



(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)



1-0043398

(51)^{2020.01} C09K 9/02; G02B 1/04; C08G 65/333

(13) B

(21) 1-2020-07528

(22) 18/07/2019

(86) PCT/JP2019/028358 18/07/2019

(87) WO 2020/017610 A1 23/01/2020

(30) 2018-136374 20/07/2018 JP

(45) 25/02/2025 443

(43) 26/04/2021 397A

(73) Tokuyama Corporation (JP)

1-1, Mikage-cho, Shunan-shi, Yamaguchi 745-8648 Japan

(72) NOGUCHI, Takao (JP); TAKENAKA, Junji (JP); MOMODA, Junji (JP);
KAWASAKI, Takayoshi (JP); SHIMIZU, Yasutomo (JP); MIYAZAKI, Masayuki
(JP).

(74) Công ty TNHH một thành viên Sở hữu trí tuệ VCCI (VCCI-IP CO.,LTD)

(54) HỢP CHẤT QUANG SẮC VÀ CHẾ PHẨM CÓ THỂ HÓA RẮN CHỨA HỢP
CHẤT QUANG SẮC NÀY

(21) 1-2020-07528

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất quang sắc (1) bao gồm gốc đa hóa trị (2) mà trên đó ít nhất một nhóm có gốc quang sắc (3) được thể, và ít nhất một nhóm mạch dài (4) không chứa gốc quang sắc và có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 được thể thêm; và chế phẩm có thể hóa rắn chứa hợp chất này. Theo sáng chế, có thể tạo ra hợp chất quang sắc có độ tan cao trong hợp chất có thể polyme hóa dùng làm nền trong khi giữ được các đặc tính quang sắc cao và hầu như không bị ảnh hưởng bởi nền; và chế phẩm có thể hóa rắn chứa hợp chất này.

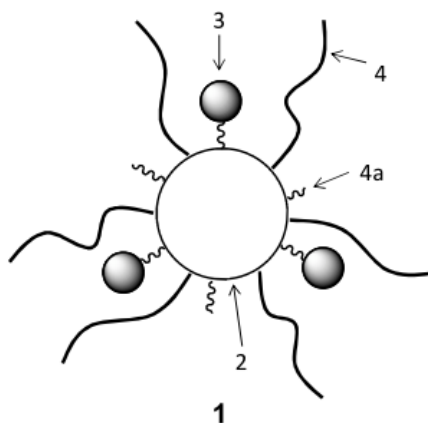


Fig.1

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất quang sắc mới và chế phẩm có thể hóa rắn chứa hợp chất quang sắc này.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Các hợp chất quang sắc tiêu biểu là các hợp chất naphtopyran, hợp chất fulgit, và hợp chất spirooxazin có đặc điểm đặc trưng (các đặc tính quang sắc) là chúng thay đổi màu sắc nhanh chóng khi tiếp xúc với ánh sáng bao gồm tia tử ngoại, như ánh sáng mặt trời và ánh sáng từ đèn thủy ngân, và trở lại màu sắc ban đầu của chúng khi chúng được đặt trong chỗ tối do ngừng tiếp xúc với ánh sáng và được sử dụng cho các mục đích khác nhau, đặc biệt là các vật liệu quang học, nhờ sử dụng đặc điểm đặc trưng này.

Ví dụ, các tròng kính đeo mắt quang sắc có các đặc tính quang sắc nhờ sử dụng hợp chất quang sắc hoạt động như kính râm, chúng nhanh chóng có màu ở ngoài trời nơi mà chúng được chiếu ánh sáng bao gồm tia tử ngoại, như ánh sáng mặt trời, và hoạt động như kính mắt trong suốt thông thường, chúng bị mất màu ở trong nhà nơi không có bức xạ, và ngày nay nhu cầu đối với tròng kính đeo mắt quang sắc ngày càng tăng.

Để tạo các đặc tính quang sắc cho vật liệu quang học, hợp chất quang sắc thường được sử dụng kết hợp với vật liệu chất dẻo. Cụ thể, các phương pháp sau đây là đã biết.

(a) phương pháp trong đó hợp chất quang sắc được hòa tan trong monome có thể polyme hóa, và dung dịch tạo ra được polyme hóa để đúc trực tiếp vật liệu quang học, như thấu kính. Phương pháp này được gọi là "phương pháp ngào trộn".

(b) phương pháp trong đó lớp nhựa chứa hợp chất quang sắc phân tán trong đó được tạo ra trên bề mặt của sản phẩm đúc chất dẻo, như thấu kính, bằng cách polyme hóa khi phủ hoặc đúc. Phương pháp này được gọi là "phương pháp tạo cấu trúc nhiều lớp".

(c) Phương pháp trong đó hai tấm quang học được liên kết với nhau bằng lớp kết dính được tạo thành từ nhựa kết dính chứa hợp chất quang sắc phân tán trong đó. Phương pháp này được gọi là "phương pháp kết dính".

Đối với các vật liệu quang học, như các sản phẩm quang học, có các đặc tính quang sắc được tạo cho nó, các đặc tính sau đây được yêu cầu thêm.

(I) Mức độ tạo màu ở phạm vi ánh sáng nhìn thấy trước khi tia tử ngoại được chiếu vào (sự tạo màu ban đầu) là thấp.

(II) Mức độ tạo màu khi tiếp xúc với tia tử ngoại (mật độ quang màu) là cao.

(III) Tốc độ từ khi ngừng chiếu tia tử ngoại tới thời điểm khi vật liệu này trở lại

trạng thái ban đầu của nó (tốc độ mất màu) là cao.

(IV) Độ bền lặp lại của chức năng thuận nghịch giữa hiện màu và mất màu là cao.

(V) Độ ổn định bảo quản là cao.

(VI) Vật liệu này cần dễ dàng đúc thành các hình dạng khác nhau.

(VII) Các đặc tính quang sắc được tạo ra mà không làm giảm độ bền cơ học.

Do đó, để sản xuất các vật liệu quang học có các đặc tính quang sắc bằng các phương pháp (a), (b) và (c) nêu trên, các đề xuất khác nhau đã được thực hiện để thỏa mãn các yêu cầu nêu trên.

Phương pháp ngào trộn nêu trên có ưu điểm là các thấu kính chất dẻo quang sắc có thể được sản xuất hàng loạt với chi phí thấp bằng cách sử dụng các khuôn thủy tinh. Hầu hết các thấu kính chất dẻo quang sắc hiện nay được sản xuất bằng phương pháp này (xem PTL 1 và PTL 2). Do độ bền là cần thiết đối với nền của thấu kính trong phương pháp ngào trộn thông thường, cần làm tăng độ bền cơ học của nhựa nền chứa hợp chất quang sắc phân tán trong đó. Do đó, khó phát triển các đặc tính quang sắc tuyệt vời. Tức là, do mức độ tự do của phân tử hợp chất quang sắc có trong nhựa nền trở nên thấp, phản ứng quang sắc thuận nghịch đôi khi bị kém đi.

Đối với phương pháp ngào trộn này, PTL 1 bộc lộ kỹ thuật bổ sung hợp chất quang sắc vào thành phần monome chứa monome isoxyanat và monome thiol. Ngoài ra, PTL 2 bộc lộ chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn chứa monome (met)acrylic cụ thể có thể polyme hóa và hợp chất quang sắc.

Tuy nhiên, mặc dù các thấu kính quang sắc được đúc bằng cách polyme hóa và hóa rắn các chế phẩm này có độ bền cơ học cao, vẫn cần cải thiện các đặc tính quang sắc, đặc biệt là tốc độ mất màu.

Trong khi đó, trong phương pháp tạo cấu trúc nhiều lớp và phương pháp kết dính, các đặc tính quang sắc được phát triển với lớp mỏng được tạo ra trên bề mặt của nền so với phương pháp ngào trộn nêu trên (ví dụ, xem PTL 3, PTL 4, và PTL 5). Do đó, để phát triển mật độ quang màu giống như của phương pháp ngào trộn, hợp chất quang sắc phải được hòa tan ở nồng độ cao. Trong trường hợp này, theo loại hợp chất quang sắc, có vấn đề xảy ra, như độ tan không thỏa mãn và hiện tượng kết tủa trong quá trình bảo quản. Ngoài ra, do lớp phát triển các đặc tính quang sắc là mỏng, hợp chất quang sắc đôi khi có độ bền kém.

PTL 3 bộc lộ rằng chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn được gắn vào thấu kính chất dẻo bằng cách phủ quay hoặc tương tự và được hóa rắn quang để tạo thành lớp phủ quang sắc (phương pháp tạo cấu trúc nhiều lớp này còn được gọi là "phương pháp phủ"). Ngoài ra, PTL 4 bộc lộ phương pháp trong đó khe hở được bảo đảm giữa thấu kính chất

dẻo và khuôn thủy tinh bằng cách sử dụng chi tiết, như đệm đàn hồi, băng dính nhảy áp lực, và đệm ngăn cách, và chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn được rót vào khe hở này và được polyme hóa và hóa rắn để tạo thành lớp quang sắc (sau đây còn được gọi là "phương pháp polyme hóa hai giai đoạn"). Ngoài ra, PTL 5 bộc lộ rằng tám nhiều lớp được sản xuất bằng cách liên kết các tấm cacbonat trong suốt với nhau bằng lớp kết dính là nhựa polyuretan chứa hợp chất quang sắc (phương pháp kết dính).

Tuy nhiên, trong tất cả các tài liệu PTL 3 đến PTL5, các đặc tính quang sắc cần được bộc lộ với lớp mỏng có hợp chất quang sắc được trộn trong đó. Do đó, trong trường hợp mà trong đó hợp chất quang sắc có độ tan thấp được sử dụng, mật độ quang màu có xu hướng trở nên thấp, và ngoài ra, cần cải thiện theo quan điểm độ bền của hợp chất quang sắc.

Ngoài ra, đối với các cải thiện nêu trên, chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn chứa hợp chất mới đang được nghiên cứu (xem PTL 6). PTL 6 bộc lộ chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn chứa hợp chất polyrotaxan. Hợp chất polyrotaxan này là hợp chất có cấu trúc phân tử hỗn hợp bao gồm phân tử trục và nhiều phân tử mạch vòng clathrat hóa phân tử trục. Trong PTL 6, sản phẩm hóa rắn có các đặc tính cơ học, khả năng đúc, mật độ quang màu, và tốc độ mất màu tuyệt vời đã thu được bằng cách trộn hợp chất quang sắc với hợp chất polyrotaxan. Trong PTL 6, như nêu trên, chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn tuyệt vời và sản phẩm hóa rắn tuyệt vời đã thu được bằng cách trộn hợp chất polyrotaxan.

Tuy nhiên, trong những năm gần đây, cần bộc lộ các đặc tính quang sắc tuyệt vời hơn về mật độ quang màu, tốc độ mất màu, v.v... Về cơ bản, mật độ quang màu và tốc độ mất màu có mối quan hệ đánh đổi, và do đó, không dễ dàng làm cho cả hai thông số này phù hợp với nhau. Tức là, các thông số này thường phụ thuộc vào sự kết hợp của các hợp chất có thể polyme hóa tạo thành nền, và theo công nghệ thông thường, có giới hạn bằng mọi cách.

Danh mục tài liệu viện dẫn

Tài liệu sáng chế

PTL 1: WO 2012/176439 A

PTL 2: WO 2009/075388 A

PTL 3: WO 2011/125956 A

PTL 4: WO 2003/011967 A

PTL 5: WO 2013/099640 A

PTL 6: WO 2015/068798 A

PTL 7: WO 2004/041961 A

PTL 8: WO 2000/015630 A

PTL 9: WO 2009/146509 A

PTL 10: WO 2012/149599 A

PTL 11: WO 2012/162725 A

PTL 12: WO 2013/078086 A

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Vấn đề kỹ thuật cần giải quyết

Ngoài việc kết hợp các hợp chất có thể polyme hóa tạo thành nền này, đối với việc điều chỉnh cấu trúc của chính hợp chất quang sắc, các nghiên cứu khác nhau đã được thực hiện. Ví dụ, để làm tăng đáng kể tốc độ mất màu, hợp chất quang sắc có khả năng được bao nang nano được đề xuất. Cụ thể, các hợp chất quang sắc có nhóm mạch oligome polyalkylen oxit hoặc nhóm mạch oligome polysiloxan được đề xuất (xem các tài liệu PTL 7 và PTL 8). Ngoài ra, các hợp chất quang sắc có ít nhất hai gốc quang sắc cũng được bộc lộ (xem các tài liệu PTL 9 đến PTL 12). Theo các phương pháp này, có thể đạt được sự bao nang nano, và nồng độ thuốc nhuộm có thể được tăng lên.

Tuy nhiên, theo các nghiên cứu được thực hiện bởi các tác giả sáng chế, ngay cả trong các hợp chất thông thường này, để đáp ứng các đặc tính quang sắc ở mức cao được yêu cầu gần đây, cần các cải thiện hơn nữa. Cụ thể, khó làm giảm đến mức tối thiểu sự phụ thuộc vào nền và làm tăng hơn nữa tốc độ mất màu.

Do điều nêu trên, ngay cả trong phương pháp thông thường để điều chỉnh cấu trúc của chính hợp chất quang sắc, cần cải thiện theo quan điểm là độ tan trong hợp chất có thể polyme hóa tạo thành nền là có vấn đề, và các đặc tính quang sắc là không đủ.

Do đó, mục đích của sáng chế là đề xuất hợp chất quang sắc có độ tan cao trong hợp chất có thể polyme hóa dùng làm nền trong khi giữ được các đặc tính quang sắc cao và hầu như không bị ảnh hưởng bởi nền; và chế phẩm có thể hóa rắn chứa hợp chất này.

Cách thức giải quyết vấn đề

Để giải quyết vấn đề nêu trên, các tác giả sáng chế đã thực hiện các nghiên cứu rộng và sâu. Do đó, họ đã tổng hợp được các hợp chất quang sắc có các cấu trúc khác nhau. Do đó, họ cho rằng các hợp chất quang sắc có đồng thời nhóm có gốc quang sắc và nhóm thế mạch dài không chứa gốc quang sắc nêu trên có thể cải thiện tính tương hợp với hợp chất có thể polyme hóa tạo thành nền, nhờ nhóm thế mạch dài, và khoảng không tự do mà ở đó gốc quang sắc có thể được phản ứng thuận nghịch có thể được tạo ra trong nền.

Do đó, nhằm mục đích khắc phục vấn đề nêu trên, các tác giả sáng chế đã thực hiện các nghiên cứu. Kết quả là, đã phát hiện được rằng bằng cách bố trí nhóm mạch dài không liên kết với gốc quang sắc ở vùng lân cận của gốc quang sắc, các đặc tính quang

sắc có thể được biểu hiện ở mức tối đa, bằng cách đó dẫn đến hoàn thành sáng chế.

Cụ thể, khía cạnh thứ nhất của sáng chế liên quan đến hợp chất quang sắc bao gồm

gốc đa hóa trị mà trên đó

ít nhất một nhóm có gốc quang sắc được thế, và

ít nhất một nhóm mạch dài không chứa gốc quang sắc và có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 được thế thêm. Trọng lượng phân tử của nhóm mạch dài này là trọng lượng phân tử trung bình số.

Khía cạnh thứ hai của sáng chế liên quan đến chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn chứa hợp chất quang sắc theo khía cạnh thứ nhất của sáng chế và hợp chất có thể polyme hóa.

Khía cạnh thứ ba của sáng chế liên quan đến sản phẩm quang sắc hóa rắn thu được bằng cách hóa rắn chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn theo khía cạnh thứ hai của sáng chế.

Hiệu quả của sáng chế

Hợp chất quang sắc theo sáng chế có các đặc tính quang sắc tuyệt vời. Ngoài ra, ngay cả trong trường hợp chứa hợp chất quang sắc và hợp chất có thể polyme hóa nêu trên, sản phẩm hóa rắn bộc lộ các đặc tính quang sắc tuyệt vời về mật độ quang màu và tốc độ mất màu có thể thu được.

Mô tả vắn tắt hình vẽ

Fig.1 là sơ đồ thể hiện cấu trúc phân tử của hợp chất quang sắc theo sáng chế.

Mô tả chi tiết sáng chế

Sáng chế liên quan đến hợp chất quang sắc bao gồm:

gốc đa hóa trị mà trên đó

ít nhất một nhóm có gốc quang sắc được thế, và

ít nhất một nhóm mạch dài không chứa gốc quang sắc và có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 được thế thêm.

Các chi tiết của nó được mô tả sau đây.

Gốc đa hóa trị

Theo sáng chế, gốc đa hóa trị phải là gốc mà trên đó ít nhất một nhóm có gốc quang sắc được thế, và

ít nhất một nhóm mạch dài không chứa gốc quang sắc và có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 được thế thêm. Do đó, gốc đa hóa trị phải là nhóm có hóa trị hai hoặc hóa trị cao hơn.

Gốc đa hóa trị có thể là gốc bất kỳ trong số gốc hữu cơ và gốc vô cơ. Tức là,

gốc đa hóa trị có thể là gốc hữu cơ hoặc có thể là gốc vô cơ miễn là gốc này ít nhất là nhóm có hóa trị hai hoặc hóa trị cao hơn có nhóm mạch dài (với điều kiện là gốc này không có gốc quang sắc) và nhóm có gốc quang sắc. Gốc đa hóa trị này có thể được tạo bởi hợp chất có vị trí mà nhiều nhóm thế có thể được đưa vào đó (ví dụ, hợp chất có nhiều nhóm phản ứng, như nhóm hydroxy, hoặc hợp chất có nhiều vị trí mà nhóm thế có thể được bổ sung vào vòng benzen, như nhóm phenyl; sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "hợp chất hoặc chất tạo thành gốc đa hóa trị").

Tốt hơn nếu hợp chất hoặc chất tạo thành gốc đa hóa trị có kích thước ở mức nào đó. Tức là, khi tính đến năng suất của chính hợp chất quang sắc, khi nhóm mạch dài này là quá gần vị trí mà nhóm có gốc quang sắc được đưa vào, sự cản trở không gian có mặt, nên hợp chất quang sắc không thể được tạo ra với năng suất. Do đó, đối với hợp chất hoặc chất tạo thành gốc đa hóa trị mà được sử dụng theo sáng chế, tốt hơn nếu sử dụng hợp chất có khả năng tạo thành gốc hữu cơ và/hoặc chất tạo thành gốc vô cơ như được mô tả dưới đây.

Hợp chất tạo thành gốc hữu cơ

Trước hết, gốc hữu cơ được mô tả. Các ví dụ về gốc hữu cơ bao gồm hợp chất phân tử mạch vòng mà nhóm thế có thể được đưa vào. Miễn là hợp chất này là phân tử mạch vòng, nó có kích thước ở mức nào đó, và do đó, dễ dàng đưa nhóm có gốc quang sắc và nhóm mạch dài vào. Các ví dụ về phân tử mạch vòng này bao gồm cyclodextrin, ete crao, benzo-crao, dibenzo-crao, và dicyclohexano-crao. Trong số các hợp chất này, cyclodextrin có kích thước thích hợp là được đặc biệt ưu tiên.

Cyclodextrin là oligosacarit mạch vòng trong đó đơn vị glucoza được liên kết ở vị trí α -1,4 và có ba nhóm hydroxy (nhóm OH) cho một đơn vị glucoza. Các ví dụ về chúng bao gồm thể α (số đơn vị glucoza: 6, tổng số nhóm hydroxy: 18), thể β (số đơn vị glucoza: 7, tổng số nhóm hydroxy: 21), và thể γ (số đơn vị glucoza: 8, tổng số nhóm hydroxy: 24). Trong trường hợp cyclodextrin, số lượng nhóm hydroxy mà là nhóm phản ứng (tổng số nhóm hydroxy) trùng với tổng hóa trị của gốc đa hóa trị. Trên tất cả, theo sáng chế, α -cyclodextrin (thể α) hoặc β -cyclodextrin (thể β) là được ưu tiên, và α -cyclodextrin là được ưu tiên nhất.

Ngoài ra, các ví dụ về gốc hữu cơ bao gồm các nhóm sau. Các ví dụ về chúng bao gồm axit oligocarboxylic, như cyclophan, calixaren, oligoresolxinol, cucurbituril, tribenzoxyclononen, và axit xitric, axit polycarboxylic, như axit polyacrylic, oligoamin, như tris-2-aminoethylamin, polyamin, như spermin, polyol, như pentaerytritol, axit nucleic, oligopeptit (mạch vòng), protein axit hoặc bazơ, disacarit hoặc oligosacarit cao hơn, xycloamyloza, nanoxenluloza, oligo hoặc polyphenol, như lignin, porphyrin, phtaloxyanin, và phức chất kim loại của nó, và nanocacbon, như fuleren, ống nano

cacbon, graphen, và graphen oxit.

Chất tạo gốc vô cơ

Theo sáng chế, gốc vô cơ cũng có thể được sử dụng. Các ví dụ về chúng bao gồm silsesquioxan, perovskit, axit oligophosphoric hoặc axit polyphosphoric, như axit diphosphoric và axit triphosphoric, hạt nano kim loại (oxit), như vàng, titan oxit, và kẽm oxit, và polyoxometalat, như axit phosphomolybdic và axit phosphovanframit.

Gốc được ưu tiên (hợp chất (chất) có khả năng tạo thành gốc được ưu tiên)

Theo sáng chế, cyclodextrin, oligopeptit, axit oligophosphoric, axit polyphosphoric, silsesquioxan, hoặc hạt nano kim loại (oxit) được ví dụ làm hợp chất (chất) có khả năng tạo thành gốc được ưu tiên.

Theo sáng chế, để không chỉ giữ được các đặc tính quang sắc ở mức cao mà còn cải thiện độ tan trong hợp chất có thể polyme hóa,

tốt hơn nếu sử dụng gốc (hợp chất (chất)) đa hóa trị có khả năng thỏa mãn yêu cầu là tổng số của nhóm có gốc quang sắc và số lượng nhóm mạch dài có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 cho một phân tử hợp chất quang sắc nằm trong khoảng từ 2 đến 30.

Miễn là mỗi hợp chất quang sắc theo sáng chế có một nhóm trong số nhóm có gốc quang sắc và nhóm mạch dài có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300, nhóm khác không phải các nhóm nêu trên có thể được thể trên hợp chất (chất) tạo thành gốc đa hóa trị. Nhóm khác này là nhóm không có gốc quang sắc và có trọng lượng phân tử nhỏ hơn 300. Tức là, gốc đa hóa trị có thể có nhóm có gốc quang sắc, nhóm mạch dài có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "nhóm mạch dài"), nhóm có trọng lượng phân tử nhỏ hơn 300 (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "nhóm mạch ngắn"), và vị trí phản ứng còn nguyên mà không được thế. Tổng hóa trị của gốc đa hóa trị này trùng với tổng số của số lượng nhóm có gốc quang sắc, số lượng nhóm mạch dài, số lượng nhóm mạch ngắn, và số lượng vị trí phản ứng còn nguyên mà không được thế. Mặc dù giới hạn dưới của trọng lượng phân tử của nhóm mạch ngắn là không bị giới hạn cụ thể, giới hạn này là bằng 10.

Do đó, đối với gốc đa hóa trị, mặc dù hóa trị của nhóm đa hóa trị là không bị giới hạn cụ thể miễn là hóa trị hai hoặc hóa trị cao hơn, nhóm có hóa trị ba hoặc hóa trị cao hơn là được ưu tiên, nhóm có hóa trị bốn hoặc hóa trị cao hơn là được ưu tiên hơn nữa, và nhóm có hóa trị sáu hoặc hóa trị cao hơn còn được ưu tiên hơn nữa.

Mặt khác, giới hạn trên của hóa trị là không bị giới hạn cụ thể. Theo sáng chế, tốt hơn nếu tổng số lượng của nhóm có gốc quang sắc và số lượng nhóm mạch dài cho một phân tử hợp chất quang sắc có thể thỏa mãn khoảng từ 2 đến 30, và do đó, giới hạn trên của hóa trị có thể là 30 hoặc cao hơn, và tốt hơn nếu 40 là giới hạn trên của hóa trị.

Trên tất cả, để làm tăng năng suất của hợp chất quang sắc (để ngăn chặn phản ứng phụ và để nâng cao hiệu quả sản xuất), tốt hơn nếu giới hạn trên của hóa trị của gốc đa hóa trị là 20. Tất nhiên là, trong trường hợp mà trong đó giới hạn trên của hóa trị của gốc đa hóa trị là 20, tổng số lượng của nhóm có gốc quang sắc và số lượng nhóm mạch dài là bằng hoặc lớn hơn 2 và bằng hoặc nhỏ hơn 20.

Tốt hơn nếu hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị này là α -cyclodextrin.

Nhóm có gốc quang sắc

Như được minh họa trên Fig.1, trong hợp chất quang sắc theo sáng chế, được biểu diễn chung là "1", nhóm chứa gốc quang sắc "3" được đưa vào gốc đa hóa trị "2". Ngoài ra, nhóm mạch dài có trọng lượng phân tử (trọng lượng phân tử trung bình số) lớn hơn hoặc bằng 300 được đưa thêm vào gốc đa hóa trị. Trên Fig.1, nhóm mạch dài này được biểu diễn là "4".

Theo sáng chế, mặc dù nhóm có gốc quang sắc có thể được liên kết trực tiếp với gốc đa hóa trị, tốt hơn nếu gốc quang sắc được liên kết ở trạng thái mà vẫn còn khoảng không ở mức độ nào đó. Do đó, trạng thái mà mạch bên (sau đây đôi khi được gọi là "mạch bên thứ nhất") xen vào giữa gốc đa hóa trị và gốc quang sắc là được ưu tiên. Nhóm có mạch bên này (mạch bên thứ nhất) được biểu diễn là "4a" trên Fig.1. Mặc dù không được minh họa, có thể có trường hợp mà trong đó vị trí phản ứng ("nhóm phản ứng, v.v., của gốc đa hóa trị" như nêu sau đây) có mặt.

Mạch bên liên kết gốc quang sắc và gốc đa hóa trị

Bằng cách đưa mạch bên "4a" này (mạch bên thứ nhất "4a") vào gốc quang sắc, khoảng không thích hợp chắc chắn có thể được tạo ra giữa các phân tử liên kề nhau. Do đó, khoảng hở cho phép cho phản ứng thuận nghịch của phân tử hợp chất quang sắc có thể chắc chắn được đảm bảo, và do đó, có thể cho rằng các đặc tính quang sắc tuyệt vời hơn có thể được bộc lộ.

