



(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

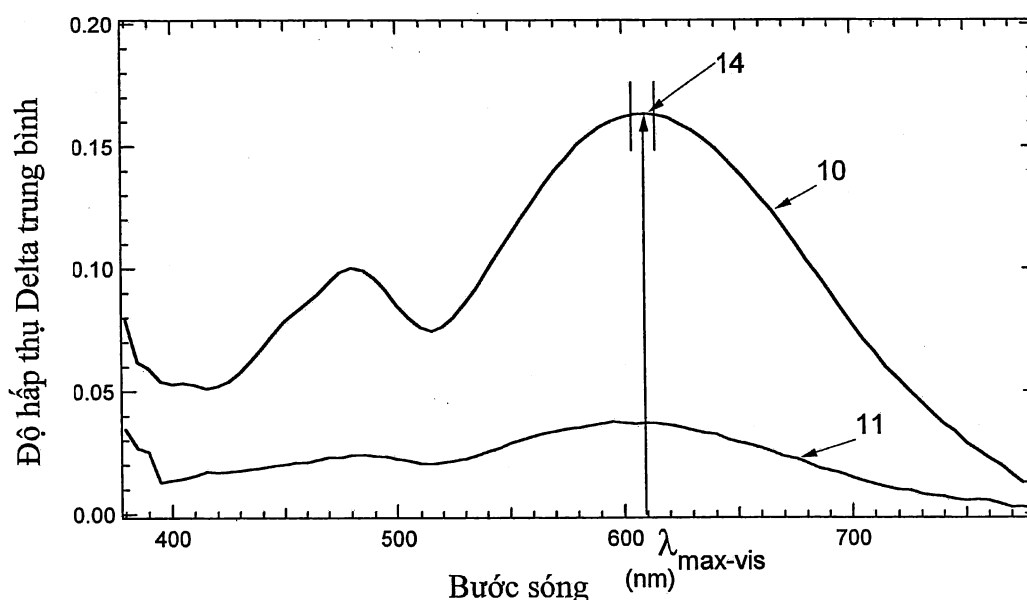
(11) 
1-0019545

(51)⁷ **G03C 1/73, C07D 311/94, C09K 9/02** (13) **B**

(21) 1-2013-01815 (22) 17.11.2011
(86) PCT/US2011/061149 17.11.2011 (87) WO2012/082299 21.06.2012
(30) 12/928,687 16.12.2010 US
(45) 27.08.2018 365 (43) 25.02.2014 311
(73) TRANSITIONS OPTICAL, INC. (US)
9251 Belcher Road, Pinellas Park, Florida 33782, United States of America
(72) HE, Meng (US), DABIDEEN, Darrin, R. (US), KUMAR, Anil (US), XU, Ruisong (US)
(74) Công ty Cổ phần Sở hữu công nghiệp INVESTIP (INVESTIP)

(54) **HỢP CHẤT, CHẾ PHẨM VÀ SẢN PHẨM ĐỔI MÀU THEO ÁNH SÁNG**

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất chứa cấu trúc indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran. Hợp chất này là hữu ích cho các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và được sử dụng trong một số chế phẩm đổi màu theo ánh sáng. Các chế phẩm này có thể chứa thêm các chế phẩm và/hoặc các vật liệu đổi màu theo ánh sáng khác. Ngoài ra, hợp chất và/hoặc chế phẩm theo sáng chế có thể thích hợp để điều chế một số hợp chất, chế phẩm và sản phẩm đổi màu theo ánh sáng.



Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến các hợp chất đổi màu theo ánh sáng và thiết bị được sản xuất sử dụng các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được mô tả ở đây.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường có ít nhất hai trạng thái, trạng thái thứ nhất có phổ hấp thụ thứ nhất và trạng thái thứ hai có phổ hấp thụ thứ hai khác phổ hấp thụ thứ nhất, và có khả năng chuyển đổi giữa hai trạng thái này để đáp ứng với ít nhất là bức xạ quang hóa. Hơn nữa, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường có thể thuận nghịch nhiệt. Tức là, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường có khả năng chuyển đổi giữa trạng thái thứ nhất và trạng thái thứ hai để đáp ứng với ít nhất bức xạ quang hóa và trở lại trạng thái thứ nhất để đáp ứng với năng lượng nhiệt. Như được sử dụng ở đây "bức xạ quang hóa" có nghĩa là bức xạ điện từ, chẳng hạn như nhưng không giới hạn ở bức xạ tử ngoại và khả kiến có khả năng gây đáp ứng. Cụ thể hơn, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường có thể trải qua sự biến đổi để đáp ứng với bức xạ quang hóa từ dạng chất đồng phân này sang dạng kia, mỗi chất đồng phân có phổ hấp thụ đặc trưng, và có thể tiếp tục chuyển đổi lại lần nữa thành chất đồng phân thứ nhất để đáp ứng với năng lượng nhiệt (tức là, thuận nghịch nhiệt). Ví dụ, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt thông thường có khả năng chuyển đổi từ trạng thái thứ nhất, ví dụ "trạng thái trong," sang trạng thái thứ hai, ví dụ "trạng thái màu," tương ứng với bức xạ quang hóa và trở lại thành trạng thái "trong" để đáp ứng với năng lượng nhiệt.

Các hợp chất lưỡng sắc là các hợp chất có khả năng hấp thụ một trong hai thành phần phân cực mặt phẳng trực giao của bức xạ được truyền mạnh hơn thành phần kia. Vì vậy, các hợp chất lưỡng sắc có khả năng bức xạ được truyền phân cực tuyến tính. Như được sử dụng ở đây, "phân cực tuyến tính" có nghĩa là giới hạn các dao động của vectơ điện của các sóng ánh sáng theo một hướng hoặc mặt phẳng. Tuy nhiên, mặc dù các vật liệu lưỡng sắc có khả năng hấp thụ ưu tiên một trong hai thành phần phân cực mặt phẳng trực giao của bức xạ được truyền, nếu các phân tử của hợp chất lưỡng sắc này không được định vị hoặc sắp xếp một cách thích hợp, thì sẽ không đạt được sự phân cực tuyến tính mạng lưới của bức xạ được truyền. Tức là, do sự định vị ngẫu

nhiên của các phân tử của hợp chất lưỡng sắc này, sự hấp thụ chọn lọc bởi các phân tử đơn lẻ sẽ triệt tiêu nhau sao cho không đạt được hiệu quả phân cực tuyến tính mạng lưới hoặc toàn diện. Vì vậy, nói chung cần định vị hoặc sắp xếp một cách thích hợp các phân tử của hợp chất lưỡng sắc này trong vật liệu khác để tạo thành chi tiết phân cực tuyến tính thông thường, như bộ lọc hoặc thấu kính phân cực tuyến tính cho kính chống nắng.

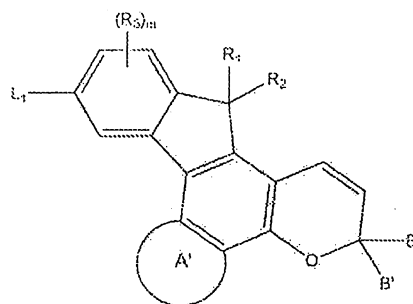
Ngược lại với các hợp chất lưỡng sắc, nói chung không cần định vị hoặc sắp xếp các phân tử của các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường để tạo thành chi tiết đổi màu theo ánh sáng thông thường. Vì vậy, ví dụ, các chi tiết đổi màu theo ánh sáng thông thường, như thấu kính đeo mắt đổi màu theo ánh sáng, có thể được tạo thành, ví dụ, bằng cách phủ quay dung dịch chứa hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường và vật liệu "chủ" lên trên bề mặt của thấu kính này, và lưu hóa một cách thích hợp lớp phủ hoặc lớp tạo thành mà không sắp xếp hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo sự định hướng cụ thể bất kỳ. Hơn nữa, ngay cả nếu các phân tử của hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường được định vị hoặc được sắp xếp một cách thích hợp như được mô tả ở trên với các hợp chất lưỡng sắc, vì các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường không biểu lộ một cách mạnh mẽ tính lưỡng sắc, nên các chi tiết được làm từ chúng thường không phân cực tuyến tính mạnh.

Có nhu cầu ưu tiên là tạo ra các hợp chất đổi màu theo ánh sáng, nhưng không giới hạn ở các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt, có thể thể hiện các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và/hoặc lưỡng sắc hữu ích ở ít nhất một trạng thái, và có thể được sử dụng trong nhiều ứng dụng khác nhau để tạo ra các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và/hoặc lưỡng sắc.

