, hoặc alkyl;

(b) c, d, e và f được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; và mỗi  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ , và  $S_5$  được chọn một cách độc lập đối với mỗi lần biểu hiện từ đơn vị đệm được chọn từ nhóm gồm có:

(i) alkylen, alkylen được thế, haloalkylen, haloalkylen được thế,  $-\text{Si}(\text{CH}_2)_g-$ , hoặc  $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$ , trong đó g cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 20; h cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ số nguyên từ 1 đến 16; và các phần tử thế của alkylen và haloalkylen được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có alkyl hoặc aryl;

(ii)  $-\text{N}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$ ,  $-\text{C}(\text{Z})=\text{N}-$ ,  $-\text{C}(\text{Z}')_2-\text{C}(\text{Z}')_2-$ ,  $-\text{N}(\text{Z})-\text{C}(\text{Z})_2-$ , và liên kết đơn, trong đó Z cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có hydro, alkyl, hoặc aryl, và Z' cho mỗi lần xuất hiện được chọn một cách độc lập từ nhóm gồm có alkyl hoặc aryl; hoặc

(iii)  $-\text{O}-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-$ ,  $-\text{C}\equiv\text{C}-$ ,  $-\text{N}=\text{N}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{S}(=\text{O})-$ ,  $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O}))-$ ,

$-(\text{O}=\text{S}(=\text{O}))\text{O}-$ ,  $-\text{O}(\text{O}=\text{S}(=\text{O}))\text{O}-$  và nhóm alkylen  $C_1-C_{24}$  mạch thẳng hoặc phân nhánh, nhóm alkylen  $C_1-C_{24}$  không được thế, được thế một lần bằng xyano hoặc halogen, hoặc được thế nhiều lần bằng halogen,

với điều kiện là khi hai đơn vị đệm chứa các dị nguyên tử được liên kết với nhau thì các đơn vị đệm này được liên kết sao cho các dị nguyên tử không được liên kết trực tiếp với nhau;

(c) P là hydro; và

(d)  $d'$ ,  $e'$  và  $f'$  được chọn một cách độc lập từ 0, 1, 2, 3 và 4, với điều kiện tổng của  $d' + e' + f'$  ít nhất là 1, các phần tử thế còn lại như được xác định trong điểm 4.

8. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 7, trong đó  $R^6$  là ở vị trí số 10 và là nhóm  $L^1$  kéo dài.

9. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 7 hoặc 8, trong đó  $R^5$  độc lập đối với mỗi  $m$  và  $R^6$  độc lập đối với mỗi  $n$ , mỗi một trong số chúng được chọn một cách độc lập từ halogen, alkyoxy, perhaloalkyl, và aryl được thế hoặc không được thế.

10. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 9, trong đó mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế aryl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, và mỗi phần tử thế heteroaryl, trong mỗi trường hợp được chọn một cách độc lập từ halogen, xyano, nitơ, alkyl, alkenyl, alkynyl, haloalkyl, perhaloalkyl, heteroxycloalkyl, aryl, heteroaryl, alkoxy, hydroxyl, alkylthio, xeton, anđehit, este, axit cacboxylic, cacboxylat, siloxan, alkoxysilan, polysiloxan, amit, amin, cacbamat, cacbonat, ure, nhóm polyeste, nhóm polyete, nhóm polycacbonat, nhóm polyuretan, nhóm acrylat, nhóm metacrylat, aryl amin, alkyl amin, các amino mạch vòng, các dị vòng thơm, hoặc sự kết hợp của chúng.

11. Naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm 10, trong đó mỗi phần tử thế alkyl, mỗi phần tử thế aryl, mỗi phần tử thế heteroxycloalkyl, và mỗi phần tử thế heteroaryl, trong mỗi trường hợp tiếp theo được thế một cách độc lập bởi nhóm acrylat hoặc metacrylat.

12. Chế phẩm quang sắc chứa naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 11.

13. Vật phẩm quang sắc có chứa naphtopyran ngưng tụ vòng indeno theo điểm bất kỳ trong số các điểm 1 đến 11, trong đó vật phẩm quang sắc này được chọn từ các vật phẩm nhãn khoa, vật phẩm hiển thị, cửa sổ, kính, vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng chủ động, hoặc vật phẩm cảm biến tinh thể lỏng thụ động; hoặc

trong đó vật phẩm quang sắc này được chọn từ các vật phẩm nhãn khoa, và các vật phẩm nhãn khoa này được chọn từ các thấu kính điều chỉnh, các thấu kính không điều chỉnh, kính áp tròng, kính nội nhãn, kính lúp, kính bảo vệ, hoặc kính che mắt; hoặc

trong đó vật phẩm quang sắc này được chọn từ các vật phẩm hiển thị, và các vật phẩm hiển thị này được chọn từ các màn hình, màn hiển thị, hoặc và các chi tiết an ninh.