Mặc dù mạch bên là không bị giới hạn cụ thể, trọng lượng phân tử trung bình số của mạch bên này tốt hơn là nằm trong khoảng từ 45 đến 10000, tốt hơn nữa là từ 60 đến 8000, còn tốt hơn nữa là từ 100 đến 5000, và đặc biệt tốt hơn là từ 100 đến 2000. Mạch bên này trở thành nhóm có gốc quang sắc miễn là gốc quang sắc được đưa vào. Trọng lượng phân tử trung bình số của mạch bên này có thể được điều chỉnh bằng lượng hợp chất cần sử dụng trong quá trình đưa mạch bên vào. Cần lưu ý rằng trọng lượng phân tử của gốc quang sắc không được bao gồm trong trọng lượng phân tử trung bình số của mạch bên. Ngoài ra, nhóm không có gốc quang sắc được đưa vào đó và có trọng lượng phân tử trung bình số lớn hơn hoặc bằng 300 là tương ứng với nhóm mạch dài, và nhóm có trọng lượng phân tử trung bình số nhỏ hơn 300 là tương ứng với nhóm mạch ngắn.

Khi mạch bên là quá nhỏ, chức năng đảm bảo khoảng hở cho phép cho phản ứng thuận nghịch của gốc quang sắc trở nên không đủ, trong khi khi mạch bên là quá lớn, sẽ khó đặt gốc quang sắc ở vùng lân cận của nhóm mạch dài này như nêu sau đây, và cuối cùng, có xu hướng là sẽ khó tận dụng hết khoảng không được bảo đảm bởi nhóm mạch dài.

Mạch bên nêu trên có thể được đưa vào bằng cách sử dụng nhóm phản ứng hoặc vị trí phản ứng của gốc đa hóa trị (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "nhóm phản ứng, v.v., của gốc đa hóa trị"). Theo sáng chế, để có đủ chức năng nêu trên của mạch bên, tốt hơn nếu 6% hoặc cao hơn, đặc biệt là 10% hoặc cao hơn của tổng hóa trị của gốc đa hóa trị được thế bằng mạch bên. Ví dụ, trong trường hợp sử dụng α -cyclodextrin làm hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị, hợp chất này có 18 nhóm hydroxy làm nhóm phản ứng, và mạch bên được đưa vào thông qua nhóm hydroxy này. Tức là, có thể đưa tối đa 18 mạch bên vào so với một hợp chất α -cyclodextrin. Theo sáng chế, để có đủ chức năng nêu trên của mạch bên, tốt hơn nếu 6% hoặc cao hơn, đặc biệt là 10% hoặc cao hơn của tổng số nhóm phản ứng (tổng hóa trị) của vòng này được cải biến bằng mạch bên. Giới hạn trên của tỷ lệ cải biến bằng mạch bên (đưa mạch bên vào) thay đổi theo hợp chất cần sử dụng, và do đó, mặc dù không bị giới hạn cụ thể, giới hạn trên này là 90%. Bất ngờ là, trong trường hợp mà trong đó mạch bên được liên kết với 9 trong số 18 nhóm hydroxy của α -cyclodextrin, mức độ cải biến của nó là 50%. Tất nhiên là, phần còn lại là nhóm hydroxy còn nguyên. Trong trường hợp α -cyclodextrin, giới hạn trên của mức độ cải biến tốt hơn là 75%.

Theo sáng chế, mạch bên (mạch hữu cơ) nêu trên có thể là mạch thẳng hoặc có thể là mạch nhánh, miễn là kích thước của nó nằm trong khoảng nêu trên. Mạch bên có kích thước thích hợp có thể được đưa vào bằng cách cho hợp chất thích hợp phản ứng với hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị (phản ứng với "nhóm phản ứng, v.v., của gốc đa hóa trị") trong khi sử dụng phương pháp polyme hóa mở vòng; polyme hóa gốc; polyme hóa cation; polyme hóa anion; polyme hóa gốc sống (living radical polymerization), như polyme hóa gốc chuyển nguyên tử, polyme hóa RAFT, và polyme hóa NMP; hoặc tương tự. Ở đầu cuối của mạch bên được tạo bởi quá trình polyme hóa hoặc tương tự, mạch bên có thể được kéo dài trong khi sử dụng các phản ứng đã biết khác nhau, hoặc gốc quang sắc có thể được đưa vào như được nêu chi tiết dưới đây. Tuy nhiên, gốc quang sắc cũng có thể được liên kết trực tiếp với mạch bên nêu trên. Đối với mạch bên được tạo ra thông qua quá trình polyme hóa hoặc tương tự, hoặc mạch bên được kéo dài bằng cách sử dụng các phản ứng khác nhau, như nêu trên, trọng lượng phân tử trung bình số không tính gốc quang sắc tốt nhất là nằm trong khoảng từ 100 đến 2000.

Ví dụ, mạch bên thu được từ hợp chất mạch vòng, như ete mạch vòng, siloxan

mạch vòng, hợp chất lacton, axetal mạch vòng, amin mạch vòng, cacbonat mạch vòng, imino ete mạch vòng, và thiocacbonat mạch vòng, có thể được đưa vào thông qua phương pháp polyme hóa mở vòng. Trong số này, theo quan điểm dễ kiểm, khả năng phản ứng cao, và dễ dàng điều chỉnh kích thước (trọng lượng phân tử), tốt hơn là ete mạch vòng, siloxan mạch vòng, hợp chất lacton, hoặc cacbonat mạch vòng được sử dụng. Các ví dụ cụ thể về hợp chất mạch vòng được ưu tiên là như sau.

Ete mạch vòng:

Etylen oxit, 1,2-propylen oxit, epiclohydrin, epibromohydrin, 1,2-butylen oxit, 2,3-butylen oxit, isobutylen oxit, oxetan, 3-metyloxetan, 3,3-dimetyloxetan, tetrahydrofuran, 2-metyl tetrahydrofuran, và 3-metyl tetrahydrofuran

Siloxan mạch vòng:

Hexametyl xyclotrisiloxan và octametyl xyclotetrasiloxan

Hợp chất lacton:

các lacton vòng 4 cạnh, như β -propiolacton, β -metyl propiolacton, và L-serin- β -lacton;

các lacton vòng 5 cạnh, như γ -butyrolacton, γ -hexanolacton, γ -heptanolacton, γ -octanolacton, γ -decanolacton, γ -dodecanolacton, α -hexyl- γ -butyrolacton, α -heptyl- γ -butyrolacton, α -hydroxy- γ -butyrolacton, γ -metyl- γ -decanolacton, α -metylen- γ -butyrolacton, α,α -dimetyl- γ -butyrolacton, D-erytronolacton, α -metyl- γ -butyrolacton, γ -nonanolacton, DL-pantolacton, γ -phenyl- γ -butyrolacton, γ -undecanolacton, γ -valerolacton, 2,2-pentametylen-1,3-dioxolan-4-on, α -bromo- γ -butyrolacton, γ -crotonolacton, α -metylen- γ -butyrolacton, α -metacryloyloxy- γ -butyrolacton, và β -metacryloyloxy- γ -butyrolacton;

các lacton vòng 6 cạnh, như δ -valerolacton, δ -hexanolacton, δ -octanolacton, δ -nonanolacton, δ -decanolacton, δ -undecanolacton, δ -dodecanolacton, δ -tridecanolacton, δ -tetradecanolacton, DL-mevalonolacton, δ -lacton axit 4-hydroxy-1-xyclohexan carboxylic, monometyl- δ -valerolacton, monoetyl- δ -valerolacton, monohexyl- δ -valerolacton, 1,4-dioxan-2-on, và 1,5-dioxepan-2-on;

các lacton vòng 7 cạnh, như ϵ -caprolacton, monometyl- ϵ -caprolacton, monoetyl- ϵ -caprolacton, monohexyl- ϵ -caprolacton, dimetyl- ϵ -caprolacton, di-n-propyl- ϵ -caprolacton, di-n-hexyl- ϵ -caprolacton, trimetyl- ϵ -caprolacton, trietyl- ϵ -caprolacton, tri-n- ϵ -caprolacton, ϵ -caprolacton, 5-nonyl-oxepan-2-on, 4,4,6-trimetyl-oxepan-2-on, 4,6,6-trimetyl-oxepan-2-on, và 5-hydroxymetyl-oxepan-2-on;

các lacton vòng 8 cạnh, như ξ -enantolacton;

các lacton khác, như lacton, lactit, dilactit, tetrametyl glycosit, 1,5-dioxepan-2-on, và t-butyl caprolacton.

Cacbonat mạch vòng:

etylen cacbonat, propylen cacbonat, 1,2-butylen cacbonat, glyxerol 1,2-cacbonat, 4-(metoxymetyl)-1,3-dioxolan-2-on, (clometyl)etylen cacbonat, vinylen cacbonat, 4,5-dimetyl-1,3-dioxol-2-on, 4-clometyl-5-metyl-1,3-dioxol-2-on, 4-vinyl-1,3-dioxolan-2-on, 4,5-diphenyl-1,3-dioxolan-2-on, 4,4-dimetyl-5-metylen-1,3-dioxolan-2-on, 1,3-dioxan-2-on, 5-metyl-5-propyl-1,3-dioxolan-2-on, và 5,5-dietyl-1,3-dioxolan-2-on.

Các hợp chất mạch vòng nêu trên có thể được sử dụng một mình hoặc có thể được sử dụng kết hợp hai hoặc nhiều hợp chất trong số chúng.

Theo sáng chế, tốt hơn nếu các hợp chất lacton và cacbonat mạch vòng được sử dụng, và trong số này, các hợp chất lacton, như ϵ -caprolacton, α -axetyl- γ -butyrolacton, α -metyl- γ -butyrolacton, γ -valerolacton, và γ -butyrolacton là được đặc biệt ưu tiên, và ϵ -caprolacton là được ưu tiên nhất.

Trong trường hợp cho hợp chất mạch vòng phản ứng thông qua phương pháp polyme hóa mở vòng để đưa mạch bên vào, nhóm phản ứng, v.v., của gốc đa hóa trị (ví dụ, nhóm hydroxy của xyclodextrin) có khả năng phản ứng kém, nên cụ thể là đôi khi khó phản ứng trực tiếp với phân tử lớn do sự cản trở không gian hoặc tương tự. Trong trường hợp này, có thể sử dụng biện pháp trong đó, để phản ứng với caprolacton v.v., hợp chất có trọng lượng phân tử thấp, như propylen oxit, trước hết được cho phản ứng với nhóm chức để thực hiện quá trình hydroxypropyl hóa, bằng cách đó đưa nhóm chức (nhóm hydroxy) có khả năng phản ứng cao vào, và sau đó, mạch bên được đưa vào bằng phản ứng polyme hóa mở vòng bằng cách sử dụng hợp chất mạch vòng nêu trên. Mạch bên được tạo bởi phản ứng polyme hóa mở vòng hợp chất có trọng lượng phân tử thấp, như propylen oxit, và sau đây hợp chất mạch vòng này đôi khi được gọi là "mạch bên thứ nhất" (như nêu trên, "4a" trên Fig.1 là tương ứng với mạch bên thứ nhất này).

Trong hợp chất quang sắc theo sáng chế, nhóm chứa gốc quang sắc được liên kết với gốc đa hóa trị (tốt hơn nếu gốc quang sắc được liên kết thông qua mạch bên). Trên gốc đa hóa trị này, nhóm mạch dài có trọng lượng phân tử (trọng lượng phân tử trung bình số) lớn hơn hoặc bằng 300 được thể mà không có ngoại lệ. Theo cách này, nhóm mạch dài nêu trên có thể luôn luôn được bố trí ở vùng lân cận của gốc quang sắc, và do đó, khoảng không tự do cho phép cho phản ứng thuận nghịch của gốc quang sắc có thể được đảm bảo. Do đó, có thể cho rằng ngay cả trong khi được kết hợp với hợp chất có thể polyme hóa, tốc độ mất màu có thể làm cho nhanh trong khi giữ được mật độ quang màu cao.

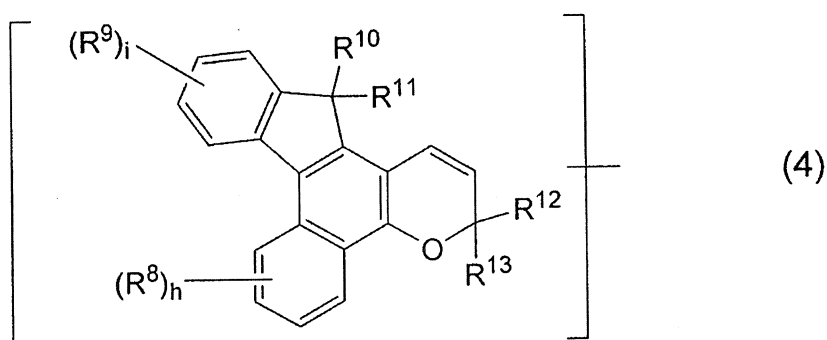
Gốc quang sắc có thể được liên kết với gốc đa hóa trị bằng cách sử dụng mạch bên nêu trên và tùy ý, kết hợp thêm nhóm liên kết L. Tức là, bằng cách cho mạch bên

thứ nhất phản ứng với gốc quang sắc có nhóm liên kết L để liên kết mạch bên thứ nhất với nhóm liên kết L, mạch (nhóm) chứa gốc quang sắc có thể được đưa vào hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị nêu trên. Trong trường hợp này, "mạch" nêu trên chứa phần thu được từ phản ứng của "mạch bên thứ nhất và nhóm liên kết L" để trở thành mạch chứa phần gồm mạch bên thứ nhất và nhóm liên kết L. Như nêu trên, "mạch" nêu trên là tương ứng với mạch bên nêu trên. Tuy nhiên, như nêu trên, gốc quang sắc có thể được liên kết trực tiếp với mạch bên thứ nhất, và trong trường hợp này, mạch bên thứ nhất có thể được cho là "mạch" nêu trên, nhờ đó "mạch" nêu trên trở thành mạch bên (mạch bên thứ nhất là mạch bên).

Để làm gốc quang sắc, các gốc đã biết có thể được sử dụng, và các gốc này có thể được sử dụng một mình hoặc có thể được sử dụng kết hợp hai hoặc nhiều gốc trong số chúng.

Các ví dụ điển hình về gốc quang sắc bao gồm naphthopyran, spirooxazin, spiropyran, fulgit, fulgimit, và diaryleten. Trên tất cả, trong trường hợp mà trong đó gốc quang sắc là naphthopyran, spirooxazin, hoặc spiropyran, trong đó một phần của phân tử được phân cắt do tia tử ngoại để gây ra sự phát triển màu, và vị trí được phân cắt này được kết hợp lại để gây ra sự mất màu, và trong đó sự có mặt của khoảng không tự do (mức độ tự do của phân tử) không ngăn cản sự chuyển động của phân tử trong trường hợp xảy ra sự phân cắt và kết hợp lại là quan trọng, hiệu quả tuyệt vời đã đạt được. Cụ thể, trong số này, theo quan điểm là các đặc tính quang sắc tuyệt vời liên quan đến mật độ quang màu và tốc độ mất màu có thể được bộc lộ, indenonaphthopyran là được ưu tiên, và indeno[2,1-f]naphto[1,2-b]pyran là được đặc biệt ưu tiên.

Indeno[2,1-f]naphto[1,2-b]pyran được ví dụ làm gốc quang sắc được đặc biệt ưu tiên được thể hiện bằng công thức (4) sau đây:



trong đó,

mỗi nhóm R^8 và R^9 độc lập là nhóm được liên kết trực tiếp với L như nêu sau đây, nhóm hydroxy, nhóm alkyl, nhóm haloalkyl, nhóm xycloalkyl mà có thể có nhóm thế, nhóm alkoxy, nhóm amino (nhóm bao gồm amin bậc nhất hoặc bậc hai), nhóm dị vòng có nguyên tử nitơ làm thành viên của vòng và được liên kết với nguyên tử cacbon

bằng nguyên tử nitơ được liên kết với nó (miễn là nó có thể có nhóm thế), nhóm xyano, nhóm nitro, nhóm formyl, nhóm hydroxycarbonyl, nhóm alkylcarbonyl, nhóm alkoxy carbonyl, nguyên tử halogen, nhóm aralkyl mà có thể có nhóm thế, nhóm aralkoxy mà có thể có nhóm thế, nhóm aryloxy mà có thể có nhóm thế, nhóm aryl mà có thể có nhóm thế, nhóm alkylthio, nhóm xycloalkylthio, hoặc nhóm arylthio mà có thể có nhóm thế, và

hai nhóm R^8 liên kề và hai nhóm R^9 liên kề có thể độc lập tạo thành vòng béo (vòng này có thể có nhóm thế), vòng này có thể chứa nguyên tử oxy, nguyên tử nitơ, hoặc nguyên tử lưu huỳnh;

mỗi nhóm R^{10} và R^{11} độc lập là nhóm được liên kết trực tiếp với L như nêu sau đây, nguyên tử hydro, nhóm hydroxy, nhóm alkyl, nhóm haloalkyl, nhóm xycloalkyl, nhóm alkoxy, nhóm alkoxyalkyl, nhóm formyl, nhóm hydroxycarbonyl, nhóm alkylcarbonyl, nhóm alkoxy carbonyl, nguyên tử halogen, nhóm aralkyl mà có thể có nhóm thế, nhóm aralkoxy mà có thể có nhóm thế, nhóm aryloxy mà có thể có nhóm thế, hoặc nhóm aryl mà có thể có nhóm thế, và

R^{10} và R^{11} có thể cùng nhau tạo thành vòng béo có 3 đến 20 nguyên tử cacbon làm thành viên của vòng, vòng đa vòng ngưng tụ thu được bằng cách ngưng tụ vòng thơm hoặc dị vòng thơm với vòng béo, vòng dị vòng có 3 đến 20 nguyên tử là thành viên của vòng, hoặc vòng đa vòng ngưng tụ thu được bằng cách ngưng tụ vòng thơm hoặc vòng dị vòng thơm với vòng dị vòng cùng với nguyên tử cacbon ở vị trí 13 được liên kết với nó, với điều kiện là các vòng này có thể có nhóm thế;

mỗi nhóm R^{12} và R^{13} độc lập là nhóm aryl mà có thể có nhóm thế hoặc nhóm heteroaryl mà có thể có nhóm thế;

h là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 4;

i là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 4;

khi h nằm trong khoảng từ 2 đến 4, thì các nhóm R^8 có thể là giống nhau hoặc khác nhau; và

khi i nằm trong khoảng từ 2 đến 4, thì các nhóm R^9 có thể là giống nhau hoặc khác nhau,

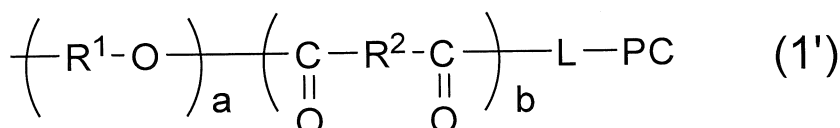
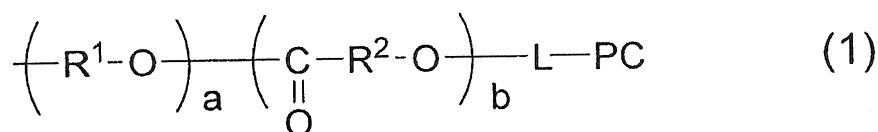
với điều kiện là ít nhất một nhóm thế trên nhóm aryl hoặc nhóm heteroaryl được thể hiện bằng R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} , và R^{12} , hoặc ít nhất một nhóm thế trên nhóm aryl hoặc nhóm heteroaryl được thể hiện bằng R^{13} là nhóm thế L như nêu sau đây.

Các nhóm được thể hiện bằng R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} , R^{12} , và R^{13} , hoặc các nhóm thế có thể có của các nhóm vòng tạo bởi các nhóm này được đưa vào để chủ yếu kiểm soát tông màu đã phát triển và không làm giảm hiệu quả của sáng chế. Do đó, mặc dù chúng không bị giới hạn cụ thể, các nhóm được thể hiện bằng R^8 và R^9 là được ưu tiên.

Trong phần nêu trên, tốt hơn nếu nhóm alkyl có 1 đến 6 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm haloalkyl có 1 đến 6 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm xycloalkyl có 3 đến 8 nguyên tử cacbon; nhóm alkoxy có 1 đến 6 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm alkylcarbonyl có 2 đến 7 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm alkoxy carbonyl có 2 đến 7 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm aralkyl có 7 đến 11 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm aralkoxy có 7 đến 11 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm aryloxy có 6 đến 12 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm aryl có 6 đến 12 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm alkylthio có 1 đến 6 nguyên tử cacbon; tốt hơn nếu nhóm xycloalkylthio có 3 đến 8 nguyên tử cacbon; và tốt hơn nếu nhóm arylthio có 6 đến 12 nguyên tử cacbon.

Để làm indeno[2,1-f]naphto[1,2-b]pyran tạo gốc quang sắc, các hợp chất được mô tả trong WO 1996/014596 A, WO 2001/019813 A, WO 2001/060811 A, WO 2005/028465 A, WO 2006/110221 A, WO 2007/073462 A, WO 2007/140071 A, WO 2008/054942 A, WO 2010/065393 A, WO 2011/10744 A, WO 2011/016582 A, WO 2011/025056 A, WO 2011/034202 A, WO 2011/078030 A, WO 2012/102409 A, WO 2012/102410 A, và WO 2012/121414 có thể được sử dụng mà không bị giới hạn bất kỳ.

Nhóm có gốc quang sắc (mạch bên chứa gốc quang sắc) tốt hơn là nhóm được thể hiện bằng công thức (1) hoặc (1') sau đây:



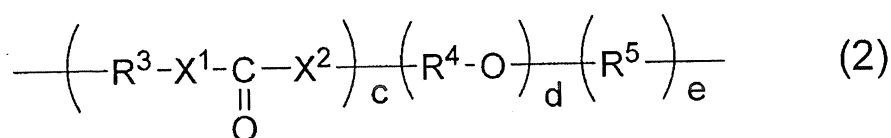
trong đó,

PC là nhóm quang sắc (gốc quang sắc);

R¹ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon;

R² là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có mạch nhánh là nhóm axetyl và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có liên kết ete và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

L được thể hiện bằng công thức (2) sau đây:



trong đó,

R³ là liên kết đơn, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20

nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

R^4 là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm dialkylsilyl có nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon;

R^5 là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

mỗi nhóm X^1 và X^2 độc lập là liên kết đơn, O, hoặc NH;

c là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, d là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, và e là số nguyên bằng 0 hoặc 1;

khi c bằng hoặc lớn hơn 2, thì "c" nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

khi d bằng hoặc lớn hơn 2, thì "d" nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

a là số nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 50, và b là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50;

khi a bằng hoặc lớn hơn 2, thì "a" nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau; và

khi b bằng hoặc lớn hơn 2, thì "b" nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau.

Trong số này, các nhóm được đặc biệt ưu tiên được ví dụ dưới đây.

R^1 tốt hơn là nhóm etylen, nhóm propylen, nhóm isopropylen, hoặc nhóm butylen, và đặc biệt tốt hơn là nhóm isopropylen. Tốt hơn nếu a nằm trong khoảng từ 1 đến 10, và đặc biệt tốt hơn là bằng 1.

R^2 đặc biệt tốt hơn là nhóm butylen, nhóm pentylen, hoặc nhóm hexylen. b tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 10, và đặc biệt tốt hơn là từ 2 đến 8.

Đối với L được thể hiện bằng công thức (2),

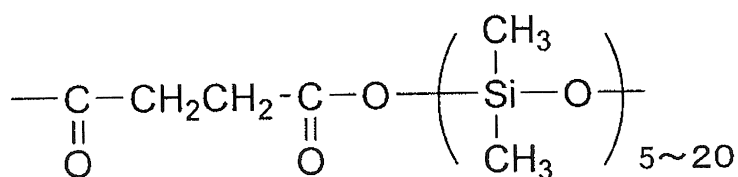
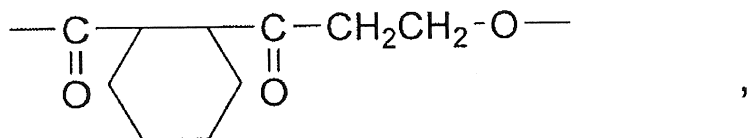
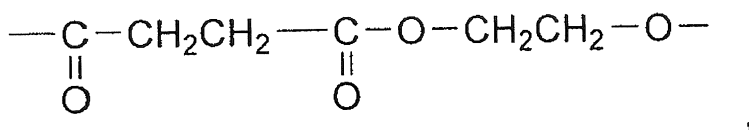
tốt hơn nếu R^3 là liên kết đơn (trong trường hợp này, X^1 được liên kết trực tiếp với nguyên tử oxy của đơn vị "b") hoặc nhóm etylen, nhóm propylen, hoặc nhóm xyclohexylen. Ngoài ra, đặc biệt tốt hơn nếu R^3 là liên kết đơn hoặc nhóm etylen.

Tốt hơn nếu mỗi nhóm X^1 và X^2 là liên kết đơn (trong trường hợp này, nhóm carbonyl được liên kết trực tiếp với R^3 và R^4) hoặc O (nguyên tử oxy).

R^4 tốt hơn là nhóm etylen, nhóm propylen, nhóm butylen, hoặc nhóm dimethylsilyl, và đặc biệt tốt hơn là nhóm etylen hoặc nhóm dimethylsilyl.

Tốt hơn nếu c bằng 2; tốt hơn nếu d nằm trong khoảng từ 1 đến 10, và đặc biệt tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 5; và tốt hơn nếu e bằng 0.

Trong số này, các nhóm được đặc biệt ưu tiên của L được ví dụ dưới đây.



Tất nhiên là, phần mà từ đó PC được loại ra trong công thức (1) là tương ứng với "mạch". Trọng lượng phân tử trung bình của "mạch" (mạch bên) nêu trên mà từ đó PC được loại ra tốt hơn là nằm trong khoảng từ 45 đến 10000, tốt hơn nữa là từ 60 đến 8000, còn tốt hơn nữa là từ 100 đến 5000, và đặc biệt tốt hơn là từ 100 đến 2000.

(Re: Nhóm mạch dài của gốc đa hóa trị)

Theo sáng chế, gốc là nhóm mà trong đó ít nhất một nhóm mạch dài không chứa gốc quang sắc và có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 được thể. Tức là, gốc đa hóa trị phải là gốc trong đó nhóm mạch dài có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 được liên kết. Theo đó, sản phẩm hóa rắn có các đặc tính quang sắc tuyệt vời có thể thu được bằng cách polyme hóa và hóa rắn hỗn hợp chứa hợp chất có thể polyme hóa.