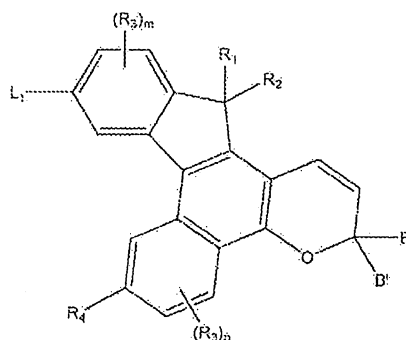
Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Mục đích của sáng chế là nhằm tạo ra các hợp chất đổi màu theo ánh sáng, nhưng không giới hạn ở các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt, có thể thể hiện các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và/hoặc lưỡng sắc hữu ích ở ít nhất một trạng thái, và có thể được sử dụng trong nhiều ứng dụng khác nhau để tạo ra các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và/hoặc lưỡng sắc.

Cụ thể, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức I và IA dưới đây:



Công thức I



Công thức IA

trong đó:

A' được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế và heteroaryl tùy ý được thế; trong đó A' tùy ý được thế bởi L₂;

Mỗi R₁ và R₂ độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, hydroxy và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm heteroalkyl tùy ý được thế, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, halogen, amino tùy ý được thế, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkoxy tùy ý được thế, và aminocacbonyl, hoặc R₁ và R₂ có thể cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm oxo, xycloalkyl tùy ý được thế, và heteroxycloalkyl tùy ý được thế; và

R₃ mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm formyl, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, arylcacbonyl, aryloxycacbonyl, aminocacbonyloxy, alkoxycacbonylamino, aryloxycacbonylamino, axit boronic, các este của axit boronic, xycloalkoxycacbonylamino, heteroxyclo-alkyloxycacbonylamino, heteroaryloxycacbonylamino, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, halogen, xycloalkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý

được thế, alkoxy tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, và amino tùy ý được thế;

R_4 được chọn từ nhóm bao gồm hydro, R_3 và L_2 ;

mỗi m và n độc lập là số nguyên được chọn từ 0 đến 3;

Mỗi B và B' độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L_3 , hydro, halogen, và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm metallocenyl, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, và xycloalkyl tùy ý được thế, hoặc trong đó B và B' cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế; và

L_1 , L_2 , và L_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm kéo dài đối ảnh hoặc không đối ảnh có công thức:

$-[S_1]_c-[Q_1-[S_2]_d]_d-[Q_2-[S_3]_e]_e-[Q_3-[S_4]_f]_f-S_5-P$ trong đó:

(a) Q_1 , Q_2 , và Q_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

trong đó các phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm P , mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly(C_1 - C_{18} alkoxy), C_1 - C_{18} alkoxycarbonyl, C_1 - C_{18} alkylcarbonyl, C_1 - C_{18} alkoxycarbonyloxy, aryloxy carbonyloxy, perflo(C_1 - C_{18})alkoxy, perflo(C_1 - C_{18})alkoxycarbonyl, perflo(C_1 - C_{18})alkylcarbonyl, perflo(C_1 - C_{18})alkylamino, di(perflo(C_1 - C_{18})alkyl)amino, perflo(C_1 - C_{18})alkylthio, C_1 - C_{18} alkylthio, C_1 - C_{18} axetyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl, C_3 - C_{10} xycloalkoxy, C_1 - C_{18} alkyl mạch thẳng, và C_1 - C_{18} alkyl mạch nhánh;

trong đó C_1 - C_{18} alkyl mạch thẳng và C_1 - C_{18} alkyl mạch nhánh này được thế một lần bằng nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xyano, halogen, và C_1 - C_{18} alkoxy; hoặc

trong đó C_1 - C_{18} alkyl mạch thẳng và C_1 - C_{18} alkyl mạch nhánh này được thế nhiều lần bằng ít nhất hai nhóm độc lập được chọn từ nhóm bao gồm halogen, $-M(T)_{(t-1)}$ và $-M(OT)_{(t-1)}$, trong đó M được chọn từ nhóm bao gồm nhôm, antimon, tantali, titan, zirconi và silicon, T được chọn từ nhóm bao gồm gốc chức hữu cơ, gốc hydrocacbon chức hữu cơ, gốc hydrocacbon béo và gốc hydrocacbon thơm, và t là hóa trị của M ;