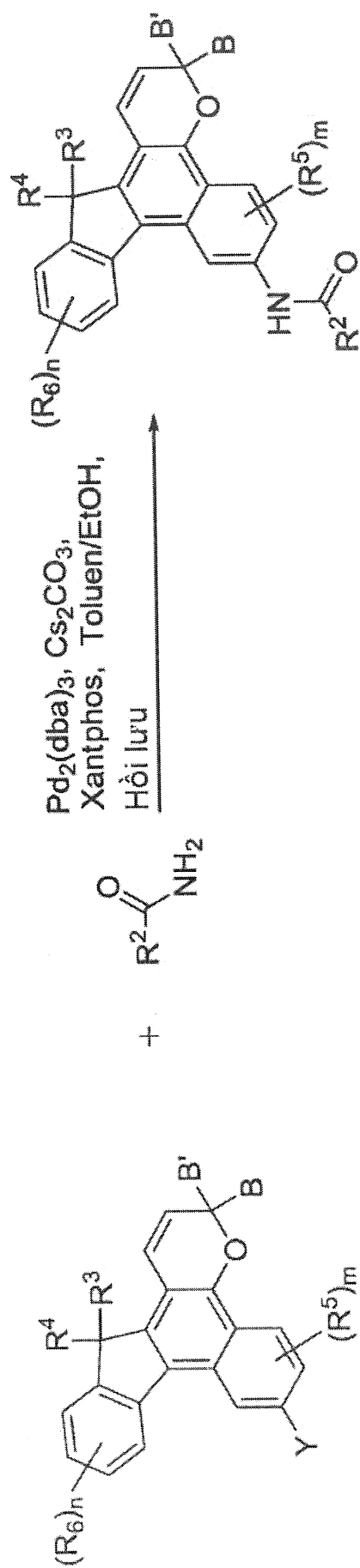


Fig. 1

Y = Br hoặc triflat

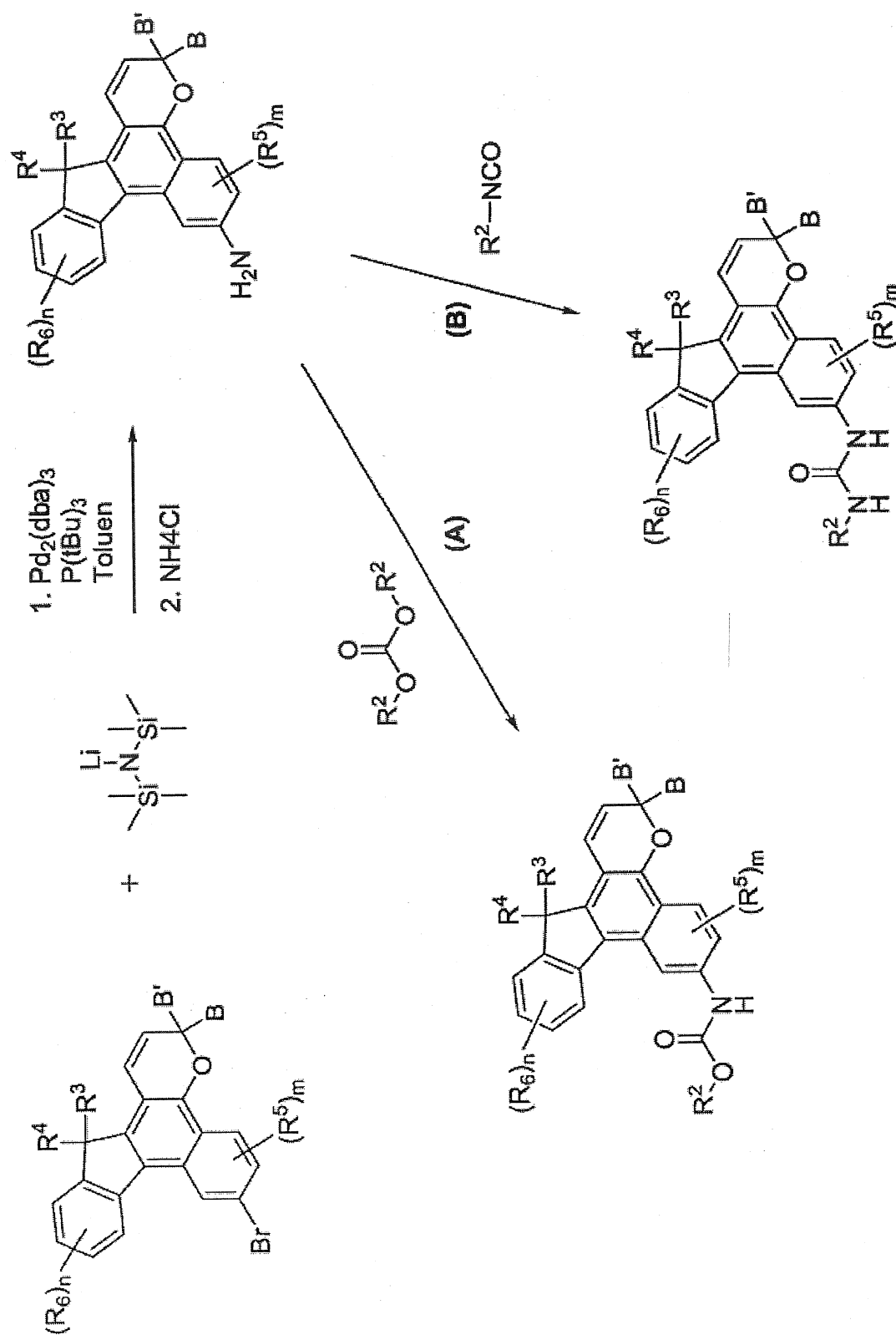


Fig. 2