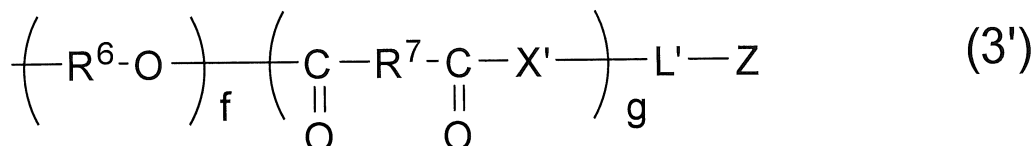
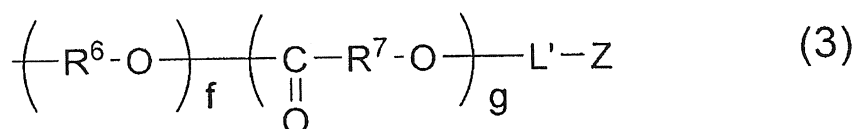
Tương tự với mạch (nhóm) chứa gốc quang sắc như nêu trên, nhóm mạch dài này có thể được liên kết với các gốc đa hóa trị bằng cách sử dụng mạch bên nêu trên (mạch bên thứ nhất) và tùy ý, kết hợp thêm nhóm liên kết L.

Trong hợp chất quang sắc theo sáng chế, đầu tận cùng của mạch bên thứ nhất có thể là nhóm có thể polyme hóa. Trong trường hợp này, nhóm mà trong đó trọng lượng phân tử trung bình số của mạch bên thứ nhất là lớn hơn hoặc bằng 300 và chứa nhóm có thể polyme hóa ở đầu tận cùng của nó là tương ứng với nhóm mạch dài. Trong khi đó, nhóm mà trong đó trọng lượng phân tử trung bình số của mạch bên thứ nhất là nhỏ hơn 300 và chứa nhóm có thể polyme hóa ở đầu tận cùng của nó là tương ứng với nhóm mạch ngắn.

Trong trường hợp cho mạch bên thứ nhất phản ứng với hợp chất chứa nhóm có thể polyme hóa có nhóm liên kết L để liên kết mạch bên thứ nhất với nhóm liên kết L,

bằng cách đó đưa nhóm có thể polyme hóa vào phân tử mạch vòng, "mạch dài" chứa phần thu được từ phản ứng của "mạch bên thứ nhất và nhóm liên kết L" để trở thành mạch chứa phần gồm mạch bên thứ nhất và nhóm liên kết L. Như nêu trên, "mạch dài" là tương ứng với mạch bên nêu trên. Phần nhóm có thể polyme hóa không ảnh hưởng lớn đến trọng lượng phân tử trung bình số của nhóm mạch dài, và do đó, trọng lượng phân tử trung bình số của nhóm mạch dài có thể được giới hạn bởi trọng lượng ở trạng thái chứa nhóm có thể polyme hóa. Cụ thể, trọng lượng phân tử trung bình số của nhóm mạch dài tốt hơn là nằm trong khoảng từ 300 đến 10000, tốt hơn nữa là từ 300 đến 8000, còn tốt hơn nữa là từ 400 đến 5000, và đặc biệt tốt hơn là từ 500 đến 2000. Tất nhiên là trường hợp mà trong đó trọng lượng phân tử trung bình số của mạch bên thứ nhất chứa nhóm có thể polyme hóa, hoặc "mạch bên thứ nhất và nhóm liên kết L" chứa nhóm có thể polyme hóa (trọng lượng phân tử trung bình số chứa nhóm có thể polyme hóa) là nhỏ hơn 300 là tương ứng với nhóm mạch ngắn.

Theo sáng chế, nhóm mạch dài tốt hơn là nhóm được thể hiện bằng công thức (3) hoặc (3') sau đây:



trong đó,

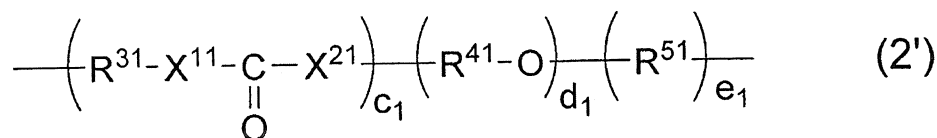
Z là nhóm alkyl có 1 đến 10 nguyên tử cacbon hoặc nhóm có thể polyme hóa;

R⁶ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon;

R⁷ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có mạch nhánh là nhóm axetyl và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có liên kết ete và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

X' là liên kết đơn, O, hoặc NH; và

L' được thể hiện bằng công thức (2') sau đây:



trong đó,

R³¹ là liên kết đơn, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm

có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

R^{41} là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm dialkylsilyl có nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon;

R^{51} là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

mỗi nhóm X^{11} và X^{21} độc lập là liên kết đơn, O, hoặc NH;

c_1 là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, d_1 là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, và e_1 là số nguyên bằng 0 hoặc 1;

khi c_1 bằng hoặc lớn hơn 2, thì " c_1 " nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

khi d_1 bằng hoặc lớn hơn 2, thì " d_1 " nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

f là số nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 50, và g là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50;

khi f bằng hoặc lớn hơn 2, thì " f " nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau; và

khi g bằng hoặc lớn hơn 2, thì " g " nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau.

Tất nhiên là trong công thức (3), trọng lượng phân tử trung bình số của nhóm mạch dài tốt hơn là nằm trong khoảng từ 300 đến 10000, tốt hơn nữa là nằm trong khoảng từ 300 đến 8000, còn tốt hơn nữa là từ 400 đến 5000, và đặc biệt tốt hơn là từ 500 đến 2000.

Trong số này, các nhóm được đặc biệt ưu tiên được ví dụ dưới đây.

Tốt hơn nếu R^6 là nhóm etylen, nhóm propylen, nhóm isopropylen, hoặc nhóm butylen, và đặc biệt tốt hơn là nhóm isopropylen. Tốt hơn nếu f nằm trong khoảng từ 1 đến 10, và đặc biệt tốt hơn là bằng 1.

R^7 đặc biệt tốt hơn là nhóm butylen, nhóm pentylen, hoặc nhóm hexylen. g tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 10, và đặc biệt tốt hơn là từ 2 đến 8.

Đối với L' được thể hiện bằng công thức (2'),

tốt hơn nếu R^{31} là liên kết đơn hoặc nhóm etylen, nhóm propylen, hoặc nhóm xyclohexylen, và đặc biệt tốt hơn là liên kết đơn hoặc nhóm etylen.

X^{11} tốt hơn là liên kết đơn hoặc O.

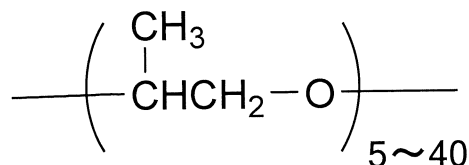
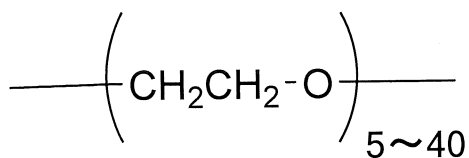
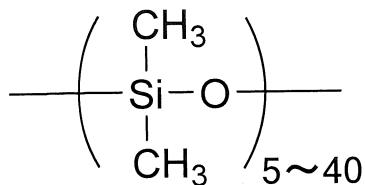
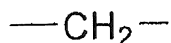
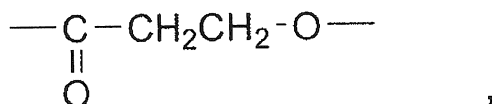
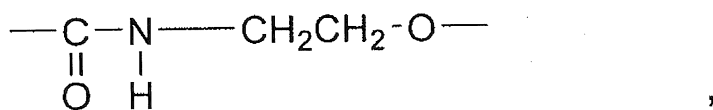
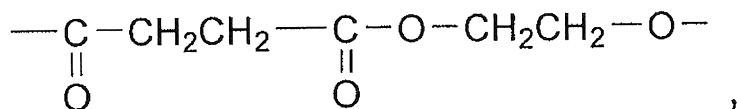
X^{21} tốt hơn là liên kết đơn hoặc O hoặc NH.

R^{41} tốt hơn là nhóm etylen, nhóm propylen, nhóm butylen, hoặc nhóm dimetylsilyl, và đặc biệt tốt hơn là nhóm etylen hoặc nhóm dimetylsilyl.

R^{51} tốt hơn là nhóm metylen, nhóm etylen, hoặc nhóm propylen.

c_1 tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0 đến 2; d_1 tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 45, và đặc biệt tốt hơn là từ 5 đến 40; và e_1 tốt hơn là bằng 0.

Trong số này, các nhóm được đặc biệt ưu tiên của L' được ví dụ dưới đây.



Các ví dụ điển hình về nhóm có thể polyme hóa được thể hiện bằng Z bao gồm các nhóm có thể polyme hóa gốc, như nhóm acrylic, nhóm metacrylic, nhóm allyl, nhóm vinyl, và nhóm 4-vinylphenyl. Tuy nhiên, nhóm epoxy, nhóm episulfua, nhóm thietanyl, nhóm OH, nhóm SH, nhóm NH_2 , nhóm NCO, hoặc nhóm NCS, mỗi nhóm này hoạt động như nhóm có thể polyme hóa, có thể được sử dụng theo loại hợp chất có thể polyme hóa khác với hợp chất quang sắc theo sáng chế.

Ở đây, nhóm epoxy, nhóm episulfua, hoặc nhóm thietanyl phản ứng với nhóm epoxy, nhóm episulfua, nhóm thietanyl, nhóm NH_2 , hoặc nhóm NCO của hợp chất có thể polyme hóa khác với hợp chất quang sắc theo sáng chế.

Nhóm OH hoặc nhóm SH phản ứng với nhóm NCO hoặc nhóm NCS của hợp chất có thể polyme hóa khác với hợp chất quang sắc theo sáng chế, để tạo ra liên kết uretan hoặc liên kết thiouretan.

Nhóm NCO hoặc nhóm NCS phản ứng với nhóm OH, nhóm SH, hoặc nhóm NH_2 của hợp chất có thể polyme hóa khác với hợp chất quang sắc theo sáng chế.

Số lượng được ưu tiên của các nhóm có gốc quang sắc và các nhóm mạch dài, và số lượng được ưu tiên của các nhóm khác

Số lượng các nhóm có gốc quang sắc có khả năng được đưa vào một phân tử của hợp chất quang sắc theo sáng chế là bằng hoặc lớn hơn 1 và phải là số không nhỏ hơn trên 1 so với tổng hóa trị của gốc đa hóa trị. Tuy nhiên, khi số lượng nêu trên là quá nhỏ, mật độ quang màu trở nên không đủ, trong khi khi số lượng này là quá lớn, mật độ quang màu được bão hòa, nên gốc quang sắc không thể được hoạt động hiệu quả. Do đó, số lượng các nhóm có gốc quang sắc trong một phân tử hợp chất quang sắc tốt hơn là nằm trong khoảng từ 2 đến 9. Số lượng các nhóm có gốc quang sắc trong một phân tử hợp chất quang sắc là giá trị trung bình.

Số lượng các nhóm mạch dài trong một phân tử hợp chất quang sắc là bằng hoặc lớn hơn 1 và phải là số không nhỏ hơn trên 1 so với tổng hóa trị của gốc đa hóa trị. Tuy nhiên, khi số lượng nêu trên là quá nhỏ, sẽ khó tạo thành khoảng không tự do, trong khi khi số lượng này là quá lớn, gốc quang sắc không thể được hoạt động hiệu quả. Do đó, số lượng các nhóm mạch dài trong một phân tử hợp chất quang sắc tốt hơn là nằm trong khoảng từ 2 đến 16. Ngoài ra, trong trường hợp mà trong đó đầu tận cùng của nhóm mạch dài là nhóm có thể polyme hóa, khi số lượng nêu trên là quá nhỏ, khó thực hiện quá trình polyme hóa một mình, và ngay cả trong trường hợp mà trong đó hợp chất có thể polyme hóa khác với hợp chất quang sắc theo sáng chế được trộn lẫn, nhóm mạch dài không được liên kết trong sản phẩm được hóa rắn và có thể gây ra hiện tượng thoát mạch. Do đó, số lượng các nhóm mạch dài trong một phân tử hợp chất quang sắc tốt hơn là nằm trong khoảng từ 2 đến 16. Số lượng các nhóm mạch dài là giá trị trung bình.

Theo sáng chế, tổng số của số lượng các nhóm có gốc quang sắc và số lượng các nhóm mạch dài cho một phân tử hợp chất quang sắc tốt hơn là nằm trong khoảng từ 2 đến 30. Khi tổng số nêu trên thỏa mãn khoảng này, hợp chất có các đặc tính quang sắc tuyệt vời có thể thu được với năng suất. Để làm tăng nhiều hơn nữa tác dụng này, tổng số nêu trên tốt hơn nữa là nằm trong khoảng từ 3 đến 20, và còn tốt hơn nữa là 5 đến 18.

Mặc dù số lượng các nhóm mạch dài so với số lượng các nhóm có gốc quang

sắc là bằng hoặc lớn hơn một lần, để cải thiện hơn nữa các đặc tính quang sắc, tốt hơn là tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1 đến 20 lần. Khi khoảng này được thỏa mãn, có thể cho rằng khoảng không tự do có thể được tạo ra một cách hiệu quả trong gốc quang sắc. Do đó, có thể cho rằng các đặc tính quang sắc tuyệt vời hơn có thể đạt được. Để làm cho tác dụng này đáng chú ý hơn, số lượng các nhóm mạch dài so với số lượng các nhóm có gốc quang sắc tốt hơn nữa là nằm trong khoảng từ 1,5 đến 10 lần, và còn tốt hơn nữa là 2 đến 5 lần.

Theo sáng chế, tổng hóa trị của gốc đa hóa trị có thể là tổng số của số lượng các nhóm có gốc quang sắc và số lượng các nhóm mạch dài. Tuy nhiên, khi tính đến việc dễ sản xuất của chính hợp chất quang sắc và ngăn chặn phản ứng phụ, v.v., đối với gốc đa hóa trị, nhóm mạch ngắn có thể được thể, và ngoài ra, nhóm phản ứng, v.v., của gốc đa hóa trị có thể vẫn còn nguyên. Tỷ lệ tối ưu của mỗi trong số các nhóm này thay đổi theo hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị cần sử dụng, và rõ ràng là nó không thể bị giới hạn. Tuy nhiên, khi tính đến việc dễ sản xuất của chính hợp chất quang sắc, ngăn chặn phản ứng phụ, và các đặc tính quang sắc, v.v., tốt hơn nếu tỷ lệ này nằm trong khoảng sau đây. Cụ thể, khi tổng hóa trị của gốc đa hóa trị được xác định là 100%, tốt hơn nếu số lượng các nhóm có gốc quang sắc nằm trong khoảng từ 5 đến 50%, số lượng các nhóm mạch dài nằm trong khoảng từ 5 đến 90%, số lượng nhóm mạch ngắn nằm trong khoảng từ 0 đến 90%, và số lượng nhóm phản ứng, v.v., còn lại mà không được phản ứng (nhóm phản ứng, v.v., của gốc đa hóa trị) nằm trong khoảng từ 0 đến 90%. Ngoài ra, tốt hơn nữa là số lượng các nhóm có gốc quang sắc nằm trong khoảng từ 10 đến 20%, số lượng các nhóm mạch dài nằm trong khoảng từ 30 đến 50%, số lượng các nhóm mạch ngắn nằm trong khoảng từ 0 đến 50%, và số lượng nhóm phản ứng, v.v., còn lại mà không được phản ứng (nhóm phản ứng, v.v., của gốc đa hóa trị) nằm trong khoảng từ 0 đến 50%.

Trong trường hợp mà trong đó hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị là cyclodextrin, hợp chất quang sắc trong đó trong số các mạch bên liên kết với cyclodextrin, nhóm (mạch bên) có gốc quang sắc chiếm 5 đến 50%, tốt hơn là 10 đến 30%, và tốt hơn nữa là 10 đến 20%, và nhóm mạch dài chiếm 5 đến 90%, tốt hơn là 10 đến 50%, và tốt hơn nữa là 30 đến 50% là được đặc biệt ưu tiên theo quan điểm tạo ra các đặc tính quang sắc tuyệt vời. Tuy nhiên, như được mô tả ở trên, đây không phải là trường hợp mà trong đó mạch bên (bao gồm mạch bên thứ nhất) được đưa vào tất cả các nhóm phản ứng, v.v., trong gốc đa hóa trị (nhóm hydroxy của cyclodextrin). Tức là, tỷ lệ nêu trên là tỷ lệ mà trong đó gốc quang sắc đã được đưa vào mạch bên được đưa vào nhóm hydroxy của cyclodextrin và tỷ lệ mà trong đó mạch bên đã trở thành nhóm mạch dài.

Như nêu trên, gốc quang sắc và nhóm có thể polyme hóa có thể không được đưa

vào tất cả các mạch bên (bao gồm mạch bên thứ nhất) được đưa vào xyclodextrin, và ngoài ra, các mạch bên nêu trên có thể không là nhóm mạch dài. Tuy nhiên, trong trường hợp mà trong đó nhóm có thể polyme hóa được đưa vào đầu tận cùng của nhóm mạch dài, nhóm sau đây là được ưu tiên. Ví dụ, trong trường hợp mà trong đó nhóm có thể polyme hóa của hợp chất có thể polyme hóa là nhóm có thể polyme hóa gốc, đối với hợp chất quang sắc cần được kết hợp, khi tính đến năng suất, các đặc tính quang sắc, và khả năng polyme hóa với hợp chất có thể polyme hóa khác, trong số các mạch bên liên kết với xyclodextrin, mạch bên (nhóm) có gốc quang sắc chiếm 5 đến 50%, nhóm mạch dài (mạch bên) có nhóm có thể polyme hóa gốc chiếm 5 đến 90%, nhóm mạch ngắn chiếm 0 đến 90%, và nhóm hydroxy còn lại mà không được phản ứng chiếm 0 đến 90%. Ngoài ra, tốt hơn nữa là mạch bên (nhóm) có gốc quang sắc chiếm 10 đến 20%, nhóm mạch dài (mạch bên) có nhóm có thể polyme hóa gốc chiếm 30 đến 50%, nhóm mạch ngắn chiếm 0 đến 50%, và nhóm hydroxy còn lại mà không được phản ứng chiếm 0 đến 50%.

Mặc dù hợp chất quang sắc theo sáng chế là không bị giới hạn cụ thể, trọng lượng phân tử trung bình khối (Mw) như được xác định bằng phương pháp được mô tả trong phần Ví dụ thực hiện sáng chế như nêu sau đây là, ví dụ, lớn hơn hoặc bằng 2000, và tốt hơn là nằm trong khoảng từ 2000 đến 50000. Cụ thể, đối với các mục đích cải thiện khả năng tương hợp với hợp chất có thể polyme hóa khác và đưa một số lượng lớn gốc quang sắc vào mà không làm tăng quá mức độ nhớt của monome trước khi hóa rắn để tạo ra các tác dụng tuyệt vời, trọng lượng phân tử trung bình khối Mw của hợp chất quang sắc tốt hơn nữa là nằm trong khoảng từ 2000 đến 30000, và đặc biệt tốt hơn là từ 3000 đến 20000.

Phương pháp điều chế hợp chất quang sắc

Mặc dù hợp chất quang sắc theo sáng chế là không bị giới hạn đối với phương pháp điều chế nó, hợp chất này có thể được điều chế bằng phương pháp sau đây.

Gốc đa hóa trị (hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị) trước hết được tạo ra bằng phương pháp đã biết. Sau đó, mạch bên thứ nhất được đưa vào gốc đa hóa trị này bằng phương pháp đã biết. Lúc này, đầu tận cùng của mạch bên thứ nhất tốt hơn là nhóm phản ứng (ví dụ, nhóm OH). Trong số các nhóm phản ứng này, trường hợp mà trong đó nhóm này không phản ứng là tương ứng với "nhóm phản ứng, v.v.. còn lại mà không bị phản ứng".

Theo cách riêng biệt, ít nhất một nhóm có gốc quang sắc và có khả năng phản ứng với mạch bên thứ nhất được đưa vào gốc quang sắc. Tốt hơn nếu nhóm này là nhóm tạo thành nhóm L nêu trên.

Hợp chất quang sắc theo sáng chế có thể được điều chế bằng cách cho gốc đa

hóa trị có mạch bên thứ nhất phản ứng với nhóm có khả năng tạo nhóm L nêu trên. Gốc quang sắc và mạch bên thứ nhất có thể được cho phản ứng trực tiếp với nhau (trong trường hợp này, L là liên kết đơn). Trong trường hợp mà trong đó không chỉ trọng lượng phân tử của mạch bên thứ nhất là nhỏ hơn 300, mà cả gốc quang sắc không được đưa vào, nhóm này trở thành nhóm mạch ngắn. Ngoài ra, tất nhiên là ngay cả khi nhóm có thể polyme hóa sẽ được đưa vào mạch bên thứ nhất, trong trường hợp mà trong đó trọng lượng phân tử là nhỏ hơn 300, nhóm này là tương ứng với nhóm mạch ngắn.

Phản ứng giữa nhóm có khả năng tạo thành nhóm L nêu trên và đầu tận cùng của mạch bên thứ nhất là không bị giới hạn cụ thể. Ví dụ, trong trường hợp mà trong đó đầu tận cùng của mạch bên thứ nhất là nhóm OH, nhóm L nêu trên có thể được tạo ra bằng cách thực hiện phản ứng este hóa với hợp chất có axit carboxylic ở đầu tận cùng. Cụ thể, phản ứng này có thể được thực hiện trong dung môi, như toluen, với sự có mặt của axit vô cơ, như axit sulfuric và axit clohydric, axit hữu cơ, như axit sulfonic thơm, hoặc axit Lewis, như bo ete flo hóa, bằng cách khuấy trong điều kiện gia nhiệt, nếu cần và loại bỏ nước tạo ra bằng phương pháp đồng sôi. Các ví dụ về phương pháp loại nước trong phản ứng este hóa nêu trên bao gồm phương pháp trong đó nước được loại bỏ bằng chất làm khô, như magie sulfat khan hoặc rây phân tử; và phương pháp trong đó nước được loại bỏ với sự có mặt của chất loại nước tiêu biểu là dicyclohexyl carbodiimide hoặc chất tương tự.

Nhóm L nêu trên cũng có thể được tạo ra bằng cách thực hiện phản ứng este hóa với hợp chất có axit carboxylic halogenua ở đầu tận cùng. Cụ thể, phương pháp trong đó hydro halogenua tạo ra được loại bỏ bằng cách khuấy trong điều kiện gia nhiệt, nếu cần trong dung môi trên cơ sở ete, như tetrahydrofuran, với sự có mặt của bazơ, như pyridin và dimetylanilin, có thể được sử dụng.

Ngoài ra, nhóm L nêu trên có thể được tạo ra bằng cách thực hiện phản ứng este hóa với hợp chất có anhydrit axit ở đầu tận cùng. Cụ thể, phương pháp trong đó phản ứng này được thực hiện bằng cách khuấy trong điều kiện gia nhiệt, nếu cần trong dung môi, như toluen, với sự có mặt của chất xúc tác, như natri axetat và pyridin, có thể được sử dụng.

Theo một phương pháp khác, nhóm L nêu trên có thể được tạo ra bằng cách thực hiện phản ứng uretan hóa với hợp chất có nhóm NCO ở đầu tận cùng. Cụ thể, phương pháp trong đó phản ứng này được thực hiện bằng cách khuấy trong điều kiện gia nhiệt, nếu cần mà không sử dụng dung môi hoặc trong dung môi, như toluen, với sự có mặt của chất xúc tác trên cơ sở amin, như trietylendiamin, hoặc chất xúc tác trên cơ sở thiếc, như dibutyl thiếc dilaurat, có thể được sử dụng.

Để làm phương pháp đưa nhóm mạch dài có nhóm có thể polyme hóa vào (nhóm

này cũng có thể là nhóm mạch ngắn), phương pháp giống như phương pháp nêu trên có thể được sử dụng. Hợp chất được điều chế bằng cách thay thế gốc quang sắc bằng nhóm có thể polyme hóa có thể được cho phản ứng với nhóm có khả năng tạo thành nhóm L' nêu trên. Ngoài ra, trong trường hợp mà trong đó nhóm phản ứng ở đầu tận cùng của mạch bên thứ nhất là nhóm có thể polyme hóa theo sáng chế, nhóm phản ứng nêu trên có thể được sử dụng làm nhóm có thể polyme hóa còn nguyên.

Hợp chất có thể polyme hóa khác với hợp chất quang sắc

Trong chế phẩm có thể hóa rắn theo sáng chế, hợp chất quang sắc nêu trên (sau đây còn được gọi là "hợp chất quang sắc (A)") và tùy ý, hợp chất có thể polyme hóa khác với hợp chất quang sắc nêu trên có thể được trộn với nhau. Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa (đôi khi được gọi là "thành phần (B)") bao gồm hợp chất có thể polyme hóa gốc (B1), hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy (B2), hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan- hoặc ure (B3) có khả năng tạo thành liên kết uretan hoặc liên kết ure, và hợp chất có thể polyme hóa (B4) khác với các hợp chất có thể polyme hóa (B1) đến (B3). Cụ thể, trong trường hợp mà trong đó nhóm có thể polyme hóa được đưa vào hợp chất quang sắc, tốt hơn nếu hợp chất có thể polyme hóa có khả năng phản ứng với nhóm có thể polyme hóa này được sử dụng.

(B1) Hợp chất có thể polyme hóa gốc:

Cụ thể, trong trường hợp mà trong đó nhóm chức có thể polyme hóa gốc được đưa vào nhóm mạch dài hoặc nhóm mạch ngắn, đặc biệt là nhóm mạch dài của hợp chất quang sắc, tốt hơn nếu hợp chất có thể polyme hóa gốc (B1) được sử dụng. Hợp chất có thể polyme hóa gốc (B1) được phân loại đại thể thành (B1-1) hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic có nhóm (met)acrylic, (B1-2) hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở vinyl có nhóm vinyl, (B1-3) hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở alyl có nhóm alyl, và (B1-4) hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở silsesquioxan.

Các ví dụ cụ thể về chúng được đưa ra dưới đây.

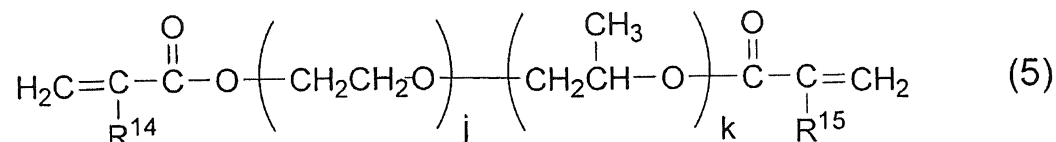
(B1) Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa met(acrylic):

(B1-1-1) Hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức:

Chế phẩm quang sắc có thể polyme hóa theo sáng chế tốt hơn là chứa thành phần (B1-1-1) là hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức. Các ví dụ cụ thể về chúng được đưa ra dưới đây. Cụ thể, các hợp chất được thể hiện bằng các công thức (5), (6), và (7) sau đây được làm ví dụ. Hợp chất được thể hiện bằng công thức (5) sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-1-1)"; hợp chất được thể hiện bằng công thức (6) sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-1-2)"; và hợp chất được thể hiện bằng công thức (7) sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-1-3)". Ngoài ra, hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức

có liên kết uretan (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-1-4)"; và hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức không tương ứng với thành phần (B1-1-1-1), thành phần (B1-1-1-2), thành phần (B1-1-1-3), và thành phần (B1-1-1-4) (sau đây, hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức nêu trên đôi khi sẽ được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-1-5)") được mô tả.