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

- (i) alkylen tùy ý được thế, haloalkylen tùy ý được thế, $-\text{Si}(\text{CH}_2)_9-$, và $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$, trong đó mỗi lần xuất hiện g độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 20; mỗi lần xuất hiện h độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 16; và các phần tử thế cho alkylen và haloalkylen này độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{18} alkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl và aryl;
- (ii) $-\text{N}(\text{Z})-$, $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$, $-\text{C}(\text{Z})=\text{N}-$, $-\text{C}(\text{Z}')_2-\text{C}(\text{Z}')_2-$, và liên kết đơn, trong đó mỗi lần xuất hiện Z độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_{18} alkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl và aryl, và Z' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{18} alkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl và aryl; và
- (iii) $-\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{N}=\text{N}-$, $-\text{S}-$, $-\text{S}(=\text{O})-$, $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O})-$, $-\text{O}(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O})-$ và gốc C_1 - C_{24} alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh, gốc C_1 - C_{24} alkylen này không được thế, được thế một lần bởi xyano hoặc halogen, hoặc được thế nhiều lần bởi halogen,

với điều kiện là nếu hai đơn vị đệm chứa nguyên tử khác loại được liên kết với các đơn vị đệm sao cho các nguyên tử khác loại không được liên kết trực tiếp với nhau, thì mỗi liên kết giữa S_1 và hợp chất có công thức I và/hoặc IA không có hai các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau, và liên kết giữa S_5 và P không có hai nguyên tử khác loại được liên kết với nhau;

(c) P mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydroxy, amino, C_2 - C_{18} alkenyl, C_2 - C_{18} alkynyl, azido, silyl, siloxy, silylhydrua, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, thio, isoxyanato, thioisoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, 2-(acryloyloxy)ethylcabamyl, 2-(metacryloyloxy)ethylcabamyl, aziridinyl, alyloxyacabonyloxy, epoxy, axit cacboxylic, este cacboxylic, acryloylamino, metacryloylamino, aminocabonyl, C_1 - C_{18} alkyl aminocabonyl, aminocabonyl(C_1 - C_{18})alkyl, C_1 - C_{18} alkyloxyacabonyloxy, halocabonyl, hydro, aryl, hydroxy(C_1 - C_{18})alkyl, C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, amino(C_1 - C_{18})alkyl, C_1 - C_{18} alkylamino, di-(C_1 - C_{18})alkylamino, C_1 - C_{18} alkyl(C_1 - C_{18})alkoxy, C_1 - C_{18} alkoxy(C_1 - C_{18})alkoxy, nitro, poly(C_1 - C_{18})alkyl ete, (C_1 - C_{18})alkyl(C_1 - C_{18})alkoxy(C_1 - C_{18})alkyl, polyetylenoxy, polypropylenoxy, etylen, acryloyl, acryloyloxy(C_1 - C_{18})alkyl, metacryloyl,

metacryloyloxy(C_1 - C_{18})alkyl, 2-cloacryloyl, 2-phenylacryloyl, acryloyloxyphenyl, 2-cloacryloylamino, 2-phenylacryloylaminocarbonyl, oxetanyl, glyxidyl, xyano, isoxyanato(C_1 - C_{18})alkyl, este của axit itaconic, vinyl ete, vinyl este, dẫn xuất styren, polyme tinh thể lỏng mạch chính và mạch nhánh, dẫn xuất siloxan, dẫn xuất etylenimin, dẫn xuất axit maleic, dẫn xuất maleimit, dẫn xuất axit fumaric, dẫn xuất axit xinamic không được thế, dẫn xuất axit xinamic được thế bởi ít nhất một nhóm methyl, metoxy, xyano và halogen, và nhóm đối ảnh hoặc không-đối ảnh được thế hoặc không được thế hóa trị một hoặc hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm gốc steroid, gốc terpenoit, gốc alkaloit và hỗn hợp của chúng, trong đó các phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, amino, C_3 - C_{10} xycloalkyl, C_1 - C_{18} alkyl(C_1 - C_{18})alkoxy, flo(C_1 - C_{18})alkyl, xyano, xyano(C_1 - C_{18})alkyl, xyano(C_1 - C_{18})alkoxy hoặc hỗn hợp của chúng, hoặc P là cấu trúc có từ 2 đến 4 nhóm phản ứng hoặc P là tiền chất polyme hóa hoán vị mở vòng không được thế hoặc được thế hoặc P là hợp chất đổi màu theo ánh sáng được thế hoặc không được thế; và

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

Sáng chế cũng đề xuất chế phẩm đổi màu theo ánh sáng và sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa ít nhất một hợp chất có các công thức I và IA.