(B1-1-1-1) Hợp chất được thể hiện bằng công thức (5) sau đây:



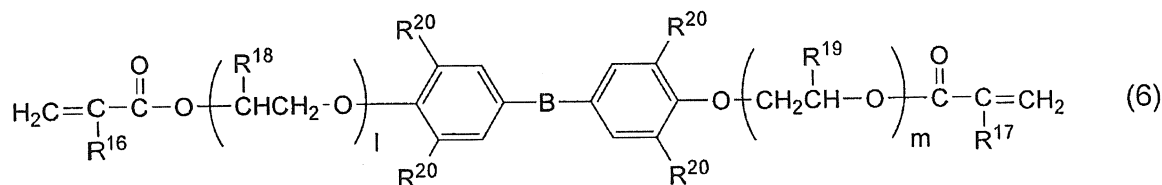
Trong công thức này, mỗi nhóm R^{14} và R^{15} là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl; mỗi biến số j và k độc lập là số nguyên bằng hoặc lớn hơn 0; và $(j + k)$ là lớn hơn hoặc bằng 2 và nhỏ hơn hoặc bằng 50 theo giá trị trung bình.

Hợp chất có thể polyme hóa được thể hiện bằng công thức (5) thường thu được ở dạng hỗn hợp các phân tử có trọng lượng phân tử khác nhau. Do đó, mỗi biến số j và k được biểu diễn theo giá trị trung bình.

Cụ thể, các ví dụ về hợp chất được thể hiện bằng công thức (5) được đưa ra dưới đây.

Dietylen glycol dimetacrylat, trietylen glycol dimetacrylat, tetraetylen glycol dimetacrylat, pentaetylen glycol dimetacrylat, pentapropylen glycol dimetacrylat, dietylen glycol diacrylat, trietylen glycol diacrylat, tetraetylen glycol diacrylat, pentaetylen glycol diacrylat, tripropylen glycol diacrylat, tetrapropylen glycol diacrylat, pentapropylen glycol diacrylat, dimetacrylat bao gồm hỗn hợp gồm polypropylen glycol và polyetylen glycol (polyetylen có hai đơn vị lặp lại, và polypropylen có hai đơn vị lặp lại), polyetylen glycol dimetacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 330), polyetylen glycol dimetacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 536), polyetylen glycol dimetacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 736), tripropylen glycol dimetacrylat, tetrapropylen glycol dimetacrylat, polypropylen glycol dimetacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 536), polyetylen glycol diacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 258), polyetylen glycol diacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 308), polyetylen glycol diacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 508), polyetylen glycol diacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 708), và polyetylen glycol metacrylat acrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 536).

(B1-1-1-2) Hợp chất được thể hiện bằng công thức (6) sau đây:



Trong công thức này,

mỗi nhóm R^{16} và R^{17} là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl;

mỗi nhóm R^{18} và R^{19} là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl;

R^{20} là nguyên tử hydro hoặc nguyên tử halogen;

B là nhóm bất kỳ trong số $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-(\text{SO}_2)-$, $-\text{CO}-$, $-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}(\text{CH}_3)_2-$, và $-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{C}_6\text{H}_5)-$; và

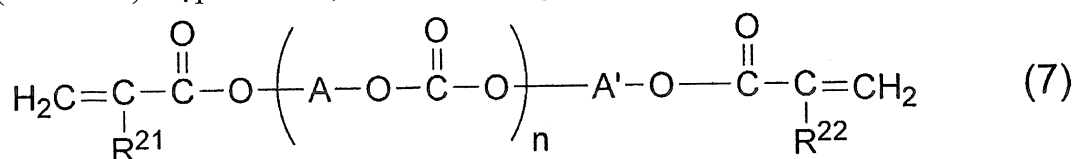
mỗi biến số l và m là số nguyên bằng hoặc lớn hơn 1, và $(l + m)$ là lớn hơn hoặc bằng 2 và nhỏ hơn hoặc bằng 30 theo giá trị trung bình.

Hợp chất có thể polyme hóa được thể hiện bằng công thức (6) thường thu được ở dạng hỗn hợp các phân tử có trọng lượng phân tử khác nhau. Do đó, mỗi biến số l và m được biểu diễn theo giá trị trung bình.

Các ví dụ cụ thể về hợp chất được thể hiện bằng công thức (6) bao gồm các hợp chất bisphenol A di(met)acrylat sau đây.

2,2-bis[4-metacryloyloxy·etoxy]phenyl]propan ($(l + m) = 2$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy·dietoxy]phenyl]propan ($(l + m) = 4$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy·polyetoxy]phenyl]propan ($(l + m) = 7$), 2,2-bis(3,5-dibromo-4-metacryloyloxyetoxyphenyl)propan ($(l + m) = 2$), 2,2-bis(4-metacryloyloxydipropoxyphenyl)propan ($(l + m) = 4$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy·dietoxy]phenyl]propan ($(l + m) = 4$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy·polyetoxy]phenyl]propan ($(l + m) = 3$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy·polyetoxy]phenyl]propan ($(l + m) = 7$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy(polyetoxy)phenyl]propan ($(l + m) = 10$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy(polyetoxy)phenyl]propan ($(l + m) = 17$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy(polyetoxy)phenyl]propan ($(l + m) = 30$), 2,2-bis[4-metacryloyloxy(polyetoxy)phenyl]propan ($(l + m) = 10$), và 2,2-bis[4-metacryloyloxy(polyetoxy)phenyl]propan ($(l + m) = 20$).

(B1-1-1-3) Hợp chất được thể hiện bằng công thức (7) sau đây:



Trong công thức này,

mỗi nhóm R^{21} và R^{22} là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl;

n là số nằm trong khoảng từ 1 đến 20 tính theo giá trị trung bình; và

A và A' có thể là giống nhau hoặc khác nhau và mỗi nhóm là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 15 nguyên tử cacbon, và trong trường hợp mà trong đó nhiều nhóm A' có mặt, các nhóm A' này có thể là nhóm giống nhau hoặc có thể là nhóm khác nhau.

Hợp chất được thể hiện bằng công thức (7) có thể được tạo ra bằng cách cho polycarbonat diol phản ứng với axit (met)acrylic.

Ở đây, các ví dụ về polycarbonat diol được sử dụng được đưa ra dưới đây. Cụ thể, các ví dụ về chúng bao gồm

polycarbonat diol (trọng lượng phân tử trung bình số: 500 đến 2000) thu được bằng cách phosgen hóa polyalkylen glycol, như trimetylen glycol, tetrametylen glycol, pentametylen glycol, hexametylen glycol, octametylen glycol, và nonametylen glycol;

polycarbonat diol (trọng lượng phân tử trung bình số: 500 đến 2000) thu được bằng cách phosgen hóa hỗn hợp gồm hai hoặc nhiều polyalkylen glycol, ví dụ, hỗn hợp gồm trimetylen glycol và tetrametylen glycol, hỗn hợp gồm tetrametylen glycol và hexametylen glycol, hỗn hợp gồm pentametylen glycol và hexametylen glycol, hỗn hợp gồm tetrametylen glycol và octametylen glycol, và hỗn hợp gồm hexametylen glycol và octametylen glycol; và

polycarbonat diol (trọng lượng phân tử trung bình số: 500 đến 2000) thu được bằng cách phosgen hóa 1-metyl trimetylen glycol.

(B1-1-1-4) Hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức có liên kết uretan:

Ví dụ điển hình về thành phần (B1-1-1-4) là sản phẩm phản ứng của polyol và polyisoxyanat. Ở đây, các ví dụ về polyisoxyanat bao gồm hexametylen diisoxyanat, isophoron diisoxyanat, lysin isoxyanat, 2,2,4-hexametylen diisoxyanat, diisoxyanat axit dimeic, isopropylidenbis-4-xyclohexyl isoxyanat, dixyclohexyl metan diisoxyanat, norbornen diisoxyanat, norbornen metan diisoxyanat, và methyl xyclohexan diisoxyanat.

Trong khi đó, các ví dụ về polyol bao gồm polyalkylen glycol có đơn vị lặp lại etylen oxit có 2 đến 4 nguyên tử cacbon, propylen oxit, hoặc hexametylen oxit, và polyeste diol, như polycaprolacton diol. Ngoài ra, các ví dụ về chúng bao gồm polycarbonat diol, polybutadien diol, etylen glycol, propylen glycol, 1,3-propandiol, 1,4-butandiol, 1,5-pentandiol, 1,6-hexandiol, 1,9-nonandiol, 1,8-nonandiol, neopentyl glycol, dietylen glycol, dipropylen glycol, 1,4-xyclohexandiol, và 1,4-xyclohexan dimetanol.

Các uretan (met)acrylat là hỗn hợp phản ứng thu được bằng cách cho tiền polyme uretan thu được bằng phản ứng của polyisoxyanat và polyol, phản ứng tiếp với 2-hydroxy (met)acrylat, và là hỗn hợp phản ứng thu được bằng cách cho diisoxyanat

phản ứng trực tiếp với 2-hydroxy (met)acrylat cũng có thể được sử dụng.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức có liên kết uretan bao gồm U-2PPA (trọng lượng phân tử: 482), UA-122P (trọng lượng phân tử: 1100), U-122P (trọng lượng phân tử: 1100), U-108A, U-200PA, UA-511, U-412A, UA-4100, UA-4200, UA-4400, UA-2235PE, UA-160TM, UA-6100, UA-6200, U-108, UA-4000, và UA-512, tất cả chúng là sản phẩm của Shin-Nakamura Chemical Co., Ltd.; EB4858 (trọng lượng phân tử: 454), là sản phẩm của Daicel-UCB Co., Ltd.; và UX-2201, UX3204, UX4101, 6101, 7101, và 8101, tất cả chúng là sản phẩm của Nippon Kayaku Co., Ltd.

(B1-1-1-5) Hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic hai chức khác:

Các ví dụ về thành phần (B1-1-1-5) bao gồm các hợp chất có nhóm (met)acrylic ở cả hai đầu tận cùng của nhóm alkylen mà có thể có nhóm thế. Các hợp chất có nhóm alkylen có 6 đến 20 nguyên tử cacbon là được ưu tiên làm thành phần (B1-1-1-5). Cụ thể, các ví dụ về chúng bao gồm 1,6-hexandiol diacrylat, 1,6-hexandiol dimetacrylat, 1,9-nonandiol diacrylat, 1,9-nonandiol dimetacrylat, 1,10-decandiol diacrylat, và 1,10-decandiol dimetacrylat.

Ngoài ra, các ví dụ về thành phần (B1-1-1-5) bao gồm các monome (met)acrylat hai chức chứa nguyên tử lưu huỳnh. Nguyên tử lưu huỳnh này tốt hơn là tạo thành một phần của mạch phân tử dưới dạng nhóm sulfua. Cụ thể, các ví dụ về chúng bao gồm bis(2-metacryloyloxyethylthioethyl)sulfua, bis(metacryloyloxyethyl)sulfua, bis(acryloyloxyethyl)-sulfua, 1,2-bis(metacryloyloxyethylthio)etan, 1,2-bis(acryloyloxyethyl)etan, bis(2-metacryloyloxyethylthioethyl)sulfua, bis(2-acryloyloxyethylthioethyl)sulfua, 1,2-bis(metacryloyloxyethylthioethylthio)etan, 1,2-bis(acryloyloxyethylthioethylthio)etan, 1,2-bis(metacryloyloxyisopropylthioisopropyl)sulfua, và 1,2-bis(acryloyloxyisopropylthioisopropyl)sulfua.

Đối với mỗi trong số thành phần (B1-1-1-1), thành phần (B1-1-1-2), thành phần (B1-1-1-3), thành phần (B1-1-1-4), và thành phần (B1-1-1-5) nêu trên, một thành phần hoặc nhiều thành phần được mô tả ở trên có thể được sử dụng. Trong trường hợp mà trong đó nhiều hợp chất được sử dụng, khối lượng của thành phần (B1-1-1) làm cơ sở là tổng lượng của các hợp chất này.

Tiếp theo, hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức (B1-1-2) được mô tả.

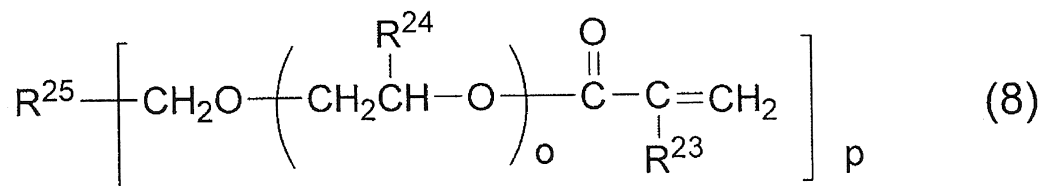
(B1-1-2) Hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức

Các ví dụ về thành phần (B1-1-2) bao gồm hợp chất được thể hiện bằng công thức (8) sau đây (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-2-1)"), hợp

chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức có liên kết uretan (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-2-2)"), và hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức không tương ứng với thành phần (B1-1-2-1) và thành phần (B1-1-2-2) (sau đây, hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức nêu trên đôi khi sẽ được gọi đơn giản là "thành phần (B1-1-2-3)").

(B1-1-2-1) Hợp chất được thể hiện bằng công thức (8) sau đây:

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức bao gồm hợp chất được thể hiện bằng công thức (8) sau đây.



Trong công thức này,

R^{23} là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl;

R^{24} là nguyên tử hydro hoặc alkyl nhóm có 1 đến 2 nguyên tử cacbon;

R^{25} là nhóm hữu cơ hóa trị ba đến hóa trị sáu có 1 đến 10 nguyên tử cacbon; và

o là số nằm trong khoảng từ 0 đến 3 tính theo giá trị trung bình, và p là số nằm trong khoảng từ 3 đến 6 tính theo giá trị trung bình.

Nhóm alkyl có 1 đến 2 nguyên tử cacbon được thể hiện bằng R^{24} tốt hơn là nhóm methyl. Các ví dụ về nhóm hữu cơ được thể hiện bằng R^{25} bao gồm nhóm thu được từ polyol, nhóm hydrocacbon hóa trị ba đến hóa trị sáu, và nhóm hữu cơ hóa trị ba đến hóa trị sáu chứa liên kết uretan.

Cụ thể, các ví dụ về hợp chất được thể hiện bằng công thức (8) bao gồm trimetylolpropan trimetacrylat, trimetylolpropan triacrylat, tetrametylolmetan trimetacrylat, tetrametylolmetan triacrylat, tetrametylolmetan tetrametacrylat, tetrametylolmetan tetraacrylat, trimetylolpropan trietylen glycol trimetacrylat, trimetylolpropan trietylen glycol triacrylat, ditrimetylolpropan tetrametacrylat, và ditrimetylolpropan tetraacrylat.

(B1-1-2-2) Hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức có liên kết uretan:

Thành phần (B1-1-2-2) là hợp chất thu được bằng cách cho hợp chất polyisoxyanat như được giải thích đối với thành phần (B1-1-1-4) phản ứng với hợp chất polyol, như glyxerin, trimetylolpropan, pentaerytritol, và dipentaerytritol, và có ba hoặc nhiều nhóm (met)acrylat trong phân tử của nó. Các ví dụ về sản phẩm có bán trên thị trường của nó bao gồm U-4HA (trọng lượng phân tử: 596, số nhóm chức: 4), U-6HA (trọng lượng phân tử: 1019, số nhóm chức: 6), U-6LPA (trọng lượng phân tử: 818, số nhóm chức: 6), và U-15HA (trọng lượng phân tử: 2300, số nhóm chức: 15), tất cả chúng

là sản phẩm của Shin-Nakamura Chemical Co., Ltd.

(B1-1-2-3) Hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đa chức khác:

Thành phần (B1-1-2-3) là hợp chất thu được bằng cách cải biến đầu tận cùng của hợp chất polyeste bằng nhóm (met)acrylic. Các hợp chất polyeste (met)acrylat có bán trên thị trường khác nhau thay đổi theo trọng lượng phân tử của hợp chất polyeste làm nguyên liệu và mức độ cải biến của nhóm (met)acrylic có thể được sử dụng. Cụ thể, các ví dụ về chúng bao gồm polyeste oligome bốn chức (trọng lượng phân tử: 2500 đến 3500, EB80, là sản phẩm của Daicel-UCB Co., Ltd., etc.), polyeste oligome sáu chức (trọng lượng phân tử: 6000 đến 8000, EB450 là sản phẩm của Daicel-UCB Co., Ltd., etc.), polyeste oligome sáu chức (trọng lượng phân tử: 45000 đến 55000, EB1830, là sản phẩm của Daicel-UCB Co., Ltd., etc.), và polyeste oligome bốn chức (đặc biệt là GX8488B, là sản phẩm của DKS Co., Ltd., có trọng lượng phân tử 10000, v.v.).

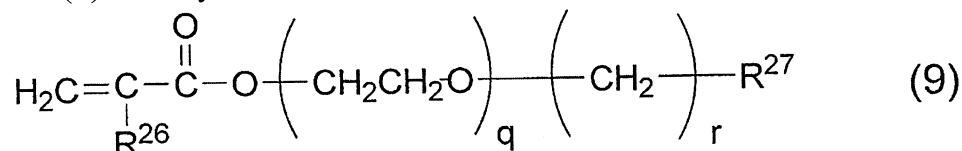
Khi thành phần (B1-1-2) ((thành phần (B1-1-2-1), thành phần (B1-1-2-2), hoặc thành phần (B1-1-2-3)) làm ví dụ ở trên được sử dụng, mật độ liên kết ngang được cải thiện bởi sự polyme hóa, bằng cách đó có thể làm tăng độ cứng bề mặt của sản phẩm hóa rắn thu được. Do đó, cụ thể, để thu được sản phẩm quang sắc hóa rắn (nhiều lớp) bằng phương pháp phủ, thành phần (B1-1-2) tốt hơn là có mặt. Cụ thể, trong số các thành phần (B1-1-2), tốt hơn nếu thành phần (B1-1-2-1) được sử dụng.

Trong thành phần (B1-1-2-1) nêu trên, thành phần (B1-1-2-2), và thành phần (B1-1-2-3) có thể được sử dụng một mình, và nhiều thành phần được mô tả ở trên có thể được sử dụng. Trong trường hợp mà trong đó nhiều hợp chất được sử dụng, khối lượng của thành phần (B1-1-2) làm cơ sở là tổng lượng của các hợp chất này.

Tiếp theo, hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đơn chức (B1-1-3) được mô tả.

(B1-1-3) Hợp chất có thể polyme hóa (met)acrylic đơn chức:

Các ví dụ về thành phần (B1-1-3) bao gồm hợp chất được thể hiện bằng công thức (9) sau đây.



Trong công thức này, R^{26} là nguyên tử hydro hoặc nhóm methyl; R^{27} là nguyên tử hydro, nhóm metyldimetoxyethyl, nhóm trimetoxyethyl, hoặc nhóm glycidyl; q là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 10; và r là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 20.

Cụ thể, các ví dụ về hợp chất được thể hiện bằng công thức (9) được đưa ra dưới đây.

Metoxy polyetylen glycol metacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung

bình: 293), metoxy polyetylen glycol metacrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 468), metoxy polyetylen glycol acrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 218), metoxy polyetylen glycol acrylat (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 454), stearyl metacrylat, lauryl metacrylat, methyl acrylat, ethyl acrylat, butyl acrylat, octyl acrylat, lauryl acrylat, γ -metacryloyloxypropyl trimetoxysilan, γ -metacryloyloxypropylmethyl dimetoxysilan, và glycidyl metacrylat.

(B1-2) Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở vinyl:

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở vinyl có nhóm vinyl bao gồm methyl vinyl keton, ethyl vinyl keton, ethyl vinyl ete, styren, vinyl xyclohexan, butadien, 1,4-pentadien, divinyl sulfua, divinyl sulfon, 1,2-divinylbenzen, 1,3-divinyl-1,1,3,3-tetramethylpropan disiloxan, dietylen glycol divinyl ete, divinyl adipat, divinyl sebacat, etylen glycol divinyl ete, divinyl sulfoxit, divinyl persulfua, dimethyl divinylsilan, 1,2,4-trivinyl xyclohexan, methyl trivinylsilan, α -methylstyren, và α -methylstyren dime.

Trong số các hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở vinyl làm ví dụ nêu trên, α -methylstyren và α -methylstyren dime hoạt động như chất điều hòa polyme hóa và cải thiện khả năng đúc của chế phẩm quang sắc.

(B1-3) Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở alyl:

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở alyl có nhóm alyl được đưa ra dưới đây. Dietylen glycol bisalyl cacbonat, metoxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 550), metoxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 350), metoxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 1500), polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 450), metoxy polyetylen glycol-polypropylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 750), butoxy polyetylen glycol-polypropylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 1600), metacryloyloxy polyetylen glycol-polypropylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 560), phenoxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 600), metacryloyloxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 430), acryloyloxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 420), vinyloxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 560), styryloxy polyetylen glycol alyl ete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 650), và metoxy polyetylen thioglycol alyl thioete (đặc biệt là trọng lượng phân tử trung bình: 730).

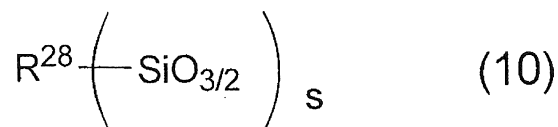
Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở alyl tác dụng như chất chuyển mạch, và do đó, có thể cải thiện các đặc tính quang sắc (mật độ quang màu và tốc độ mất màu)

của chế phẩm có thể hóa rắn.

(B1-4) Hợp chất có thể polyme hóa silsesquioxan:

Hợp chất có thể polyme hóa silsesquioxan có thể có các cấu trúc phân tử khác nhau, như dạng lỏng, dạng thang, hoặc dạng ngẫu nhiên và có nhóm có thể polyme hóa gốc, như nhóm (met)acrylic.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa silsesquioxan bao gồm hợp chất được thể hiện bằng công thức (10) sau đây.



Trong công thức này,

s là mức độ polyme hóa và là số nguyên nằm trong khoảng từ 3 đến 100; và

các nhóm R^{28} có thể là giống nhau hoặc khác nhau và mỗi nhóm là nhóm có thể polyme hóa gốc, nhóm hữu cơ chứa nhóm có thể polyme hóa gốc, nguyên tử hydro, nhóm alkyl, nhóm xycloalkyl, nhóm alkoxy, hoặc nhóm phenyl, và ít nhất một nhóm R^{28} là nhóm có thể polyme hóa gốc hoặc nhóm hữu cơ chứa nhóm có thể polyme hóa gốc.

Các ví dụ về nhóm có thể polyme hóa gốc hoặc nhóm hữu cơ chứa nhóm có thể polyme hóa gốc được thể hiện bằng R^{28} bao gồm nhóm (met)acrylic; các nhóm hữu cơ có nhóm (met)acrylic, như nhóm (met)acryloyloxypropyl và nhóm (3-(met)acryloyloxypropyl)dimetylsiloxy; nhóm alyl; các nhóm hữu cơ có nhóm alyl, như nhóm alylpropyl và nhóm alylpropyldimetylsiloxy; nhóm vinyl; và các nhóm hữu cơ có nhóm vinyl, như nhóm vinylpropyl và nhóm vinyl dimetylsiloxy.

(B2) Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy:

Hợp chất có thể polyme hóa này có nhóm epoxy làm nhóm có thể polyme hóa trong phân tử của nó, và cụ thể, hợp chất này được đặc biệt ưu tiên trong trường hợp mà trong đó nhóm hydroxy, nhóm NH_2 , hoặc nhóm NCO được đưa dưới dạng nhóm chức có thể polyme hóa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A).

Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy được phân loại đại thể thành hợp chất epoxy béo, hợp chất epoxy vòng béo, và hợp chất epoxy thơm, và các ví dụ về chúng được đưa ra dưới đây.

Các ví dụ về hợp chất epoxy béo bao gồm etylen oxit, 2-etyloxiran, butyl glyxidyl ete, phenyl glyxidyl ete, 2,2'-metylen bisoxiran, 1,6-hexandiol diglyxidyl ete, etylen glycol diglyxidyl ete, dietylen glycol diglyxidyl ete, trietylen glycol diglyxidyl ete, tetraetylen glycol diglyxidyl ete, nonaetylen glycol diglyxidyl ete, propylen glycol diglyxidyl ete, dipropylen glycol diglyxidyl ete, tripropylen glycol diglyxidyl ete,

tetrapropylen glycol diglycidyl ete, nonapropylen glycol diglycidyl ete, neopentyl glycol diglycidyl ete, trimetylolpropan triglycidyl ete, glyxerol triglycidyl ete, diglyxerol tetraglycidyl ete, pentaerytritol tetraglycidyl ete, diglycidyl ete của tris(2-hydroxyetyl)isoxyanurat, và triglycidyl ete of tris(2-hydroxyetyl)isoxyanurat.

Các ví dụ về hợp chất epoxy vòng béo bao gồm isophorondiol diglycidyl ete và bis-2,2-hydroxyxyclohexylpropan diglycidyl ete.

Các ví dụ về hợp chất epoxy thơm bao gồm resorxin diglycidyl ete, bisphenol diglycidyl ete, bisphenol F diglycidyl ete, bisphenol S diglycidyl ete, diglycidyl este của axit orthophtalic, phenol novolak polyglycidyl ete, và cresol novolak polyglycidyl ete.

Ngoài các hợp chất nêu trên, hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy có nguyên tử lưu huỳnh trong phân tử của nó cùng với nhóm epoxy cũng có thể được sử dụng. Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy chứa nguyên tử lưu huỳnh đặc biệt góp phần làm cải thiện chỉ số khúc xạ, và các ví dụ về chúng bao gồm các hợp chất béo mạch thẳng và béo mạch vòng. Các ví dụ cụ thể về chúng được đưa ra dưới đây.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy chứa nguyên tử lưu huỳnh béo mạch thẳng bao gồm bis(2,3-epoxypropyl)sulfua, bis(2,3-epoxypropyl)disulfua, bis(2,3-epoxypropylthio)metan, 1,2-bis(2,3-epoxypropylthio)etan, 1,2-bis(2,3-epoxypropylthio)propan, 1,3-bis(2,3-epoxypropylthio)propan, 1,3-bis(2,3-epoxypropylthio)-2-metylpropan, 1,4-bis(2,3-epoxypropylthio)butan, 1,4-bis(2,3-epoxypropylthio)-2-metylbutan, 1,3-bis(2,3-epoxypropylthio)butan, 1,5-bis(2,3-epoxypropylthio)pentan, 1,5-bis(2,3-epoxypropylthio)-2-metypentan, 1,5-bis(2,3-epoxypropylthio)-3-thiapentan, 1,6-bis(2,3-epoxypropylthio)hexan, 1,6-bis(2,3-epoxypropylthio)-2-metylhexan, 3,8-bis(2,3-epoxypropylthio)-3,6-dithiaoctan, 1,2,3-tris(2,3-epoxypropylthio)propan, 2,2-bis(2,3-epoxypropylthio)-1,3-bis(2,3-epoxypropylthiometyl)propan, và 2,2-bis(2,3-epoxypropylthiometyl)-1-(2,3-epoxypropylthio)butan.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy chứa nguyên tử lưu huỳnh béo mạch vòng bao gồm 1,3-bis(2,3-epoxypropylthio)xyclohexan, 1,4-bis(2,3-epoxypropylthio)xyclohexan, 1,3-bis(2,3-epoxypropylthiometyl)xyclohexan, 1,4-bis(2,3-epoxypropylthiometyl)xyclohexan, 2,5-bis(2,3-epoxypropylthiometyl)-1,4-dithian, 2,5-bis(<2-(2,3-epoxypropylthio)etyl>thiometyl)-1,4-dithian, và 2,5-bis(2,3-epoxypropyl-thiometyl)-2,5-dimetyl-1,4-dithian.

(B3) Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan (bao gồm hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở ure):

Đơn vị lặp lại polyme hóa của hợp chất có thể polyme hóa này được liên kết

bằng liên kết uretan hoặc liên kết ure, và hợp chất này là đặc biệt hiệu quả trong trường hợp mà trong đó nhóm epoxy, nhóm episulfua, nhóm thietanyl, nhóm OH, nhóm SH, nhóm NH₂, nhóm NCO, hoặc nhóm NCS được đưa dưới dạng nhóm chức có thể polyme hóa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A).

Ví dụ, liên kết uretan được tạo ra bằng phản ứng giữa polyol và polyisoxyanat và bao gồm liên kết thiouretan được tạo ra bằng phản ứng giữa polyol và polyisothioxyanat hoặc phản ứng giữa polythiol và polyisothioisoxyanat.

Liên kết ure được tạo ra bằng phản ứng giữa polyamin và polyisoxyanat và bao gồm liên kết thioure được tạo ra bằng phản ứng giữa polyamin và polyisothiaxyanat.

Như đã hiểu từ phần giải thích nêu trên, theo sáng chế, nhiều hợp chất được chọn từ polyol (B3-1), polythiol (B3-2), polyamin (B3-3), polyisoxyanat (B3-4), và polyisothiaxyanat (B3-5) và được sử dụng làm các hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan hoặc ure để tạo thành liên kết uretan (liên kết thiouretan) hoặc liên kết ure (liên kết thioure) nêu trên.

Trong trường hợp mà trong đó nhóm hydroxy, nhóm mercapto (nhóm SH), nhóm NH₂, hoặc nhóm NCO được đưa dưới dạng nhóm có thể polyme hóa vào mạch bên của polyrotaxan nêu trên, mạch bên này được đưa vào mạch polyme hóa được tạo bởi hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan hoặc ure (sau đây, cả hai hợp chất này đôi khi được gọi chung đơn giản là "hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan"), và do đó, là được ưu tiên.

Khi hợp chất cần sử dụng dưới dạng một loại của hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan này, cụ thể, các hợp chất sau đây được sử dụng.

(B3-1) Polyol:

Polyol là hợp chất có ít nhất hai nhóm OH trong một phân tử của nó, và các ví dụ điển hình về chúng bao gồm hợp chất di-, tri-, tetra-, penta-, hoặc hexa-hydroxy, polyeste có ít nhất hai nhóm OH trong một phân tử của nó (polyeste polyol), polyete có ít nhất hai nhóm OH trong một phân tử của nó (sau đây được gọi là "polyete polyol"), các polycarbonat có ít nhất hai nhóm OH trong một phân tử của nó (polycarbonat polyol), polycaprolacton có ít nhất hai nhóm OH trong một phân tử của nó (polycaprolacton polyol), và polyme acrylic có ít nhất hai nhóm OH trong một phân tử của nó (polyacrylic polyol).

Các ví dụ về các hợp chất này được đưa ra dưới đây.

Các ví dụ về rượu béo bao gồm etylen glycol, dietylen glycol, propylen glycol, dipropylen glycol, butylen glycol, neopentyl glycol, glyxerin, trimetyloletan, trimetylolpropan, butantriol, 1,2-metyl glycosit, pentaerytritol, dipentaerytritol, tripentaerytritol, sorbitol, erytritol, threitol, ribitol, arabinitol, xylitol, alitol, manitol,

dorcitol, iditol, glycol, inositol, hexantriol, triglyxerol, diglyxerol, trietylen glycol, polyetylen glycol, tris(2-hydroxyetyl)isoxyanurat, xyclobutandiol, xyclopentandiol, xyclohexandiol, xycloheptandiol, xyclooctandiol, xyclohexandimetanol, hydroxypropyl xyclohexanol, trixyclo[5,2,1,0,2,6]decan-dimetanol, bixyclo[4,3,0]-nonandiol, dixyclohexandiol, trixyclo[5,3,1,1]dodecandiol, bixyclo[4,3,0]nonandimetanol, trixyclo[5,3,1,1]dodecan-dietanol, hydroxypropyl trixyclo[5,3,1,1]dodecanol, spiro[3,4]octandiol, butyl xyclohexandiol, 1,1'-bixyclohexylidendiol, xyclohexantriol, maltitol, và lactitol.

Các ví dụ về rượu thơm bao gồm dihydroxynaphtalen, trihydroxynaphtalen, tetrahydroxynaphtalen, dihydroxybenzen, benzentriol, biphenyltetraol, pyrogalol, (hydroxynaphtyl)pyrogalol, trihydroxy phenantren, bisphenol A, bisphenol F, xylylen glycol, và tetrabromobisphenol A.

Các ví dụ về polyol chứa lưu huỳnh bao gồm bis-[4-(hydroxyetoxi)phenyl]sulfua, bis-[4-(2-hydroxypropoxi)phenyl]sulfua, bis-[4-(2,3-dihydroxypropoxi)phenyl]sulfua, bis-[4-(4-hydroxycyclohexyloxy)phenyl]sulfua, và bis-[2-metyl-4-(hydroxyetoxi)-6-butylphenyl]sulfua.

Các ví dụ về hợp chất thu được bằng cách bổ sung trung bình ba hoặc ít hơn ba phân tử cho một nhóm hydroxy của etylen oxit và/hoặc propylen oxit vào polyol chứa lưu huỳnh nêu trên bao gồm di-(2-hydroxyetyl)sulfua, bis(2-hydroxyetyl)disulfua, 1,4-dithian-2,5-diol, bis(2,3-dihydroxypropyl)sulfua, tetrakis(4-hydroxy-2-thiabutyl)metan, bis(4-hydroxyphenyl)sulfon, tetrabromobisphenol S, tetrametylbisphenol S, 4,4'-thiobis(6-tert-butyl-3-metylphenol), và 1,3-bis(2-hydroxyetylthioetyl)-xyclohexan.

Các ví dụ về polyeste polyol bao gồm hợp chất thu được bằng phản ứng ngưng tụ giữa polyol và axit đa chức.

Các ví dụ về polyete polyol bao gồm hợp chất thu được bằng phản ứng giữa hợp chất có ít nhất hai nhóm chứa hydro hoạt tính trong phân tử của nó và alkylen oxit, và sản phẩm cải biến của nó.

Các ví dụ về polycaprolacton polyol bao gồm hợp chất thu được bằng phương pháp polyme hóa mở vòng ϵ -caprolacton.

Các ví dụ về polycacbonat polyol bao gồm hợp chất thu được bằng cách phosgen hóa ít nhất một polyol có trọng lượng phân tử thấp và hợp chất thu được bằng phản ứng chuyển hóa este bằng cách sử dụng etylen cacbonat, dietyl cacbonat, hoặc diphenyl cacbonat.

Các ví dụ về polyacrylic polyol bao gồm hợp chất thu được bằng cách copolyme hóa este của axit acrylic hoặc este của axit metacrylic chứa nhóm hydroxy và monome có thể copolyme hóa với este này.

(B3-2) Polythiol:

Polythiol là hợp chất có ít nhất hai nhóm SH trong một phân tử của nó, và cụ thể, các ví dụ về chúng bao gồm các hợp chất sau đây.

Các ví dụ về polythiol béo bao gồm metandithiol, 1,2-etandithiol, 1,1-propandithiol, 1,2-propandithiol, 1,3-propandithiol, 2,2-propandithiol, 1,6-hexandithiol, 1,2,3-propantrithiol, tetrakis(mercaptometyl)metan, 1,1-xyclohexandithiol, 1,2-xyclohexandithiol, 2,2-dimetylpropan-1,3-dithiol, 3,4-dimetoxybutan-1,2-dithiol, 2-metyl-xyclohexan-2,3-dithiol, bixyclo[2,2,1]hepta-exo-cis-2,3-dithiol, 1,1-bis(mercaptometyl)xyclohexan, bis(2-mercaptoetyl este) của axit thiomalic, (2-mercaptoetyl este) của axit 2,3-dimecaptosucxinic, 2,3-dimecapto-1-propanol(2-mercaptoaxetat), 2,3-dimecapto-1-propanol(3-mercaptoaxetat), dietylen glycol bis(2-mercaptoaxetat), dietylen glycol bis(3-mercaptopropionat), 1,2-dimecaptopropylmetyl ete, 2,3-dimecaptopropylmetyl ete, 2,2-bis(mercaptometyl)-1,3-propandithiol, bis(2-mercaptoetyl)ete, etylen glycol bis(2-mercaptoaxetat), etylen glycol bis(3-mercaptopropionat), 1,4-bis(3-mercaptobutyryloxy)butan, 1,4-butandiol-bis(3-mercaptopropionat), 1,4-butandiol-bis(thioglycolat), 1,6-hexandiol-bis(thioglycolat), tetraetylen glycol bis(3-mercaptopropionat), trimetylolpropan tris(2-mercaptoaxetat), trimetylolpropan tris(3-mercaptopropionat), trimetyloetan tris(3-mercaptobutyrat), trimetylolpropan tris(3-mercaptobutyrat), pentaerytritol tetrakis(2-mercaptoaxetat), pentaerytritol tetrakis(3-mercaptopropionat), 1,2-bis(2-mercaptoetylthio)-3-mercapto-propan, dipentaerytritol hexakis(3-mercaptopropionat), pentaerytritol tetrakis(3-mercaptobutyrat), 1,4-bis(3-mercaptobutyryloxy)butan, trimetylolpropan tris(3-mercaptobutyrat), trimetyloetan tris(3-mercaptobutyrat), 1,2-bis[(2-mercaptoetyl)thio]-3-mercapto-propan, 2-mercaptometyl-1,3-propandithiol, 2-mercaptometyl-1,4-butandithiol, 2,4,5-tris(mercaptometyl)-1,3-dithiolan, 2,2-bis(mercaptometyl)-1,4-butandithiol, 4,4-bis(mercaptometyl)-3,5-dithiaheptan-1,7-dithiol, 2,3-bis(mercaptometyl)-1,4-butandithiol, 2,6-bis(mercaptometyl)-3,5-dithiaheptan-1,7-dithiol, 4-mercaptometyl-1,8-dimecapto-3,6-dithiaoctan, 2,5-bismercaptometyl-1,4-dithian, 1,1,3,3-tetrakis(mercaptometylthio)-propan, 5,7-dimecaptometyl-1,11-dimecapto-3,6,9-trithiaundecan, 4,7-dimecaptometyl-1,11-dimecapto-3,6,9-trithiaundecan, 4,8-dimecaptometyl-1,11-dimecapto-3,6,9-trithiaundecan, và 4-mercaptometyl-1,8-dimecapto-3,6-dithiaoctan.

Các ví dụ về polythiol thơm bao gồm 1,2-dimecaptobenzen, 1,3-dimecaptobenzen, 1,4-dimecaptobenzen, 1,2-bis(mercaptometyl)benzen, 1,3-bis(mercaptometyl)benzen, 1,4-bis(mercaptometyl)benzen, 1,2-bis(mercaptoetyl)benzen, 1,3-bis(mercaptoetyl)-benzen, 1,4-bis(mercaptoetyl)benzen,

1,2-bis(mercaptometoxy)benzen, 1,3-bis(mercaptometoxy)benzen, 1,4-bis(mercaptometoxy)benzen, 1,2-bis(mercaptoetoxyl)-benzen, 1,3-bis(mercaptoetoxyl)benzen, 1,4-bis(mercaptoetoxyl)benzen, 1,2,3-trimercaptobenzen, 1,2,4-trimercaptobenzen, 1,3,5-trimercaptobenzen, 1,2,3-tris(mercaptometyl)benzen, 1,2,4-tris(mercaptometyl)benzen, 1,3,5-tris(mercaptometyl)-benzen, 1,2,3-tris(mercaptoetyl)benzen, 1,2,4-tris(mercaptoetyl)benzen, 1,3,5-tris(mercaptoetyl)benzen, 1,2,3-tris(mercaptometoxy)benzen, 1,2,4-tris(mercaptometoxy)benzen, 1,3,5-tris(mercaptometoxy)benzen, 1,2,3-tris(mercaptoetoxyl)benzen, 1,2,4-tris(mercaptoetoxyl)benzen, 1,3,5-tetramercapto-benzen, 1,2,3,5-tetramercaptobenzen, 1,2,4,5-tetramercaptobenzen, 1,2,3,4-tetrakis(mercaptometyl)benzen, 1,2,3,5-tetrakis(mercaptometyl)benzen, 1,2,4,5-tetrakis(mercaptometyl)benzen, 1,2,3,4-tetrakis(mercaptoetyl)benzen, 1,2,3,5-tetrakis(mercaptoetyl)benzen, 1,2,3,4-tetrakis(mercaptometoxy)benzen, 1,2,4,5-tetrakis(mercaptometoxy)benzen, 1,2,3,4-tetrakis(mercaptoetoxyl)benzen, 1,2,3,5-tetrakis(mercaptoetoxyl)benzen, 2,2'-dimecaptobiphenyl, 4,4'-dimecaptobiphenyl, 4,4'-dimecaptobibenzyl, 2,5-toluendithiol, 3,4-toluendithiol, 1,4-naphtalendithiol, 1,5-naphtalendithiol, 2,6-naphtalendithiol, 2,7-naphtalendithiol, 2,4-dimetylbenzen-1,3-dithiol, 4,5-dimetylbenzen-1,3-dithiol, 9,10-antraxen dimetanhiol, 1,3-di(p-metoxiphenyl)-propan-2,2-dithiol, 1,3-diphenylpropan-2,2-dithiol, phenylmetan-1,1-dithiol, 2,4-di(p-mercaptophenyl)pentan, và 1,4-bis(mercaptopropylthiometyl)benzen.

Các ví dụ về polythiol thơm được thế halogen bao gồm 2,5-diclobenzen-1,3-dithiol, 1,3-di(p-clophenyl)propan-2,2-dithiol, 3,4,5-tribromo-1,2-dimecaptobenzen, và 2,3,4,6-tetraclo-1,5-bis(mercaptometyl)benzen.

Các ví dụ về polythiol chứa dị vòng bao gồm 2-metylamin-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-etylamin-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-amino-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-morpholino-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-xyclohexylamin-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-metoxi-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-phenoxy-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-thiobenzenoxy-4,6-dithiol-sym-triazin, 2-thiobutyloxy-4,6-dithiol-sym-triazin, và 1,3,5-tris(3-mercaptobutyryloxyetyl)-1,3,5-triazin-2,4,6(1H,3H,5H)-trion.

Các ví dụ về polythiol thơm chứa nguyên tử lưu huỳnh ngoài nhóm mercapto bao gồm 1,2-bis(mercaptometylthio)benzen, 1,3-bis(mercaptometylthio)benzen, 1,4-bis(mercaptometylthio)benzen, 1,2-bis(mercaptoetylthio)benzen, 1,3-bis(mercaptoetylthio)benzen, 1,4-bis(mercaptoetylthio)benzen, 1,2,3-tris(mercaptometylthio)benzen, 1,2,4-tris(mercaptometylthio)benzen, 1,3,5-

tris(mercaptomethylthio)benzen, 1,2,3-tris(mercaptoethylthio)benzen, 1,2,4-tris(mercaptoethylthio)benzen, 1,3,5-tris(mercapto-ethylthio)benzen, 1,2,3,4-tetrakis(mercaptomethylthio)benzen, 1,2,3,5-tetrakis(mercapto-methylthio)benzen, 1,2,4,5-tetrakis(mercaptomethylthio)benzen, 1,2,3,4-tetrakis(mercapto-ethylthio)benzen, 1,2,3,5-tetrakis(mercaptoethylthio)benzen, 1,2,4,5-tetrakis(mercapto-ethylthio)benzen, và các sản phẩm được alkyl hóa nhân của các polythiol nêu trên.

Các ví dụ về polythiol béo chứa nguyên tử lưu huỳnh ngoài nhóm mercapto bao gồm bis(mercaptomethyl)sulfua, bis(mercaptoethyl)sulfua, bis(mercaptopropyl)sulfua, bis(mercaptomethylthio)metan, bis(2-mercaptoethylthio)metan, bis(3-mercaptopropyl)-metan, 1,2-bis(mercaptomethylthio)etan, 1,2-(2-mercaptoethylthio)etan, 1,2-(3-mercaptopropyl)etan, 1,3-bis(mercaptomethylthio)propan, 1,3-bis(2-mercaptoethylthio)propan, 1,3-bis(3-mercaptopropylthio)propan, 1,2-bis(2-mercaptoethylthio)-3-mercaptopropan, 2-mercaptoethylthio-1,3-propandithiol, 1,2,3-tris(mercaptomethylthio)propan, 1,2,3-tris(2-mercaptoethylthio)propan, 1,2,3-tris(3-mercaptopropylthio)propan, tetrakis(mercapto-methylthiomethyl)metan, tetrakis(2-mercaptoethylthiomethyl)metan, tetrakis(3-mercapto-propylthiomethyl)metan, bis(2,3-dimecaptopropyl)sulfua, 2,5-dimecapto-1,4-dithian, bis(mercaptomethyl)disulfua, bis(mercaptoethyl)disulfua, và bis(mercaptopropyl)disulfua.

Các ví dụ về este với axit thioglycolic hoặc axit mercaptopropionic của các hợp chất nêu trên bao gồm hydroxymethyl sulfua bis(2-mercaptoaxetat), hydroxymethyl sulfua bis(3-mercaptopropionat), hydroxyethyl sulfua bis(2-mercaptoaxetat), hydroxyethyl sulfua bis(3-mercaptopropionat), hydroxypropyl sulfua bis(2-mercaptoaxetat), hydroxypropyl sulfua bis(3-mercaptopropionat), hydroxymethyl disulfua bis(2-mercaptoaxetat), hydroxymethyl disulfua bis(3-mercaptopropionat), hydroxyethyl disulfua bis(2-mercaptoaxetat), hydroxyethyl disulfua bis(3-mercaptopropionat), hydroxypropyl disulfua bis(2-mercaptoaxetat), hydroxypropyl disulfua bis(3-mercaptopropionat), 2-mercaptoethyl ete bis(2-mercaptoaxetat), 2-mercaptoethyl ete bis(3-mercaptopropionat), 1,4-dithian-2,5-diol bis(2-mercaptoaxetat), 1,4-dithian-2,5-diol bis(3-mercaptopropionat), 2,5-bis(mercaptomethyl)-1,4-dithian, 2,5-bis(2-mercaptoethyl)-1,4-dithian, 2,5-bis(3-mercapto-propyl)-1,4-dithian, 2-(2-mercaptoethyl)-5-mercaptomethyl-1,4-dithian, 2-(2-mercaptoethyl)-5-(3-mercaptopropyl)-1,4-dithian, 2-mercaptomethyl-5-(3-mercaptopropyl)-1,4-dithian, axit thioglycolic bis(2-mercaptoethyl este), axit thiodipropionic bis(2-mercaptoethyl este), axit 4,4'-thiodibutyric bis(2-mercaptoethyl este), axit dithiodiglycolic bis(2-mercaptoethyl este), axit dithiodipropionic bis(2-mercaptoethyl este), axit 4,4'-dithiodibutyric bis(2-

mercaptoethyl este), axit thiodiglycolic bis(2,3-dimecaptopropyl este), axit thiodipropionic bis(2,3-dimecaptopropyl este), axit dithiodiglycolic bis(2,3-dimecaptopropyl este), và axit dithiodipropionic (2,3-dimecaptopropyl este).

Các ví dụ về polythiol chứa dị vòng chứa nguyên tử lưu huỳnh ngoài nhóm mercapto bao gồm 3,4-thiophendithiol, tetrahydrothiophen-2,5-dimecaptometyl, và 2,5-dimecapto-1,3,4-thiadiazol.

Các ví dụ về polythiol chứa nhóm isoxyanurat bao gồm 1,2-bis[(2-mercaptoethyl)thio]-3-mercaptopropan, tris-[(3-mercaptopropionyloxy)-etyl]-isoxyanurat, 1,3,5-tris(3-mercaptobutyryloxyetyl)-1,3,5-triazin-2,4,6(1H,3H,5H)-trion, và tris-[(3-mercaptopropionyloxy)-etyl]-isoxyanurat.

(B3-3) Polyamin:

Polyamin là hợp chất có ít nhất hai nhóm NH_2 trong một phân tử của nó, và các ví dụ về chúng bao gồm các hợp chất sau đây. Cụ thể, các ví dụ về chúng bao gồm etylendiamin, hexametylendiamin, isophorondiamin, nonametylendiamin, undecanmetylendiamin, dodecametylendiamin, metaxylendiamin, 1,3-propandiamin, putrescin, 2-(2-aminoethylamino) etanol, dietylentriamin, p-phenylendiamin, m-phenylendiamin, melamin, và 1,3,5-benzentriamin.

(B3-4) Polyisoxyanat:

Polyisoxyanat là hợp chất có ít nhất hai nhóm NCO trong một phân tử của nó, và các ví dụ về chúng bao gồm các hợp chất sau đây.

Các ví dụ về isoxyanat béo bao gồm etylen diisoxyanat, trimetylen diisoxyanat, tetrametylen diisoxyanat, hexametylen diisoxyanat, octametylen diisoxyanat, nanometylen diisoxyanat, 2,2'-dimetylpentan diisoxyanat, 2,2,4-trimetylhexametylen diisoxyanat, decametylen diisoxyanat, buten diisoxyanat, 1,3-butadien-1,4-diisoxyanat, 2,4,4-trimetylhexametylen diisoxyanat, 1,6,11-undecatriisoxyanat, 1,3,6-hexametylen triisoxyanat, 1,8-diisoxyanato-4-isoxyanatometyloctan, 2,5,7-trimetyl-1,8-diisoxyanato-5-isoxyanatometyloctan, bis(isoxyanatoetyl)cacbonat, bis(isoxyanatoetyl)ete, 1,4-butylen glycol dipropyl ete- ω, ω' -diisoxyanat, lysin diisoxyanatometyl este, lysin triisoxyanat, 2-isoxyanatoetyl-2,6-diisoxyanatohexanoat, và 2-isoxyanatopropyl-2,6-diisoxyanato-hexanoat.

Các ví dụ về isoxyanat vòng béo bao gồm isophoron diisoxyanat, norbornan diisoxyanat, bis(isoxyanatometyl)xyclohexan, dixyclohexylmetan diisoxyanat, xyclohexan diisoxyanat, metylxyclohexan diisoxyanat, dixyclohexyldimetylmetan diisoxyanat, 2,2'-dimetyldixyclohexylmetan diisoxyanat, bis(4-isoxyanato-n-butyliciden)pentaerytritol, diisoxyanat axit dime, 2-isoxyanatometyl-3-(3-isoxyanatopropyl)-5-isoxyanatometyl-bixyclo[2,2,1]-heptan, 2-isoxyanatometyl-3-(3-

isoxyanatopropyl)-6-isoxyanatometyl-bixyclo[2,2,1]-heptan, 2-isoxyanatometyl-2-(3-isoxyanatopropyl)-5-isoxyanatometyl-bixyclo[2,2,1]-heptan, 2-isoxyanatometyl-2-(3-isoxyanatopropyl)-6-isoxyanatometyl-bixyclo[2,2,1]-heptan, 2-isoxyanatometyl-3-(3-isoxyanatopropyl)-6-(2-isoxyanatoetyl)-bixyclo[2,2,1]-heptan, 2-isoxyanatometyl-3-(3-isoxyanatopropyl)-6-(2-isoxyanatoetyl)-bixyclo[2,1,1]-heptan, 2-isoxyanatometyl-2-(3-isoxyanatopropyl)-5-(2-isoxyanatoetyl)-bixyclo[2,2,1]-heptan, 2-isoxyanatometyl-2-(3-isoxyanatopropyl)-6-(2-isoxyanatoetyl)-bixyclo[2,2,1]-heptan, và 1,3,5-tris(isoxyanato-metyl)xyclohexan.

Các ví dụ về isoxyanat thơm bao gồm xylylen diisoxyanat, bis(isoxyanatoetyl)benzen, bis(isoxyanatopropyl)benzen, $\alpha,\alpha,\alpha',\alpha'$ -tetrametylxylylen diisoxyanat, bis(isoxyanatobutyl)benzen, bis(isoxyanatometyl)naphtalen, bis(isoxyanato-metyl)diphenyl ete, bis(isoxyanatoetyl)phtalat, mesitylen triisoxyanat, 2,6-di(isoxyanatometyl)furan, phenylen diisoxyanat, tolylen diisoxyanat, etyl phenylen diisoxyanat, isopropyl phenylen diisoxyanat, dimetyl phenylen diisoxyanat, dietyl phenylen diisoxyanat, diisopropyl phenylen diisoxyanat, trimetylbenzen triisoxyanat, benzen triisoxyanat, naphtalen diisoxyanat, metyl naphtalen diisoxyanat, biphenyl diisoxyanat, tolidin diisoxyanat, 4,4'-diphenylmetan diisoxyanat, 3,3'-dimetyldiphenylmetan-4,4'-diisoxyanat, bibenzyl-4,4'-diisoxyanat, bis(isoxyanatophenyl)etylen, 3,3'-dimetoxybiphenyl-4,4'-diisoxyanat, triphenylmetan triisoxyanat, MDI dạng polyme, naphtalen triisoxyanat, diphenylmetan-2,4,4'-triisoxyanat, 3-metyldiphenylmetan-4,6,4'-triisoxyanat, 4-metyl-diphenylmetan-3,5,2',4',6'-pentaïsoxyanat, phenyl isoxyanatometyl isoxyanat, phenyl isoxyanatoetyl isoxyanat, tetrahydronaphtylen diisoxyanat, hexahydrobenzen diisoxyanat, hexahydrodiphenylmetan-4,4'-diisoxyanat, diphenyl ete diisoxyanat, etylen glycol diphenyl ete diisoxyanat, 1,3-propylen glycol diphenyl ete diisoxyanat, benzophenon diisoxyanat, dietylen glycol diphenyl ete diisoxyanat, dibenzofuran diisoxyanat, carbazol diisoxyanat, etyl carbazol diisoxyanat, và diclocarbazol diisoxyanat.