Mô tả vắn tắt hình vẽ

Các phương án không giới hạn khác nhau của bản mô tả này sẽ được hiểu rõ hơn khi đọc kèm với các hình vẽ, trong đó:

Fig. 1 thể hiện hai phổ hấp thụ biệt hóa trung bình thu được với hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây sử dụng phương pháp "CELL METHOD".

Mô tả chi tiết sáng chế

Như được sử dụng trong bản mô tả này, các từ, cụm từ và ký hiệu dưới đây có ý nghĩa như được nêu dưới đây, ngoại trừ những ngữ cảnh trong đó chúng được sử dụng với ý nghĩa khác. Các chữ viết tắt và thuật ngữ dưới đây có ý nghĩa xuyên suốt bản mô tả:

Dấu (" - ") không nằm giữa hai chữ hoặc ký hiệu được sử dụng để chỉ điểm gắn của nhóm thế. Ví dụ, $-CONH_2$ được gắn qua nguyên tử cacbon.

"Alkyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc hydrocacbon hóa trị một no hoặc không no, mạch nhánh, hoặc mạch thẳng được dẫn xuất bằng cách loại bỏ một nguyên tử hydro khỏi nguyên tử cacbon đơn của alkan, alken, hoặc alkyn ban đầu. Các ví dụ về các nhóm alkyl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, metyl; các etyl như etanyl, etenyl, và etynyl; các propyl như propan-1-yl, propan-2-yl, prop-1-en-1-yl, prop-1-en-2-yl, prop-2-en-1-yl (allyl), prop-1-yn-1-yl, prop-2-yn-1-yl, và các nhóm tương tự; các butyl như butan-1-yl, butan-2-yl, 2-metylpropan-1-yl, 2-metylpropan-2-yl, but-1-en-1-yl, but-1-en-2-yl, 2-metylprop-1-en-1-yl, but-2-en-1-yl, but-2-en-2-yl, buta-1,3-dien-1-yl, buta-1,3-dien-2-yl, but-1-yn-1-yl, but-1-yn-3-yl, but-3-yn-1-yl; và các nhóm tương tự.

Thuật ngữ "alkyl" được dự định cụ thể bao gồm các nhóm có cấp độ hoặc mức bão hòa bất kỳ, tức là, các nhóm có các liên kết cacbon-cacbon đơn riêng, các nhóm có một hoặc nhiều liên kết cacbon-cacbon đôi, các nhóm có một hoặc nhiều liên kết cacbon-cacbon ba, và các nhóm có hỗn hợp gồm các liên kết cacbon-cacbon đơn, đôi và ba. Nếu mức bão hòa cụ thể được dự định, thì các thuật ngữ "alkanyl," "alkenyl," và "alkynyl" được sử dụng. Trong một số phương án, nhóm alkyl bao gồm từ 1 đến 20 nguyên tử cacbon, trong một số phương án, từ 1 đến 10 nguyên tử cacbon, trong một số phương án, từ 1 đến 8 hoặc từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, và trong một số phương án từ 1 đến 3 nguyên tử cacbon.

"Axl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc C(O)R^{30} , trong đó R^{30} là hydro, alkyl, heteroalkyl, xycloalkyl, heteroxycloalkyl, xycloalkylalkyl, heteroxycloalkylalkyl, aryl, heteroaryl, arylalkyl, hoặc heteroarylalkyl, có thể được thế, như được định nghĩa ở đây. Các ví dụ về các nhóm axyl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, formyl, axetyl, xyclohexylcacbonyl, xyclohexylmetylcacbonyl, benzoyl, benzylcacbonyl.