Các ví dụ về isoxyanat béo chứa lưu huỳnh bao gồm thiodietyl diisoxyanat, thiodipropyl diisoxyanat, thiodihexyl diisoxyanat, dimetyl sulfon diisoxyanat, dithiodimetyl diisoxyanat, dithiodietyl diisoxyanat, dithiodipropyl diisoxyanat, dixyclohexylsulfua-4,4'-diisoxyanat, 1-isoxyanatometylthio-2,3-bis(2-isoxyanatoetylthio)propan, 1,2-bis(2-isoxyanatoetylthio)etan, 1,1,2,2-tetrakis(isoxyanato-metylthio)etan, 2,2,5,5-tetrakis(isoxyanatometylthio)-1,4-dithian, 2,4-dithiapentan-1,3-diisoxyanat, 2,4,6-trithiaheptan-3,5-diisoxyanat, 2,4,7,9-tetrathiapentan-5,6-diisoxyanat, và bis(isoxyanatometylthio)phenyl metan.

Các ví dụ về isoxyanat béo trên cơ sở sulfua bao gồm bis[2-

(isoxyanatometylthio)etyl]sulfua.

Các ví dụ về isoxyanat thơm trên cơ sở sulfua bao gồm diphenyl sulfua-2,4'-diisoxyanat, diphenyl sulfua-4,4'-diisoxyanat, 3,3'-dimetoxi-4,4'-diisoxyanatodibenzyl thioete, bis(4-isoxyanatometylbenzen)sulfua, và 4,4'-metoxybenzenthioetylen glycol-3,3'-diisoxyanat.

Các ví dụ về isoxyanat thơm trên cơ sở disulfua bao gồm diphenyl disulfua-4,4'-diisoxyanat, 2,2'-dimetyl diphenyl disulfua-5,5'-diisoxyanat, 3,3'-dimetyl diphenyl disulfua-5,5'-diisoxyanat, 3,3'-dimetyl diphenyl disulfua-6,6'-diisoxyanat, 4,4'-dimetyl diphenyl disulfua-5,5'-diisoxyanat, 3,3'-dimetoxi diphenyl disulfua-4,4'-diisoxyanat, và 4,4'-dimetoxi diphenyl disulfua-3,3'-diisoxyanat.

Các ví dụ về isoxyanat thơm trên cơ sở sulfon bao gồm diphenyl sulfon-4,4'-diisoxyanat, diphenyl sulfon-3,3'-diisoxyanat, benzyliden sulfon-4,4'-diisoxyanat, diphenylmetan sulfon-4,4'-diisoxyanat, 4-metyldiphenylmetan sulfon-2,4'-diisoxyanat, 4,4'-dimetoxydiphenyl sulfon-3,3'-diisoxyanat, 3,3'-dimetoxi-4,4'-diisoxyanatodibenzyl sulfon, 4,4'-dimetyldiphenyl sulfon-3,3'-diisoxyanat, 4,4'-di-tert-butylidiphenyl sulfon-3,3'-diisoxyanat, 4,4'-dimetoxibenzen etylen disulfon-3,3'-diisoxyanat, và 4,4'-diclodiphenyl sulfon-3,3'-diisoxyanat.

Các ví dụ về isoxyanat trên cơ sở este của axit sulfonic bao gồm 4-metyl-3-isoxyanatobenzen sulfonyl-4'-isoxyanatophenol este và 4-metoxi-3-isoxyanatobenzen sulfonyl-4'-isoxyanatophenol este.

Các ví dụ về isoxyanat thơm trên cơ sở amit của axit sulfonic bao gồm 4-metyl-3-isoxyanatobenzen sulfonylanilit-3'-metyl-4'-isoxyanat, dibenzen sulfonyl-etylendiamin-4,4'-diisoxyanat, 4,4'-dimetoxibenzen sulfonyl-etylendiamin-3,3'-diisoxyanat, và 4-metyl-3-isoxyanatobenzen sulfonylanilit-4-metyl-3'-isoxyanat.

Các ví dụ về isoxyanat dị vòng chứa lưu huỳnh bao gồm thiophen-2,5-diisoxyanat, thiophen-2,5-diisoxyanatometyl, 1,4-dithian-2,5-diisoxyanat, 1,4-dithian-2,5-diisoxyanatometyl, 1,3-dithiolan-4,5-diisoxyanat, 1,3-dithiolan-4,5-diisoxyanatometyl, 1,3-dithiolan-2-metyl-4,5-diisoxyanatometyl, 1,3-dithiolan-2,2-diisoxyanatoetyl, tetrahydrothiophen-2,5-diisoxyanat, tetrahydrothiophen-2,5-diisoxyanatometyl, tetrahydrothiophen-2,5-diisoxyanatoetyl, và tetrahydrothiophen-3,4-diisoxyanatometyl.

Ngoài ra, sản phẩm thế halogen, sản phẩm thế alkyl, sản phẩm thế alkoxy, sản phẩm thế nitro, sản phẩm được cải biến dạng tiền polyme của rượu polyhydric, sản phẩm được cải biến bằng carbodiimit, sản phẩm được cải biến bằng ure, sản phẩm được cải biến bằng biuret, và sản phẩm phản ứng dime hóa hoặc trime hóa của polyisoxyanat nêu trên cũng có thể được sử dụng.

(B3-5) Polyisothioxyanat:

Polyisothioxyanat là hợp chất có ít nhất hai nhóm NCS trong một phân tử của nó, và các ví dụ cụ thể về chúng được đưa ra dưới đây.

Các ví dụ về isothioxyanat béo bao gồm 1,2-diisothioxyanatoetan, 1,3-diisothioxyanatopropan, 1,4-diisothioxyanatobutan, 1,6-diisothioxyanatohexan, và p-phenylen diisopropyliden diisothioxyanat.

Các ví dụ về isothioxyanat vòng béo bao gồm xyclohexyl isothioxyanat và xyclohexan diisothioxyanat.

Các ví dụ về isothioxyanat thơm bao gồm phenyl isothioxyanat, 1,2-diisothioxyanatobenzen, 1,3-diisothioxyanatobenzen, 1,4-diisothioxyanatobenzen, 2,4-diisothioxyanatotoluen, 2,5-diisothioxyanato-m-xylen diisoxyanat, 4,4'-diisothioxyanato-1,1'-biphenyl, 1,1'-metylenbis(4-isothioxyanatobenzen), 1,1'-metylenbis(4-isothio-xyanato-2-metylbenzen), 1,1'-metylenbis(4-isothioxyanato-3-metylbenzen), 1,1'-(1,2-etandiyl)bis(4-isothioxyanatobenzen), 4,4'-diisothioxyanatobenzophenon, 4,4'-diisothio-xyanato-3,3'-dimetyl benzophenon, benzanilit-3,4'-diisothioxyanat, diphenyl ete-4,4'-diisothioxyanat, và diphenylamin-4,4'-diisothioxyanat.

Các ví dụ về isothioxyanat chứa dị vòng bao gồm 2,4,6-triisothioxyanato-1,3,5-triazin.

Các ví dụ về carbonyl isothioxyanat bao gồm hexandioyl diisothioxyanat, nonandioyl diisothioxyanat, carbonic diisothioxyanat, 1,3-benzendicarbonyl diisothioxyanat, 1,4-benzendicarbonyl diisothioxyanat, và (2,2'-bipyridin)-4,4'-dicarbonyl diisothioxyanat.

Ngoài ra, isothioxyanat đa chức có ít nhất một nguyên tử lưu huỳnh ngoài nguyên tử lưu huỳnh của nhóm isothioxyanat cũng có thể được sử dụng. Các ví dụ về isothioxyanat đa chức này bao gồm các hợp chất sau đây.

Các ví dụ về isothioxyanat béo chứa lưu huỳnh bao gồm thiobis(3-isothioxyanatopropan), thiobis(2-isothioxyanatoetan), và dithiobis(2-isothioxyanatoetan).

Các ví dụ về isothioxyanat thơm chứa lưu huỳnh bao gồm 1-isothioxyanato-4-{(2-isothioxyanato)sulfonyl}benzen, thiobis(4-isothioxyanatobenzen), sulfonyl bis(4-isothioxyanatobenzen), sulfinyl bis(4-isothioxyanatobenzen), dithiobis(4-isothioxyanato-benzen), 4-isothioxyanato-1-{(4-isothioxyanatophenyl)sulfonyl}-2-metoxi-benzen, 4-metyl-3-isothioxyanatobenzen sulfonyl-4'-isothioxyanatophenyl este, và 4-metyl-3-isothioxyanatobenzen sulfonylanilit-3'-metyl-4'-isothioxyanat.

Các ví dụ về isothioxyanat chứa dị vòng chứa lưu huỳnh bao gồm thiophen-2,5-

diisothioxyanat và 1,4-dithian-2,5-dithioxyanat.

Mỗi hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan (B3) nêu trên được sử dụng kết hợp để tạo thành liên kết uretan hoặc liên kết ure thông qua phản ứng polyme hóa.

(B4) Các hợp chất có thể polyme hóa khác:

Theo sáng chế, ngoài các hợp chất có thể polyme hóa (B1) đến (B3) nêu trên, hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở episulfua (B4-1) và hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở thietanyl (B4-2) có thể được sử dụng nhằm mục đích cải thiện chỉ số khúc xạ, và ngoài ra, hợp chất có thể polyme hóa đơn chức (B4-3) (ngoại trừ các hợp chất có thể polyme hóa làm ví dụ ở trên có một nhóm có thể polyme hóa) có thể được sử dụng nhằm mục đích cải thiện các đặc tính quang sắc. Ngoài ra, hợp chất có thể polyme hóa loại hỗn hợp (B4-4) có các loại nhóm có thể polyme hóa khác nhau trong phân tử của nó cũng có thể được sử dụng.

(B4-1) Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở episulfua

Monome có thể polyme hóa này là hợp chất có ít nhất hai nhóm episulfua trong phân tử của nó và là được đặc biệt ưu tiên trong trường hợp mà trong đó nhóm SH được đưa dưới dạng nhóm chức có thể polyme hóa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A). Cụ thể, các ví dụ về hợp chất này bao gồm các hợp chất sau đây. Bis(1,2-epithioethyl)sulfua, bis(1,2-epithioethyl)disulfua, bis(2,3-epithiopropyl)sulfua, bis(2,3-epithiopropylthio)metan, bis(2,3-epithiopropyl)disulfua, bis(2,3-epithiopropylthio)metan, bis(2,3-epithiopropyl-dithio)etan, bis(6,7-epithio-3,4-dithiaheptyl)sulfua, bis(6,7-epithio-3,4-dithiaheptyl)-disulfua, 1,4-dithian-2,5-bis(2,3-epithiopropylthio)metan, 1,3-bis(2,3-epithiopropyl-dithio)metan, 1,6-bis(2,3-epithiopropylthio)metan, 1,2,3-tris(2,3-epithiopropylthio)propan, 1,1,1,1-tetrakis(2,3-epithiopropylthio)metan, 1,3-bis(2,3-epithiopropylthio)-2-thiapropan, 1,4-bis(2,3-epithiopropylthio)-2,3-dithiabutan, 1,1,1-tris(2,3-epithiopropylthio)metan, 1,1,1-tris(2,3-epithiopropylthio)metan, 1,1,2,2-tetrakis(2,3-epithiopropylthio)etan, 1,1,3,3-tetrakis(2,3-epithiopropylthio)propan, 1,1,3,3-tetrakis(2,3-epithiopropylthio)propan, 2-[1,1-bis(2,3-epithiopropylthio)metyl]-1,3-dithietan, và 2-[1,1-bis(2,3-epithiopropylthio)metyl]-1,3-dithietan.

(B4-2) Hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở thietanyl:

Hợp chất có thể polyme hóa này là hợp chất thietan, hợp chất này là hiệu quả trong trường hợp mà trong đó nhóm SH được đưa dưới dạng nhóm chức có thể polyme hóa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A) và có ít nhất hai nhóm thietanyl trong phân tử của nó. Một số hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở thietanyl này có nhóm

episulfua cùng với nhiều nhóm thietanyl và được làm ví dụ trong đoạn nêu trên đối với hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở episulfua. Các hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở thietanyl khác bao gồm hợp chất thietan chứa kim loại có nguyên tử kim loại trong phân tử của nó và hợp chất thietan không kim loại không chứa kim loại.

Các ví dụ về hợp chất thietan không kim loại bao gồm bis(3-thietanyl)disulfua, bis(3-thietanyl)sulfua, bis(3-thietanyl)trisulfua, bis(3-thietanyl)tetrasulfua, 1,4-bis(3-thietanyl)-1,3,4-trithiabutan, 1,5-bis(3-thietanyl)-1,2,4,5-tetrathiapentan, 1,6-bis(3-thietanyl)-1,3,4,6-tetrathiahexan, 1,6-bis(3-thietanyl)-1,3,5,6-tetrathiahexan, 1,7-bis(3-thietanyl)-1,2,4,5,7-pentathiaheptan, 1,7-bis(3-thietanylthio)-1,2,4,6,7-pentathiaheptan, 1,1-bis(3-thietanylthio)metan, 1,2-bis(3-thietanylthio)etan, 1,2,3-tris(3-thietanylthio)-propan, 1,8-bis(3-thietanylthio)-4-(3-thietanylthiometyl)-3,6-dithiaoctan, 1,11-bis(3-thietanylthio)-4,8-bis(3-thietanylthiometyl)-3,6,9-trithiaundecan, 1,11-bis(3-thietanylthio)-4,7-bis(3-thietanylthiometyl)-3,6,9-trithiaundecan, 1,11-bis(3-thietanylthio)-5,7-bis(3-thietanylthiometyl)-3,6,9-trithiaundecan, 2,5-bis(3-thietanylthiometyl)-1,4-dithian, 2,5-bis[[2-(3-thietanylthio)etyl]thiometyl]-1,4-dithian, 2,5-bis(3-thietanylthiometyl)-2,5-dimetyl-1,4-dithian, bisthietanyl sulfua, bis(thietanylthio)metan-3-[(thietanylthio)metylthio]metylthio]thietan, bisthietanyl disulfua, bisthietanyl trisulfua, bisthietanyl tetrasulfua, bisthietanyl pentasulfua, 1,4-bis(3-thietanyldithio)-2,3-dithiabutan, 1,1,1-tris(3-thietanyldithio)metan, 1,1,1-tris(3-thietanyldithiometylthio)metan, 1,1,2,2-tetrakis(3-thietanyldithio)etan, và 1,1,2,2-tetrakis(3-thietanyldithiometylthio)etan.

Hợp chất thietan chứa kim loại chứa nguyên tố nhóm 14, như nguyên tử Sn, nguyên tử Si, nguyên tử Ge, và nguyên tử Pb; nguyên tố nhóm 4, như nguyên tử Zr và nguyên tử Ti; nguyên tố nhóm 13, như nguyên tử Al; hoặc nguyên tố nhóm 12, như nguyên tử Zn, làm nguyên tử kim loại trong phân tử của nó. Các hợp chất sau đây được sử dụng đặc biệt tốt hơn.

Các ví dụ về alkylthio(thietanylthio) thiếc bao gồm metylthiotris(thietanylthio) thiếc, etylthiotris(thietanylthio) thiếc, propylthiotris(thietanylthio) thiếc, và isopropylthiotris(thietanylthio) thiếc.

Các ví dụ về bis(alkylthio)bis(thietanylthio) thiếc bao gồm bis(metylthio)-bis(thietanylthio) thiếc, bis(etylthio)bis(thietanylthio) thiếc, bis(propylthio)-bis(thietanylthio) thiếc, và bis(isopropylthio)bis(thietanylthio) thiếc.

Các ví dụ về alkylthio(alkylthio)bis(thietanylthio) thiếc bao gồm etylthio-(metylthio)bis(thietanylthio) thiếc, metylthio(propylthio)bis(thietanylthio) thiếc, isopropylthio(metylthio)bis(thietanylthio) thiếc, etylthio(propylthio)bis(thietanylthio)

thiếc, etylthio(isopropylthio)bis(thietanylthio) thiếc, và isopropylthio(propylthio)-bis(thietanylthio) thiếc.

Các ví dụ về hợp chất dithio thiếc bis(thietanylthio) mạch vòng bao gồm bis(thietanylthio)dithiastanetan, bis(thietanylthio)dithiastanolan, bis(thietanylthio)-dithiastaninan, và bis(thietanylthio)trithiastanocan.

Các ví dụ về hợp chất alkyl(thietanylthio) thiếc bao gồm metyltris(thietanylthio) thiếc, dimetylbis(thietanylthio) thiếc, butyltris(thietanylthio) thiếc, và tetrakis-(thietanylthio) thiếc.

Các ví dụ về hợp chất chứa kim loại khác với thiếc bao gồm tetrakis-(thietanylthio)germani và tris(thietanylthio)bismut.

(B4-3) Hợp chất có thể polyme hóa đơn chức:

Hợp chất có thể polyme hóa này là hợp chất có một nhóm OH hoặc nhóm SH trong phân tử của nó và được sử dụng kết hợp với polyol nêu trên để làm tăng các đặc tính quang sắc bằng cách điều chỉnh trọng lượng phân tử hoặc mức độ liên kết ngang. Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa đơn chức này bao gồm các hợp chất sau đây. Polyetylen glycol monooleyl ete, polyetylen glycol monometyl ete, polyoxyetylen lauryl ete, polyoxyetylen alkyl ete, polyoxyetylen 2-ethylhexyl ete, polyoxyetylen tridexyl ete, polyoxyetylen xetyl ete, polyoxyetylen stearyl ete, và polyetylen glycol mono-4-octylphenyl ete.

(B4-4) Hợp chất có thể polyme hóa loại hỗn hợp:

Hợp chất có thể polyme hóa này có nhiều loại nhóm có thể polyme hóa khác nhau trong phân tử của nó, và các đặc tính vật lý khác nhau có thể được dự định được điều chỉnh bằng cách sử dụng hợp chất có thể polyme hóa này.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa loại hỗn hợp này bao gồm các hợp chất sau đây.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa loại polyme hóa gốc/OH bao gồm 2-hydroxy metacrylat, 2-hydroxy acrylat, 2-hydroxypropyl acrylat, và hydroxypropyl metacrylat.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa loại polyme hóa gốc/isoxyanat bao gồm 2-isoxyanatoetyl metacrylat và 2-isoxyanatoetyl acrylat.

Các ví dụ về hợp chất có thể polyme hóa loại OH/SH bao gồm 2-mercaptoetanol, 3-mercapto-1,2-propandiol, glyxerin di(mercaptoaxetat), 1-hydroxy-4-mercapto-xyclohexan, 2,4-dimecaptophenol, 2-mercaptohydroquinon, 4-mercaptophenol, 1,3-dimecapto-2-propanol, 2,3-dimecapto-1-propanol, 1,2-dimecapto-1,3-butandiol, pentaerytritol tris(3-mercaptopropionat), pentaerytritol mono(3-mercaptopropionat), pentaerytritol bis(3-mercaptopropionat), pentaerytritol

tris(thioglycolat), pentaerytritol pentakis(3-mercaptopropionat), hydroxymetyl-tris(mercptoetylthiometyl)metan, 1-hydroxyetylthio-3-mercptoetylthiobenzen, 4-hydroxy-4'-mercptodiphenyl sulfon, 2-(2-mercptoetylthio)etanol, dihydroxyetyl sulfua mono(3-mercaptopropionat), dimecaptoetan mono(salixylat), và hydroxyetylthiometyl-tris(mercptoetylthio)metan.

Trong các hợp chất có thể polyme hóa (B1) đến (B4) nêu trên, hợp chất có thể polyme hóa được ưu tiên sử dụng là hợp chất có thể polyme hóa gốc (B1) hoặc hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan (B3) trong phương pháp ngào trộn; hợp chất có thể polyme hóa gốc (B1) trong phương pháp tạo cấu trúc nhiều lớp; hoặc hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan (B3) trong phương pháp kết dính.

(C) Chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa:

Các chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa khác nhau có thể được sử dụng để tăng nhanh tốc độ polyme hóa và hóa rắn của hỗn hợp quang sắc theo sáng chế theo các loại của hợp chất có thể polyme hóa (B) nêu trên và nhóm chức có thể polyme hóa được đưa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A).

Ví dụ, trong trường hợp mà trong đó hợp chất có thể polyme hóa gốc (B1) được sử dụng, và nhóm chức có thể polyme hóa gốc được đưa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A), chất khơi mào polyme hóa (C1) được sử dụng làm chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa.

Trong trường hợp mà trong đó chế phẩm có thể hóa rắn chứa hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở epoxy (B2), hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở episulfua (B4-1), hoặc hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở thietanyl (B4-2) được sử dụng, và nhóm epoxy, nhóm episulfua, hoặc nhóm thietanyl được đưa dưới dạng nhóm chức có thể polyme hóa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A), chất hóa rắn epoxy (C2-1) và chất xúc tác polyme hóa cation (C2-2) để thực hiện phản ứng polyme hóa mở vòng nhóm epoxy được sử dụng làm chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa.

Ngoài ra, trong trường hợp mà trong đó hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan (B3) hoặc hợp chất có thể polyme hóa khác (B4) được sử dụng, và nhóm OH, nhóm SH, nhóm NH₂, nhóm NCO, hoặc nhóm NCS được đưa dưới dạng nhóm chức có thể polyme hóa vào mạch bên của hợp chất quang sắc (A), chất xúc tác phản ứng uretan (C3-1) hoặc chất ngưng tụ (C3-2) được sử dụng làm chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa.

(C1) Chất khơi mào polyme hóa

Chất khơi mào polyme hóa bao gồm chất khơi mào polyme hóa nhiệt và chất khơi mào polyme hóa quang, và cụ thể, các ví dụ về chúng được đưa ra dưới đây.

Để làm chất khơi mào polyme hóa nhiệt, các ví dụ về diaxyl peroxit bao gồm benzoyl peroxit, p-clobenzoyl peroxit, decanoyl peroxit, lauroyl peroxit, và axetyl

peroxit.

Các ví dụ về peroxy este bao gồm t-butylperoxy-2-etyl hexanoat, t-butylperoxy neodecanoat, cumylperoxy neodecanoat, và t-butylperoxy benzoat.

Các ví dụ về percacbonat bao gồm diisopropylperoxy dicacbonat và di-sec-butylperoxy dicacbonat.

Các ví dụ về hợp chất azo bao gồm azobisisobutyronitril và 2,2'-azobis(2,4-dimethylvaleronitril).

Để làm chất khơi mào polyme hóa quang, các ví dụ về hợp chất trên cơ sở axetophenon bao gồm 1-phenyl-2-hydroxy-2-metylpropan-1-on, 1-hydroxyxyclohexyl phenyl keton và 1-(4-isopropylphenyl)-2-hydroxy-2-metylpropan-1-on.

Các ví dụ về hợp chất trên cơ sở α -dicarbonyl bao gồm 1,2-diphenyletandion và methylphenyl glycoxylat.

Các ví dụ về các hợp chất trên cơ sở axylphosphin oxit bao gồm 2,6-dimethylbenzoyl diphenylphosphin oxit, 2,4,6-trimethylbenzoyl diphenylphosphin oxit, methyl este của axit 2,4,6-trimethylbenzoyl diphenylphosphinic, 2,6-diclobenzoyl diphenylphosphin oxit, 2,6-dimetoxybenzoyl diphenylphosphin oxit, và phenylbis(2,4,6-trimethylbenzoyl)phosphin oxit.

Trong trường hợp mà trong đó chất khơi mào polyme hóa quang được sử dụng, chất trợ tăng tốc hóa rắn polyme hóa đã biết, như amin bậc ba, cũng có thể được sử dụng kết hợp.

(C2-1) Chất hóa rắn epoxy:

Các ví dụ về hợp chất amin và muối của nó bao gồm 2-metylimidazol, 2-etyl-4-metylimidazol, 1,8-diaza-bixyclo(5,4,0)-7-undecen, trimetylamin, benzyl dimetylamin, trietylamin, 2,4,6-tris(dimetylaminometyl)phenol, và 2-(dimetylaminometyl)phenol.

Các ví dụ về muối amoni bậc bốn bao gồm tetrametylamoni clorua, benzyltrimetylamoni bromua, và tetrabutylamoni bromua.

Các ví dụ về hợp chất phosphin hữu cơ bao gồm tetra-n-butylphosphoni benzotriazolat và tetra-n-butylphosphoni-0,0-dietylphosphorodithioat.

Các ví dụ về muối kim loại của axit carboxylic bao gồm crom (III) tricarboxylat và thiếc octylat.

Các ví dụ về hợp chất axetylaxeton chelat bao gồm crom axetylaxetonat.

(C2-2) Chất xúc tác polyme hóa cation:

Các ví dụ về chất xúc tác trên cơ sở axit Lewis bao gồm phức chất BF_3 ·amin, PF_5 , BF_3 , AsF_5 , và SbF_5 .

Các ví dụ về chất xúc tác polyme hóa cation rắn nhiệt bao gồm muối phosphoni,

muối amoni bậc bốn, muối sulfoni, muối benzylamoni, muối benzylpyridini, muối benzylsulfoni, muối hydrazini, este của axit carboxylic, este của axit sulfonic, và amin imit.

Các ví dụ về chất xúc tác polyme hóa cation có thể hóa rắn bằng tia tử ngoại bao gồm diaryl iodon hexaflorophosphat và axit hexafluorantimonic bis(dodexylphenyl)iodoni.

(C3-1) Chất xúc tác phản ứng uretan

Chất xúc tác phản ứng này được sử dụng để tạo ra liên kết poly(thio)uretan thông qua phản ứng giữa polyiso(thio)xyanat với polyol hoặc polythiol.

Các ví dụ về chúng được đưa ra dưới đây. Triethylendiamin, hexametylentetramin, N,N-dimetyloctylamin, N,N,N',N'-tetrametyl-1,6-diaminohexan, 4,4'-trimetylen bis(1-metylpiperidin), 1,8-diazabicyclo-(5,4,0)-7-undecen, dimetyl thiếc diclorua, dimetyl thiếc bis(isooctylthioglycolat), dibutyl thiếc diclorua, dibutyl thiếc dilaurat, dibutyl thiếc maleat, polyme dibutyl thiếc maleat, dibutyl thiếc dilixinat, dibutyl thiếc bis(dodexylmercaptit), dibutyl thiếc bis(isooctyl thioglycolat), dioctyl thiếc diclorua, dioctyl thiếc maleat, dioctyl thiếc maleat polyme, dioctyl thiếc bis(butyl maleat), dioctyl thiếc dilaurat, dioctyl thiếc dilixinat, dioctyl thiếc dioleat, dioctyl thiếc di(6-hydroxy)caproat, dioctyl thiếc bis(isooctyl thioglycolat), và didodexyltin dilixinat. Ngoài ra, các muối kim loại khác nhau, như đồng oleat, đồng axetylaxetonat, sắt axetylaxetonat, sắt naphtenat, sắt lactat, sắt xitrat, sắt gluconat, kali octanoat, và 2-etylhexyl titanat cũng được bao gồm.

(C3-2) Chất ngưng tụ:

Các ví dụ về axit vô cơ bao gồm hydro clorua, hydro bromua, axit sulfuric, và axit phosphoric.

Các ví dụ về axit hữu cơ bao gồm axit p-toluensulfonic và axit camphorsulfonic.

Các ví dụ về nhựa trao đổi ion axit bao gồm hợp chất thu được bằng cách đưa nhóm sulfonat vào copolyme styren-divinylbenzen.

Các ví dụ về carbodiimit bao gồm dicyclohexyl carbodiimit và 1-etyl-3-(3-dimetylamino-pyrrolyl)-carbodiimit.

Lượng trộn của chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa (C)

Các chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa (C) khác nhau nêu trên có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp hai hoặc nhiều chất, và lượng của nó có thể được gọi là "lượng xúc tác". Ví dụ, lượng chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa có thể là lượng nhỏ nằm trong khoảng từ 0,001 đến 10 phần khối lượng, và đặc biệt là 0,01 đến 5 phần khối lượng tính theo 100 phần khối lượng của hợp chất có thể polyme hóa (B).

Các thành phần trộn vào khác trong chế phẩm có thể hóa rắn:

Miễn là các hiệu quả của sáng chế không bị giảm, chế phẩm có thể hóa rắn theo sáng chế có thể được trộn với các chất kết hợp khác nhau về thực chất là đã biết, ví dụ, các chất ổn định khác nhau, như chất trợ tháo khuôn, chất hấp thụ tử ngoại, chất hấp thụ hồng ngoại, chất ổn định tử ngoại, chất chống oxy hóa, chất ức chế tạo màu, chất chống nhiễm tĩnh điện, thuốc nhuộm huỳnh quang, thuốc nhuộm, chất tạo màu, và chất điều vị, chất phụ gia, dung môi, chất làm đều màu, và chất kiểm soát quá trình polyme hóa, như thiol ví dụ t-dodexyl mercaptan, nếu cần.

Trên tất cả, khi chất ổn định tử ngoại được sử dụng, nó có thể cải thiện độ bền của gốc quang sắc, và do đó, chất này là được ưu tiên. Để làm chất ổn định tử ngoại, đã biết chất ổn định quang amin không tự do, chất chống oxy hóa phenol không tự do, và chất chống oxy hóa trên cơ sở lưu huỳnh. Chất ổn định tử ngoại được đặc biệt ưu tiên được đưa ra dưới đây. Bis(1,2,2,6,6-pentametyl-4-piperidyl)sebacat, ADK STAB LA-52, LA-57, LA-62, LA-63, LA-67, LA-77, LA-82, và LA-87, tất cả chúng là sản phẩm của Adeka Corporation; 2,6-di-tert-butyl-4-metyl-phenol, etylenbis(oxyetylen) bis[3-(5-tert-butyl-4-hydroxy-m-tolyl)propionat]; và IRGANOX 1010, 1035, 1075, 1098, 1135, 1141, 1222, 1330, 1425, 1520, 259, 3114, 3790, 5057, và 565, tất cả chúng là sản phẩm của Ciba Specialty Chemicals Inc.

Mặc dù lượng chất ổn định tử ngoại là không bị giới hạn cụ thể miễn là các hiệu quả theo sáng chế không bị giảm, lượng này thường nằm trong khoảng từ 0,001 đến 10 phần khối lượng, và đặc biệt là 0,01 đến 1 phần khối lượng tính theo 100 phần khối lượng của hợp chất quang sắc. Cụ thể, trong trường hợp mà trong đó chất ổn định quang amin không tự do được sử dụng, khuyến cáo sử dụng chất ổn định này với lượng tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0,5 đến 30 mol, tốt hơn nữa là 1 đến 20 mol, và còn tốt hơn nữa là 2 đến 15 mol cho một mol gốc quang sắc để ngăn sự trôi màu của tông màu đã phát triển được điều chỉnh, kết quả là tác dụng cải thiện độ bền khác nhau theo loại gốc quang sắc.

Hợp chất quang sắc khác với hợp chất quang sắc (A) theo sáng chế cũng có thể được sử dụng miễn là các hiệu quả theo sáng chế không bị giảm.

Thành phần được ưu tiên của chế phẩm có thể hóa rắn

Cụ thể, trong trường hợp mà trong đó hợp chất quang sắc theo sáng chế có nhóm có thể polyme hóa, sản phẩm quang sắc hóa rắn có thể thu được bằng cách polyme hóa một mình nó.

Hợp chất quang sắc (A) cũng có thể được sử dụng kết hợp với hợp chất có thể polyme hóa (B).

Trong cả hai trường hợp, tốt hơn nếu khối lượng tương ứng với gốc quang sắc

được điều chỉnh tới 0,001 đến 10% khối lượng tính theo 100% khối lượng của tổng lượng của chế phẩm có thể hóa rắn để thu được mật độ màu quang học đủ cao.

Khối lượng tương ứng với gốc quang sắc thay đổi theo hệ bậc lệ các đặc tính quang sắc. Ví dụ, trong trường hợp bậc lệ các đặc tính quang sắc bằng phương pháp ngào trộn, khối lượng nêu trên tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0,001 đến 2% khối lượng, và đặc biệt tốt hơn là từ 0,001 đến 1% khối lượng, và trong trường hợp bậc lệ các đặc tính quang sắc bằng phương pháp tạo cấu trúc nhiều lớp và phương pháp kết dính, khối lượng nêu trên tốt hơn là nằm trong khoảng từ 0,1 đến 10% khối lượng, và đặc biệt tốt hơn là nằm trong khoảng từ 1 đến 7% khối lượng.

Tỷ lệ trộn của hợp chất quang sắc (A) và hợp chất có thể polyme hóa (B) thay đổi theo số lượng các nhóm (mạch bên) có gốc quang sắc chứa trong một phân tử hợp chất quang sắc.

Trong trường hợp mà trong đó số lượng các nhóm (mạch bên) của gốc quang sắc chứa trong một phân tử nằm trong khoảng từ 1 đến 9, tốt hơn nếu trộn hợp chất quang sắc (A) với lượng nằm trong khoảng từ 0,5 đến 80% khối lượng và hợp chất có thể polyme hóa (B) với lượng nằm trong khoảng từ 20 đến 99,5% khối lượng; và trong trường hợp mà trong đó số lượng các nhóm (mạch bên) của gốc quang sắc chứa trong một phân tử nằm trong khoảng từ 2 đến 16, tốt hơn nếu trộn hợp chất quang sắc (A) với lượng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 50% khối lượng và hợp chất có thể polyme hóa (B) với lượng từ 50 đến 99,9% khối lượng.

Ngoài ra, theo sáng chế, để có tác dụng cải thiện các đặc tính quang sắc bằng hợp chất quang sắc (A) ở mức cao nhất, tỷ lệ trộn nêu trên có thể được xác định thích hợp theo loại hợp chất quang sắc (A) và loại hợp chất có thể polyme hóa (B) cần sử dụng.

Trong trường hợp mà trong đó nhóm chức có thể polyme hóa cần được đưa vào nhóm mạch dài hoặc nhóm mạch ngắn, tốt hơn là nhóm mạch dài của hợp chất quang sắc (A) là nhóm acrylic và/hoặc nhóm metacrylic, tốt nhất là sử dụng hợp chất có thể polyme hóa gốc (B1) kết hợp để làm hợp chất có thể polyme hóa (B).

Trong trường hợp này, đối với tỷ lệ trộn của thành phần (B1), khi tính đến độ cứng, các đặc tính cơ học, và các đặc tính quang sắc, như mật độ quang màu và tốc độ mất màu, của sản phẩm quang sắc hóa rắn thu được, khi tổng lượng của thành phần (B1-1), thành phần (B1-2), hợp chất (B1-3), và thành phần (B1-4) được xác định là 100% khối lượng, tốt hơn nếu điều chỉnh lượng của thành phần (B1-1) ở 80 đến 100% khối lượng và tổng lượng của thành phần (B1-2), hợp chất (B1-3), và thành phần (B1-4) ở 0 đến 20% khối lượng. Ngoài ra, khi tổng lượng của các thành phần (B1-1) được xác định là 100% khối lượng, tốt hơn nếu điều chỉnh lượng của thành phần (B1-1-1) ở 30 đến

80% khối lượng, lượng của thành phần (B1-1-2) ở 10 đến 50% khối lượng, và lượng của thành phần (B1-1-3) ở 0 đến 20% khối lượng tương ứng.

Trong trường hợp mà trong đó nhóm chức có thể polyme hóa cần được đưa vào nhóm mạch dài hoặc nhóm mạch ngắn, tốt hơn là nhóm mạch dài của hợp chất quang sắc (A) là nhóm OH và/hoặc nhóm SH, tốt nhất là sử dụng polyol (B3-1), polythiol (B3-2), polyamin (B3-3), polyisoxyanat (B3-4), và polyisothiaxyanat (B3-5) kết hợp để tạo thành liên kết uretan, liên kết thiouretan, liên kết ure, hoặc liên kết thioure (đặc biệt là liên kết uretan hoặc liên kết thiouretan).

Trong trường hợp này, đã khuyến cáo điều chỉnh lượng của nhóm SH và nhóm OH ở khoảng từ 0,8 đến 1,2 mol, đặc biệt tốt hơn là 0,85 đến 1,15 mol, và tốt nhất là 0,9 đến 1,1 mol cho một mol nhóm NCO hoặc nhóm NCS.

Sử dụng chế phẩm có thể hóa rắn

Đối với chế phẩm có thể hóa rắn theo sáng chế, trong trường hợp mà trong đó mạch có nhóm có thể polyme hóa được đưa vào hợp chất quang sắc (A), thậm chí chỉ hợp chất quang sắc (A) có thể được sử dụng. Ví dụ, tấm quang sắc (sản phẩm quang sắc hóa rắn) có thể được sản xuất bằng cách đúc hợp chất quang sắc (A) thành tấm.

Dung dịch phủ được điều chế bằng cách phân tán hoặc hòa tan chế phẩm có thể hóa rắn nêu trên trong dung môi hữu cơ, và dung dịch phủ này được gắn lên tấm quang học hoặc màng quang học trong suốt, sau đó được sấy để tạo ra lớp phủ quang sắc (sản phẩm quang sắc hóa rắn), bằng cách đó có thể bộc lộ các đặc tính quang sắc.

Nói chung, chế phẩm có thể hóa rắn theo sáng chế tốt hơn là hỗn hợp của hợp chất có thể polyme hóa (B) hoặc chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa (C) ngoài hợp chất quang sắc (A). Ví dụ, mong muốn là chế phẩm quang sắc được điều chế bằng cách ngào trộn nóng chảy các thành phần tương ứng và được polyme hóa và hóa rắn để tạo ra sản phẩm quang sắc hóa rắn, bằng cách đó bộc lộ các đặc tính quang sắc bằng sản phẩm được hóa rắn này. Mặc dù ví dụ về việc tạo hình chế phẩm có thể hóa rắn chứa hợp chất có thể polyme hóa (B) thành sản phẩm quang sắc hóa rắn được giải thích dưới đây, ngay cả trong trường hợp mà trong đó chỉ hợp chất quang sắc (A) mà mạch có nhóm có thể polyme hóa đã được đưa vào được sử dụng, phương pháp giống như phương pháp để hóa rắn chế phẩm có thể hóa rắn có thể được sử dụng. Ngoài ra, hợp chất quang sắc (A) chứa trong chế phẩm có thể hóa rắn có thể có hoặc có thể không có nhóm có thể polyme hóa.

Quá trình polyme hóa và hóa rắn để sản xuất sản phẩm quang sắc hóa rắn được thực hiện bằng cách tiến hành polyme hóa gốc, polyme hóa mở vòng, polyme hóa anion, hoặc polyme hóa ngưng tụ bằng cách chiếu tia năng lượng hoạt động, như tia tử ngoại, tia α , tia β , và tia γ , hoặc gia nhiệt hoặc sử dụng cả hai cách trong số chúng. Tức là,

phương pháp polyme hóa có thể được sử dụng thích hợp theo loại hợp chất có thể polyme hóa (B) hoặc chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa (C) và hình dạng của sản phẩm quang sắc hóa rắn cần được tạo ra.

Trong trường hợp polyme hóa nhiệt chế phẩm có thể hóa rắn theo sáng chế có hợp chất có thể polyme hóa (B) v.v., được trộn trong đó, cụ thể, nhiệt độ ảnh hưởng đến các đặc tính của sản phẩm quang sắc hóa rắn thu được. Điều kiện nhiệt độ này bị ảnh hưởng bởi loại và lượng của chất khơi mào polyme hóa nhiệt và loại hợp chất có thể polyme hóa, và do đó, rõ ràng là nó không thể bị giới hạn. Tuy nhiên, nói chung, phương pháp trong đó sự polyme hóa được bắt đầu ở nhiệt độ tương đối thấp, và sau đó, nhiệt độ được tăng chậm là được ưu tiên. Thời gian polyme hóa thay đổi theo các yếu tố khác nhau như nhiệt độ, và do đó, tốt hơn nếu xác định trước thời gian tối ưu theo các điều kiện này. Tuy nhiên, nói chung, tốt hơn nếu chọn các điều kiện mà trong đó quá trình polyme hóa hoàn thành trong thời gian từ 2 đến 48 giờ. Trong trường hợp thu được tấm quang sắc nhiều lớp, tốt hơn nếu thực hiện quá trình polyme hóa ở nhiệt độ mà ở đó phản ứng giữa các nhóm chức có thể polyme hóa xảy ra. Trong trường hợp đó, tốt hơn nếu xác định nhiệt độ tối ưu và thời gian tối ưu để thu được trọng lượng phân tử mục tiêu.

Trong trường hợp polyme hóa quang chế phẩm có thể hóa rắn theo sáng chế, trong số các điều kiện polyme hóa, cụ thể, cường độ UV ảnh hưởng đến các đặc tính của sản phẩm quang sắc hóa rắn thu được. Điều kiện chiếu tia này bị ảnh hưởng bởi loại và lượng của chất khơi mào polyme hóa quang và loại monome có thể polyme hóa, và do đó, rõ ràng là nó không thể bị giới hạn. Tuy nhiên, nói chung, tốt hơn nếu chọn điều kiện sao cho tia UV nằm trong khoảng từ 50 đến 500 mW/cm² ở bước sóng 365nm được chiếu trong thời gian từ 0,5 đến 5 phút.

Trong trường hợp bộc lộ các đặc tính quang sắc bằng phương pháp ngào trộn sử dụng quá trình polyme hóa và hóa rắn nêu trên, chế phẩm có thể hóa rắn được bơm vào khoảng không được tạo bởi khuôn thủy tinh được giữ bằng đệm đàn hồi hoặc đệm ngăn cách và được polyme hóa đúc bằng cách gia nhiệt trong lò không khí hoặc chiếu tia năng lượng hoạt hóa, như tia tử ngoại, theo loại của hợp chất có thể polyme hóa (B) và chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa, bằng cách đó có thể thu được sản phẩm quang sắc hóa rắn được đúc thành vật liệu quang học, như thấu kính.

Theo phương pháp này, tròng kính đeo mắt hoặc tương tự, có các đặc tính quang sắc, đã thu được trực tiếp.

Trong trường hợp bộc lộ các đặc tính quang sắc bằng phương pháp tạo cấu trúc nhiều lớp, dung dịch phủ được điều chế bằng cách hòa tan thích hợp chế phẩm có thể hóa rắn trong dung môi hữu cơ, gắn lên bề mặt của nền quang học, như nền thấu kính,

bằng phương pháp phủ quay, nhúng, hoặc tương tự, và sau đó được sấy để loại bỏ dung môi hữu cơ, và sau đó, quá trình polyme hóa và hóa rắn được thực hiện bằng cách chiếu tia UV, gia nhiệt, hoặc tương tự trong khí trơ, như nitơ, bằng cách đó tạo thành lớp quang sắc bao gồm sản phẩm quang sắc hóa rắn trên bề mặt của nền quang học (phương pháp phủ).

Lớp quang sắc bao gồm sản phẩm quang sắc hóa rắn cũng có thể được tạo ra trên bề mặt của nền quang học bằng cách polyme hóa đúc trong khuôn trong đó nền quang học, như nền thấu kính, được bố trí đối diện với khuôn thủy tinh theo cách sao cho khoảng không được xác định trước được tạo ra giữa chúng, và chế phẩm có thể hóa rắn được bơm vào khoảng không này, để thực hiện quá trình polyme hóa-hóa rắn bằng cách chiếu tia UV, gia nhiệt, hoặc tương tự ở trạng thái này (phương pháp polyme hóa đúc).

Trong trường hợp tạo thành lớp quang sắc trên bề mặt của nền quang học bằng phương pháp tạo cấu trúc nhiều lớp nêu trên (phương pháp phủ và phương pháp polyme hóa đúc), sự kết dính giữa lớp quang sắc và nền quang học có thể được tăng lên bằng cách xử lý hóa học bề mặt của nền quang học bằng dung dịch kiềm, dung dịch axit, hoặc tương tự, hoặc xử lý trước bằng phương pháp vật lý bằng cách phóng điện, phóng điện plasma, đánh bóng, hoặc tương tự. Tất nhiên là, có thể tạo lớp nhựa kết dính trong suốt trên bề mặt của nền quang học.

Ngoài ra, trong trường hợp bộc lộ các đặc tính quang sắc bằng phương pháp kết dính, quá trình đúc tấm được thực hiện bằng cách sử dụng chế phẩm có thể hóa rắn để tạo ra tấm quang sắc, sau đó, tấm này được bố trí giữa hai tấm trong suốt (các tấm quang học) và thực hiện quá trình hóa rắn polyme hóa nêu trên, bằng cách đó thu được tấm quang sắc nhiều lớp trong đó lớp quang sắc dùng làm lớp kết dính.

Trong trường hợp này, tấm quang sắc cũng có thể được tạo ra bằng cách sử dụng phương pháp, như phủ bằng dung dịch phủ được điều chế bằng cách hòa tan chế phẩm có thể hóa rắn trong dung môi hữu cơ.

Tấm quang sắc nhiều lớp thu được này được hoá rắn trong khuôn chẳng hạn, và sau đó, nhựa dẻo nhiệt (ví dụ, polycacbonat) dùng cho nền quang học, như thấu kính, được đúc phun để thu được nền quang học, như thấu kính có hình dạng được xác định trước và có các đặc tính quang sắc. Ngoài ra, tấm quang sắc nhiều lớp này cũng có thể được liên kết với bề mặt của nền quang học bằng keo hoặc chất tương tự. Theo cách đó, cũng có thể thu được thấu kính quang sắc.

Trong trường hợp sản xuất tấm quang sắc nhiều lớp như nêu trên, cụ thể, theo quan điểm là khả năng bám dính với nền quang học là cao, tốt hơn nếu hợp chất có thể polyme hóa trên cơ sở uretan hoặc ure (B3), đặc biệt là hợp chất có thể polyme hóa trên

cơ sở uretan được sử dụng làm hợp chất có thể polyme hóa (B) và được điều chỉnh để tạo thành polyuretan.

Chế phẩm có thể hóa rắn nêu trên theo sáng chế có thể bộc lộ các đặc tính quang sắc tuyệt vời, như mật độ quang màu và tốc độ mất màu, và được sử dụng một cách hiệu quả để sản xuất nền quang học có các đặc tính quang sắc, ví dụ, thấu kính quang sắc, mà không làm giảm các đặc tính, như độ bền cơ học.

Theo mục đích sử dụng, có thể xử lý sau đối với lớp quang sắc hoặc sản phẩm quang sắc hóa rắn được tạo thành từ chế phẩm có thể hóa rắn theo sáng chế, như nhuộm bằng thuốc nhuộm, như thuốc nhuộm phân tán, sản xuất màng phủ cứng bằng cách sử dụng chất kết hợp silan hoặc chất phủ cứng bao gồm dung dịch keo chứa silic, ziricon, antimon, nhôm, thiếc, hoặc vonfram làm thành phần chính, tạo màng mỏng bằng cách kết tủa pha hơi oxit kim loại, như SiO_2 , TiO_2 , và ZrO_2 , xử lý chống phản xạ bằng màng mỏng được tạo ra bằng cách gắn polyme hữu cơ, hoặc xử lý chống nhiễm tĩnh điện.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Sau đây, sáng chế được mô tả chi tiết dựa vào các ví dụ và các ví dụ so sánh, nhưng cần hiểu rằng sáng chế không bị giới hạn ở các ví dụ này. Các dụng cụ đo được sử dụng trong sáng chế và phương pháp điều chế mỗi thành phần, v.v., được mô tả trước. Xác định trọng lượng phân tử; sắc ký thẩm gel (Gel Permeation Chromatography, GPC)

Máy sắc ký chất lỏng (sản phẩm của Nihon NƯỚC K.K.) được sử dụng làm thiết bị GPC. Shodex GPC KF-802 (số lượng phân tử giới hạn loại trừ: 5000), KF802.5 (số lượng phân tử giới hạn loại trừ: 20000), KF-803 (số lượng phân tử giới hạn loại trừ: 70000), KF-804 (số lượng phân tử giới hạn loại trừ: 400000), và KF-805 (số lượng phân tử giới hạn loại trừ: 2000000), tất cả chúng là sản phẩm của Showa Denko K.K., được sử dụng thích hợp làm cột theo trọng lượng phân tử của mẫu cần phân tích. Ngoài ra, dimetyl formamit (DMF) được sử dụng làm dung dịch phát triển để thực hiện việc đo trong điều kiện tốc độ dòng 1 mL/phút và nhiệt độ 40°C. Polystyren được sử dụng làm chất chuẩn so sánh để thu được trọng lượng phân tử trung bình khối bằng cách biến đổi so sánh. Khúc xạ kế vi sai được sử dụng làm thiết bị phát hiện.

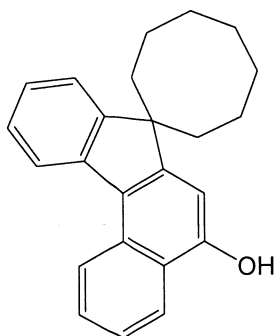
Ví dụ 1

Tổng hợp hợp chất quang sắc liên kết với cyclodextrin (CyD1)

Hợp chất CyD1 này là hợp chất trong trường hợp sử dụng cyclodextrin làm hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị.

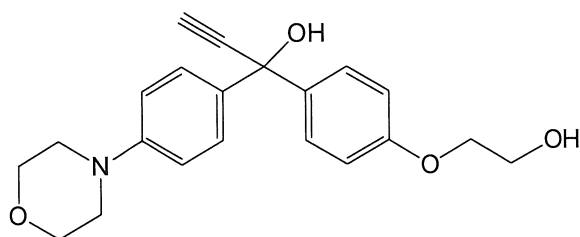
Bước thứ nhất

100ml toluen được bổ sung vào 4,7g (10mmol) hợp chất được thể hiện bằng công thức (11) sau đây:



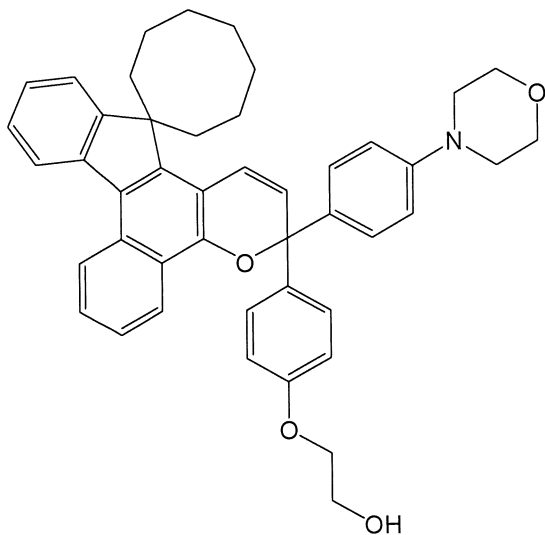
(11)

5,3g (15mmol) hợp chất được thể hiện bằng công thức (12) sau đây và được tổng hợp theo phương pháp được mô tả trong WO 2006/022825 A:



(12)

và 0,25g (1mmol) pyridini p-toluensulfonat và được gia nhiệt kết hợp với khuấy ở 75°C trong 1 giờ. Sau khi làm nguội tới nhiệt độ trong phòng, chất thu được được rửa ba lần bằng 100ml nước, và lớp hữu cơ được chưng cất dưới áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng cách sắc ký cột trên silicagel, để thu được 6,2g hợp chất được thể hiện bằng công thức (13) sau đây.



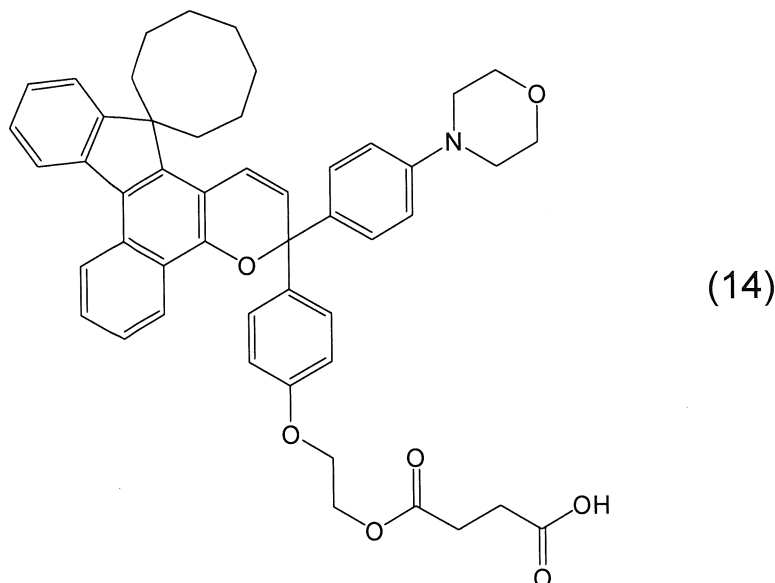
(13)

Hiệu suất là 77%.

Bước thứ hai

200ml diclometan được bổ sung vào 6,2g (7,7mmol) hợp chất được thể hiện bằng công thức (13) nêu trên, 1,55g (15,5mmol) anhydrit succinic, và 1,95g (19,3mmol) triethylamin và được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 12 giờ. Sau khi làm lạnh bằng nước đá, dung dịch axit clohydric 10% được bổ sung từ từ cho đến khi độ pH đạt tới 1, để thực hiện việc tách chất lỏng. Chất thu được được rửa ba lần bằng 250ml nước, và

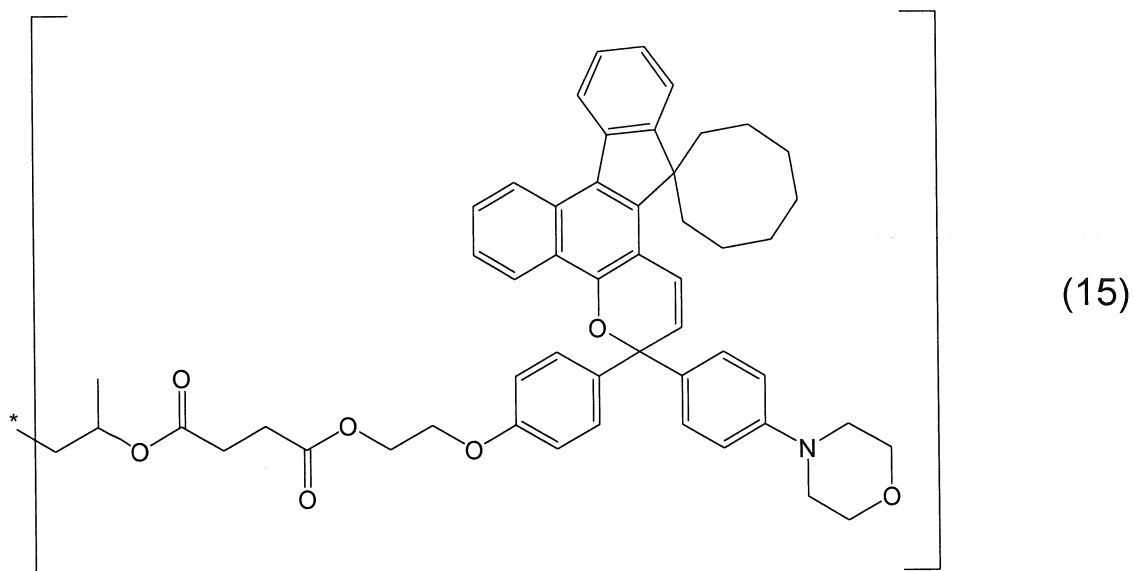
lớp hữu cơ được chưng cất dưới áp suất giảm. Phần cặn thu được được tinh chế bằng cách sắc ký trên silicagel, để thu được 6,6g (7,3mmol) hợp chất được thể hiện bằng công thức (14) sau đây.



Hiệu suất là 95%.

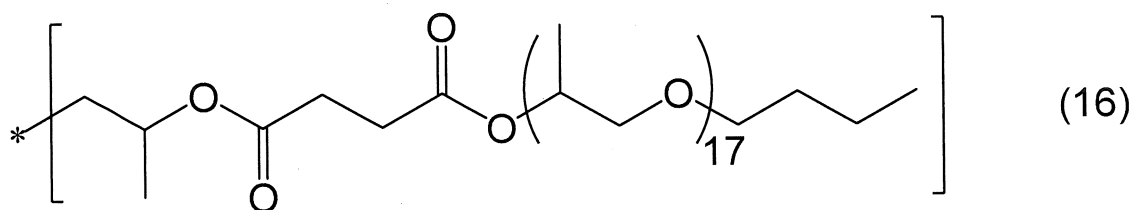
Bước thứ ba

18ml THF (tetrahydrofuran)/DMSO (dimethyl sulfoxit) (1/1, theo thể tích) được bổ sung vào 96mg (0,1mmol) hợp chất được thể hiện bằng công thức (14) nêu trên và 118mg (0,1mmol) 2-hydroxypropyl- α -cyclodextrin có bán trên thị trường và khuấy. Sau đó, 192mg carbodiimide tan trong nước (water-soluble carbodiimide, WSC) và 63mg dimethylaminopyridin (dimethylaminopyridine, DMAP) được bổ sung và khuấy trong 12 giờ trong điều kiện bóng râm. Sau khi khẳng định sự biến mất của các nguyên liệu bằng cách sắc ký lớp mỏng (thin layer chromatography, TLC), nước được bổ sung vào để kết thúc phản ứng. Sau khi chiết bằng ethyl axetat, phần cặn được cô bằng thiết bị làm bay hơi và tạo hỗn dịch đặc lại bằng 10ml axeton, để thu được hợp chất quang sắc được thể hiện bằng công thức (15) sau đây và có nhóm (mạch bên) chứa gốc quang sắc (hiệu suất: 53mg).



Theo $^1\text{H-NMR}$, đã khẳng định được rằng gốc quang sắc được thể hiện bằng công thức (15) nêu trên với số lượng 1,8 gốc được đưa vào α -xyclodextrin.

Sau đó, 28mg hợp chất quang sắc được thể hiện bằng công thức (15) thu được ở trên, 77mg anhydrit succinic, và 0,11ml triethylamin được hòa tan trong 5,0ml diclometan và được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 14 giờ. Sau đó, 138mg polypropylen glycol monobutyl ete (trọng lượng phân tử trung bình số: 1000), 40mg WSC, và 10mg DMAP được bổ sung và được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 12 giờ trong điều kiện bóng râm. Sau khi chưng cất dung môi dưới áp suất giảm, phần cặn được tinh chế bằng cách sắc ký trên silicagel (dung môi hiện hình: axeton/etyl axetat = 5/95), để thu được 67mg hợp chất quang sắc (CyD1) được thể hiện bằng công thức (16) sau đây và có mạch polypropylen glycol monobutyl ete (nhóm mạch dài) được đưa vào đó.



Theo $^1\text{H-NMR}$, đã khẳng định được rằng mạch dài được thể hiện bằng công thức (16) nêu trên với số lượng 9,3 mạch được đưa vào α -xyclodextrin.

Các đặc tính của hợp chất quang sắc thu được (CyD1) được đưa ra dưới đây. Các giá trị bằng số sau đây là giá trị trung bình.

Tổng hóa trị của gốc đa hóa trị

Xyclodextrin (hợp chất tạo thành gốc đa hóa trị) tổng hóa trị: 18

Các nhóm phản ứng còn lại mà không được phản ứng

Số lượng nhóm phản ứng còn lại mà không được phản ứng trong xyclodextrin:

6,9

Các nhóm chứa gốc quang sắc

Số lượng các nhóm chứa gốc quang sắc: 1,8

Mức độ cải biến của mạch bên chứa gốc quang sắc: 0,10 (10%)

Trọng lượng phân tử trung bình số của mạch bên chứa gốc quang sắc: trung bình khoảng 160 (không tính gốc quang sắc)

Nhóm mạch dài

Số lượng các nhóm mạch dài: 9,3

Mức độ cải biến của nhóm mạch dài: 0,52 (52%)

Trọng lượng phân tử trung bình số của các nhóm mạch dài: trung bình khoảng 1200 (tận cùng là nhóm butyl)

Số lượng các nhóm mạch ngắn

Số lượng các nhóm mạch ngắn: 0

Trọng lượng phân tử trung bình khối của chính hợp chất quang sắc

Trọng lượng phân tử trung bình khối M_w (GPC): 13000

Từ các kết quả này, lưu ý rằng CyD1 có cấu trúc trong đó gốc quang sắc được đưa vào 10% các nhóm hydroxy của α -cyclodextrin, và polypropylen glycol monobutyl ete (mạch dài) được đưa vào 52% các nhóm hydroxy của α -cyclodextrin. Ngoài ra, từ các kết quả đo $^1\text{H-NMR}$, lưu ý rằng mạch bên có gốc quang sắc với số lượng trung bình là khoảng 1,8 và mạch dài với số lượng trung bình khoảng 9,3 được đưa vào cho một phân tử.

Ví dụ 2

Điều chế chế phẩm có thể hóa rắn (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "(Y1)"), và tạo ra và đánh giá sản phẩm quang sắc hóa rắn

Điều chế chế phẩm có thể hóa rắn

Theo công thức sau đây, các thành phần tương ứng được trộn kỹ để điều chế chế phẩm quang sắc có thể hóa rắn (Y1).

Công thức:

(A) Hợp chất quang sắc

CyD1 (được điều chế trong Ví dụ 1) 69,3mg (thuốc nhuộm quang sắc: 9,6 μmol)

(B) Hợp chất có thể polyme hóa

(B1-1-1-4) Norbornen metan diisoxyanat: 4,58g

(B3-2) Pentaerythritol tetrakis(3-mercaptopropionat): 5,42g

(C) Chất tăng tốc polyme hóa-hóa rắn

(C3-1) Dimetyl thiếc diclorua: 10mg

Tạo ra và đánh giá sản phẩm quang sắc hóa rắn

Bằng cách sử dụng chế phẩm có thể hóa rắn (Y1) nêu trên, sản phẩm quang sắc

hóa rắn đã thu được bằng phương pháp ngào trộn. Do các hợp chất có thể polyme hóa (B) được sử dụng trong chế phẩm có thể hóa rắn (Y1) là norbornen metan diisoxyanat và pentaerytritol tetrakis(3-mercaptopropionat), nên được tạo thành từ các hợp chất có thể polyme hóa (B) này có khoảng không tự do hẹp. Do đó, rõ ràng là miễn là các đặc tính quang sắc có thể đạt được trong nền này, các đặc tính quang sắc tuyệt vời hơn sẽ đạt được.

Phương pháp polyme hóa được mô tả dưới đây.

Sau khi chế phẩm có thể hóa rắn (Y1) nêu trên được khử bọt kỹ, chế phẩm này được bơm vào khuôn đúc bao gồm khuôn đúc dày 2mm được tạo bởi các khuôn thủy tinh đã được xử lý chống dính khuôn và lớp đệm copolyme etylen-vinyl axetat. Sau đó, chế phẩm này được hóa rắn trong 15 giờ trong khi tăng dần nhiệt độ từ 30°C đến 95°C. Sau khi kết thúc quá trình polyme hóa, sản phẩm quang sắc hóa rắn được tháo ra khỏi các khuôn thủy tinh của khuôn đúc.

Sản phẩm quang sắc hóa rắn thu được được sử dụng làm mẫu và được tiếp xúc với ánh sáng có cường độ chùm sáng ở 365nm là 2,4 mW/cm² trên bề mặt của polyme (lớp phủ quang sắc) và ở 245nm là 24 μW/cm² với đèn xenon SHL-100 L-2480 (300 W), là sản phẩm của Hamamatsu Photonics K.K. thông qua bộ lọc khối lượng không khí (sản phẩm của Corning Incorporated) ở nhiệt độ 20±1°C trong 120 giây, bằng cách đó hiện màu và đo các đặc tính quang sắc của sản phẩm quang sắc nhiều lớp. Các đặc tính quang sắc tương ứng được đánh giá bằng các phương pháp sau đây. Các kết quả được thể hiện trong bảng 1.

Bước sóng hấp thụ cực đại (λ_{max}):

Đây là bước sóng hấp thụ cực đại sau khi hiện màu được xác định bằng phổ quang kế (bộ tách sóng quang đa kênh tức thời MCPD1000), là sản phẩm của Otsuka Electronics Co., Ltd. Bước sóng hấp thụ cực đại có liên quan tới tông màu ở thời điểm hiện màu.

Mật độ quang màu $\{\epsilon(120) - \epsilon(0)\}$:

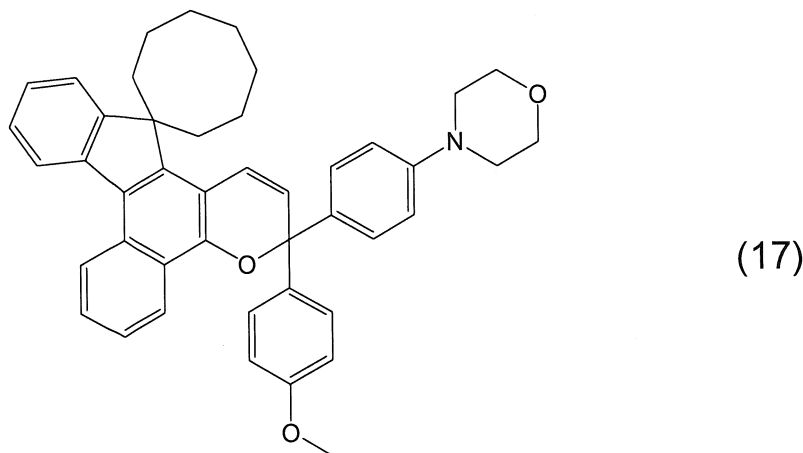
Hiệu số giữa năng suất hấp thụ $\{\epsilon(120)\}$ sau 120 giây tiếp xúc với ánh sáng ở bước sóng hấp thụ cực đại nêu trên và năng suất hấp thụ $\epsilon(0)$ trước khi tiếp xúc. Có thể cho rằng khi giá trị này trở thành lớn hơn, các đặc tính quang sắc trở nên tuyệt vời hơn.

Tốc độ mất màu $[t_{1/2} \text{ (giây)}]$:

Thời gian cho đến khi năng suất hấp thụ ở bước sóng hấp thụ cực đại của mẫu nêu trên giảm tới $1/2 \{\epsilon(120) - \epsilon(0)\}$ khi sự tiếp xúc với ánh sáng được tiếp tục trong 120 giây và sau đó ngừng lại. Có thể cho rằng khi thời gian này trở nên ngắn hơn, các đặc tính quang sắc trở nên tuyệt vời hơn.

Ví dụ so sánh 1

Thay vì hợp chất quang sắc trong Ví dụ 1, hợp chất quang sắc (d1) chỉ bao gồm gốc quang sắc và được thể hiện bằng công thức (17) sau đây được tổng hợp theo phương pháp được mô tả trong WO 2006/022825 A.

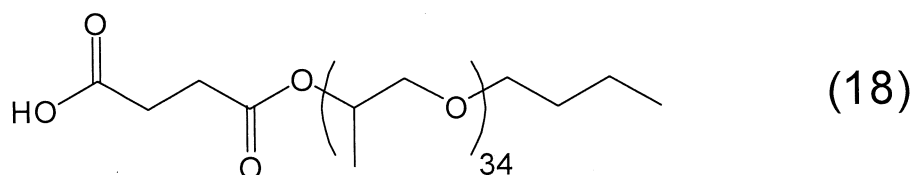


Bằng cách sử dụng hợp chất quang sắc (d1) thu được, chế phẩm có thể hóa rắn (y1) chứa các hợp chất có thể polyme hóa (B) và chất tăng tốc hóa rắn polyme hóa (C) thuộc các loại khác nhau và các tỷ lệ trộn giống như trong Ví dụ 2 được tạo ra sao cho phần của thuốc nhuộm quang sắc là 9,6 μmol . Bằng cách sử dụng chế phẩm có thể hóa rắn (y1) thu được này, các thao tác giống như trong Ví dụ 2 được thực hiện, và việc đánh giá giống như thế được thực hiện. Các kết quả được thể hiện trong bảng 1.

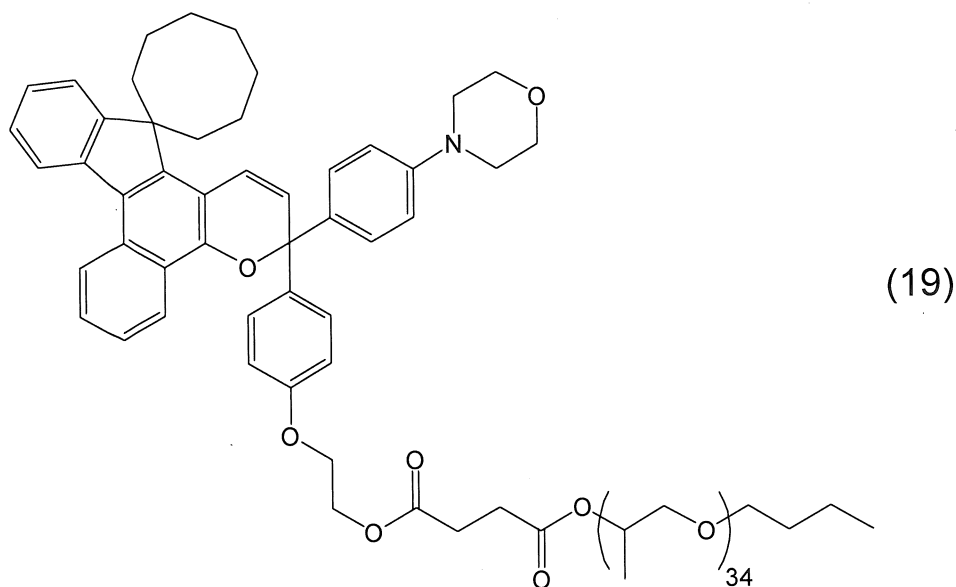
Ví dụ so sánh 2

Thay vì hợp chất quang sắc trong Ví dụ 1, hợp chất quang sắc (d2) không chứa gốc đa hóa trị, tức là hợp chất trong đó nhóm mạch dài và gốc quang sắc được liên kết trực tiếp với nhau, được tổng hợp.

4,14g (5,0mmol) hợp chất được thể hiện bằng công thức (13) nêu trên được hòa tan trong diclometan được loại nước, sau đó 11,0g sản phẩm cộng axit succinic của polypropylen glycol monobutyl ete (trọng lượng phân tử trung bình số: 2000) được thể hiện bằng công thức (18) sau đây được bổ sung vào đó:



2,0g WSC và 120mg DMAP, sau đó khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 14 giờ trong điều kiện bóng râm. Sau khi khẳng định sự biến mất của các nguyên liệu bằng cách TLC, lớp hữu cơ được rửa bằng nước và chưng cất bằng thiết bị làm bay hơi dưới áp suất giảm. Phần cặn được tinh chế bằng cách sắc ký trên silicagel (dung môi hiện hình: axeton/etyl axetat = 5/95), để thu được chất dạng dầu (hiệu suất: 78%) được thể hiện bằng công thức (19) sau đây.



Bằng cách sử dụng 30,7mg hợp chất quang sắc liên kết với mạch dài (d2) được thể hiện bằng công thức (19) nêu trên, các thao tác giống như trong Ví dụ so sánh 1 được thực hiện để điều chế chế phẩm có thể hóa rắn (y2) (sau đây đôi khi được gọi đơn giản là "(y2)"), mà từ đó sản phẩm quang sắc hóa rắn được tạo ra và được đánh giá. Các kết quả được thể hiện trong bảng 1.

Bảng 1

	Hợp chất	Chế phẩm	$\lambda_{\max}$	Mật độ quang màu	Tốc độ mất màu
Ví dụ 2	CyD1	Y1	565nm	0,60	92 giây
Ví dụ so sánh 1	d1	y1	565nm	0,01	-
Ví dụ so sánh 2	d2	y2	565nm	0,29	260 giây

Trong các sản phẩm quang sắc được hóa rắn thu được, hợp chất d1 (Ví dụ so sánh 1) không có các đặc tính quang sắc. Thực tế này chứng tỏ rằng nền thiouretan nêu trên có mật độ liên kết ngang cao và không có khoảng không tự do có thể cho phép bộc lộ các đặc tính quang sắc của hợp chất d1.

Mặc dù hợp chất d2 (Ví dụ so sánh 2) trong đó mạch dài được liên kết trực tiếp với hợp chất d1 có các đặc tính quang sắc, nó mang lại các kết quả là mật độ quang màu mỏng, và tốc độ mất màu thấp. Điều này chứng tỏ rằng việc chỉ đưa mạch dài vào vẫn không đủ để tạo ra cấu trúc tách pha vi mô, và do đó, khoảng không tự do cần và đủ để bộc lộ các đặc tính quang sắc có lợi không thể được tạo ra.

Như đã thấy rõ từ Ví dụ 2 có liên quan đến sáng chế, đã rõ ràng là khi cấu trúc tách pha vi mô như trong sáng chế được thiết kế trước làm cấu trúc phân tử của hợp chất quang sắc, thậm chí trong nền mà ban đầu không có khoảng không tự do có thể cho phép bộc lộ các đặc tính quang sắc, các đặc tính quang sắc có lợi có thể đạt được.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất quang sắc bao gồm:

gốc đa hóa trị mà trên đó

ít nhất một nhóm có gốc quang sắc được thể,

ít nhất một nhóm mạch dài không chứa gốc quang sắc và có trọng lượng phân tử lớn hơn hoặc bằng 300 tiếp tục được thể, và

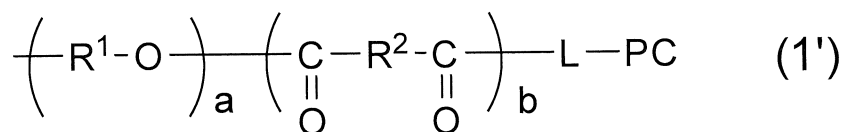
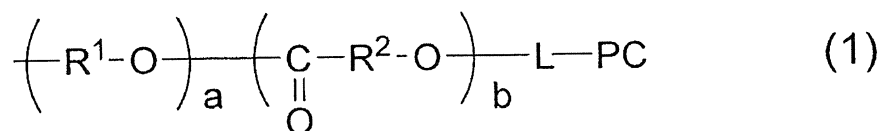
trong đó gốc đa hóa trị được tạo bởi phân tử mạch vòng, và phân tử mạch vòng là ít nhất một thành phần được chọn từ nhóm bao gồm vòng xyclodextrin, ete crao, benzo-crao, dibenzo-crao, và dixyclohexano-crao.

2. Hợp chất quang sắc theo điểm 1, trong đó tổng số lượng của nhóm có gốc quang sắc và số lượng của nhóm mạch dài cho một phân tử hợp chất quang sắc nằm trong khoảng từ 2 đến 30.

3. Hợp chất quang sắc theo điểm 1 hoặc 2, trong đó gốc quang sắc có ít nhất một cấu trúc được chọn từ nhóm bao gồm naphthopyran, spirooxazin, spiropyran, fulgit, fulgimit, và diaryleten.

4. Hợp chất quang sắc theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 3, trong đó gốc quang sắc là indeno[2,1-f]naphto[1,2-b]pyran.

5. Hợp chất quang sắc theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4, trong đó nhóm có gốc quang sắc là nhóm được thể hiện bằng công thức (1) hoặc (1') sau đây:



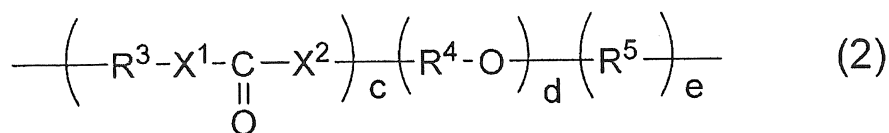
trong đó,

PC là nhóm quang sắc;

R¹ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon;

R² là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có mạch nhánh là nhóm axetyl và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có liên kết ete và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

L là nhóm hóa trị hai được thể hiện bằng công thức (2) sau đây:



trong đó,

R^3 là liên kết đơn, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

R^4 là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm dialkylsilyl có nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon;

R^5 là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

mỗi nhóm X^1 và X^2 độc lập là liên kết đơn, O, hoặc NH;

c là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, d là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, và e là số nguyên bằng 0 hoặc 1;

khi c bằng hoặc lớn hơn 2, thì các nhóm hóa trị hai được đóng bởi dấu ngoặc đơn của "c" có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

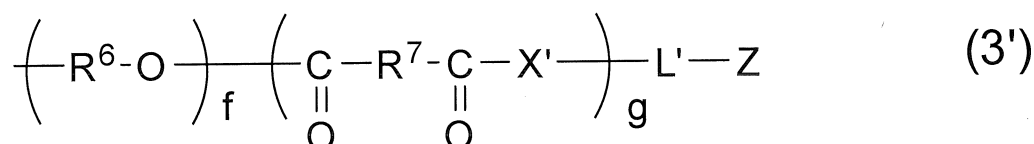
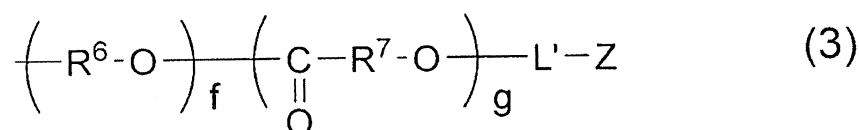
khi d bằng hoặc lớn hơn 2, thì các nhóm hóa trị hai được đóng bởi dấu ngoặc đơn của "d" có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

a là số nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 50, và b là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50;

khi a bằng hoặc lớn hơn 2, thì các nhóm hóa trị hai được đóng bởi dấu ngoặc đơn của "a" có thể là giống nhau hoặc khác nhau; và

khi b bằng hoặc lớn hơn 2, các nhóm hóa trị hai được đóng bởi dấu ngoặc đơn của "b" có thể là giống nhau hoặc khác nhau.

6. Hợp chất quang sắc theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 5, trong đó nhóm mạch dài được thể hiện bằng công thức (3) hoặc (3') sau đây:



trong đó,

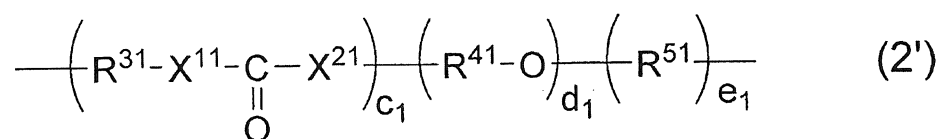
Z là nhóm alkyl có 1 đến 10 nguyên tử cacbon hoặc nhóm có thể polyme hóa;

R⁶ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon;

R⁷ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 2 đến 8 nguyên tử cacbon, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có mạch nhánh là nhóm axetyl và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có liên kết ete và có 3 đến 8 nguyên tử cacbon;

X' là liên kết đơn, O, hoặc NH; và

L' là nhóm hóa trị hai được thể hiện bằng công thức (2') sau đây:



trong đó,

R³¹ là liên kết đơn, nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

R⁴¹ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm dialkylsilyl có nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon;

R⁵¹ là nhóm alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, nhóm xycloalkylen có 3 đến 12 nguyên tử cacbon, hoặc nhóm thơm có 6 đến 12 nguyên tử cacbon;

mỗi nhóm X¹¹ và X²¹ độc lập là liên kết đơn, O, hoặc NH;

c₁ là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, d₁ là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50, và e₁ là số nguyên bằng 0 hoặc 1;

khi c₁ bằng hoặc lớn hơn 2, thì các nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

khi d₁ bằng hoặc lớn hơn 2, thì các nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau;

f là số nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 50, và g là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 50;

khi f bằng hoặc lớn hơn 2, thì các nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau; và

khi g bằng hoặc lớn hơn 2, thì các nhóm hóa trị hai có thể là giống nhau hoặc khác nhau.

7. Hợp chất quang sắc theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 6, trong đó hợp chất này có trọng lượng phân tử trung bình khối bằng hoặc lớn hơn 2000.
8. Chế phẩm có thể hóa rắn chứa hợp chất quang sắc theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 7 và hợp chất có thể polyme hóa.
9. Sản phẩm quang sắc hóa rắn thu được bằng cách hóa rắn chế phẩm có thể hóa rắn theo điểm 8.

[Fig.1]