"Alkoxy" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc -OR^{31} trong đó R^{31} là alkyl, xycloalkyl, xycloalkylalkyl, aryl, hoặc arylalkyl, có thể được thế, như được định nghĩa ở đây. Trong một số phương án, các nhóm alkoxy có từ 1 đến 18 nguyên tử cacbon. Các ví dụ về các nhóm alkoxy bao gồm, nhưng không giới hạn ở, metoxy, etoxy, propoxy, butoxy, xyclohexyloxy.

"Alkoxyacbonyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc $-C(O)OR^{31}$ trong đó R^{31} là alkyl, xycloalkyl, xycloalkylalkyl, aryl, hoặc arylalkyl, có thể được thế, như được định nghĩa ở đây.

"Amino" dùng để chỉ gốc $-NH_2$.

"Aminocacbonyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc có công thức $-N(R^{60})C(O)R^{60}$ trong đó mỗi R^{60} độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, alkyl, alkyl được thế, alkoxy, alkoxy được thế, xycloalkyl, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, aryl, aryl được thế, heteroaryl, heteroaryl được thế, arylalkyl, arylalkyl được thế, heteroarylalkyl.

"Aryl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc hydrocacbon thơm hóa trị một được dẫn xuất bằng cách loại bỏ một nguyên tử hydro khỏi nguyên tử cacbon đơn của hệ vòng thơm ban đầu, Aryl bao gồm các vòng thơm cacboxylic 5- và 6-Cạnh, ví dụ, benzen; hệ vòng đôi trong đó ít nhất một vòng là cacboxylic và thơm, ví dụ, naphtalen, indan, và tetralin; và hệ vòng ba trong đó ít nhất một vòng là vòng cacbon và thơm, ví dụ, fluoren. Aryl bao gồm hệ vòng đa có ít nhất một vòng vòng cacbon thơm được ngưng tụ với ít nhất một vòng vòng cacbon thơm, vòng xycloalkyl, hoặc vòng heteroxycloalkyl. Ví dụ, aryl bao gồm vòng vòng cacbon thơm 5- và 6-cạnh được ngưng tụ với vòng heteroxycloalkyl có từ 5- đến 7-cạnh chứa một hoặc nhiều nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm bao gồm N, O, và S. Với các hệ vòng đôi ngưng tụ này trong đó chỉ một trong số các vòng là vòng vòng cacbon thơm, điểm gắn có thể là tại vòng vòng cacbon thơm hoặc vòng heteroxycloalkyl. Các ví dụ về các nhóm aryl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các nhóm dẫn xuất từ axeanthrylen, axenaphtylen, axephenanthrylen, anthraxen, azulen, benzen, chrysen, corone, fluoranthen, fluoren, hexaxen, hexaphen, hexalen, as-indaxen, s-indaxen, indan, inden, naphtalen, octaxen, octaphen, octalen, ovalen, penta-2,4-dien, pentaxen, pentalen, pentaphen, peryten, phenalen, phenanthren, picen, pleladen, pyren, pyranthren, rubicen, triphenylen, trinaphtalen. Trong một số phương án, nhóm aryl có thể bao gồm từ 5 đến 20 nguyên tử cacbon, và trong một số phương án, từ 5 đến 12 nguyên tử cacbon. Tuy nhiên, aryl không bao gồm hoặc trùng theo cách bất kỳ với heteroaryl, được định nghĩa riêng rẽ ở đây. Do đó, hệ vòng đa trong đó một hoặc nhiều vòng vòng cacbon thơm được ngưng tụ với vòng thơm heteroxycloalkyl, là heteroaryl, không phải aryl, như được định nghĩa ở đây.

"Arylalkyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc alkyl alicyclic trong đó một trong số các nguyên tử hydro được liên kết với nguyên tử cacbon, thông thường nguyên tử cacbon đầu cuối hoặc sp^3 , được thay bằng nhóm aryl. Các ví dụ về các nhóm arylalkyl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, benzyl, 2-phenyletan-1-yl, 2-phenyleten-1-yl, naphthylmetyl, 2-naphtyletan-1-yl, 2-naphtyleten-1-yl, naphetobenzyl, 2-naphetophenyletan-1-yl. Trong đó các gốc alkyl cụ thể được dự định, thuật ngữ arylalkanyl, arylalkenyl, hoặc arylalkynyl được sử dụng. Trong một số phương án, nhóm arylalkyl là C_{7-30} arylalkyl, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl của nhóm arylalkyl là C_{1-10} và gốc aryl là C_{6-20} , và trong một số phương án, nhóm arylalkyl là C_{7-20} arylalkyl, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl của nhóm arylalkyl là C_{1-8} và gốc aryl là C_{6-12} .

"Cacboxamidyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc có công thức $-C(O)NR^{60}R^{61}$ trong đó mỗi R^{60} và R^{61} độc lập là hydro, alkyl, alkyl được thế, alkoxy, alkoxy được thế, xycloalkyl, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, aryl, aryl được thế, heteroaryl, heteroaryl được thế, arylalkyl, arylalkyl được thế, heteroarylalkyl, hoặc heteroarylalkyl được thế, hoặc R^{60} và R^{61} cùng với nguyên tử nitơ mà chúng liên kết tạo thành vòng heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, heteroaryl, hoặc heteroaryl được thế.

"Các hợp chất" dùng để chỉ các hợp chất bao gồm các công thức cấu tạo I và IA ở đây và bao gồm các hợp chất cụ thể bất kỳ trong các công thức này mà cấu trúc của nó được bộc lộ ở đây. Các hợp chất này có thể được xác định bằng cấu trúc hóa học và/hoặc tên hóa học của chúng. Nếu cấu trúc hóa học và tên hóa học mâu thuẫn nhau, thì cấu trúc hóa học sẽ xác định hợp chất. Các hợp chất được mô tả ở đây có thể chứa một hoặc nhiều tâm đối xứng và/hoặc các liên kết đôi và do đó có thể tồn tại dưới dạng chất đồng phân lập thể như các chất đồng phân liên kết đôi (tức là, các chất đồng phân hình học), các chất đồng phân đối hình, hoặc chất đồng phân lập thể không đối hình. Do đó, các cấu trúc hóa học bất kỳ trong phạm vi của bản mô tả này được mô tả, toàn bộ hoặc một phần, với cấu hình tương đối bao gồm tất cả các chất đồng phân đối hình và chất đồng phân lập thể có khả năng của các hợp chất được minh họa bao gồm các dạng tinh khiết đồng phân lập thể (ví dụ, tinh khiết đồng phân hình học, tinh khiết đồng phân đối hình, hoặc tinh khiết đồng phân lập thể không đối hình) và hỗn hợp chất đồng phân đối hình và lập thể. Hỗn hợp các chất đồng phân đối hình và lập thể có thể

được xử lý thành các thành phần chất đồng phân đối hình hoặc chất đồng phân lập thể của chúng sử dụng các kỹ thuật tách hoặc kỹ thuật tổng hợp đối ảnh đã được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này biết rõ.

Với mục đích của sáng chế này, "các hợp chất đối ảnh" là các hợp chất có ít nhất một tâm đối xứng (tức là ít nhất một nguyên tử bất đối xứng, cụ thể là ít nhất một nguyên tử C bất đối xứng), có cấu trúc trục đối xứng, mặt phẳng đối xứng hoặc cấu trúc xoắn.

"Các hợp chất không đối ảnh" là các hợp chất không đối ảnh,

Các hợp chất có các công thức I và IA bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các chất đồng phân quang học của các hợp chất có các công thức I và IA, các raxemat của chúng, và hỗn hợp khác của chúng. Trong các phương án này, các chất đồng phân đối hình hoặc chất đồng phân lập thể không đối hình đơn, tức là, các dạng hoạt quang, có thể thu được bằng cách tổng hợp bất đối xứng hoặc bằng cách phân giải các raxemat. Phân giải các raxemat có thể được thực hiện, ví dụ, bằng các phương pháp thông thường như kết tinh với sự có mặt của chất phân giải, hoặc sắc ký, sử dụng, ví dụ cột sắc ký lỏng hiệu năng cao (HPLC) đối ảnh. Tuy nhiên, trừ khi có định nghĩa khác, cần thừa nhận rằng các hợp chất có công thức I và IA bao gồm tất cả các biến thể bất đối xứng của các hợp chất được mô tả ở đây, bao gồm các chất đồng phân, các raxemat, các chất đồng phân đối hình, chất đồng phân lập thể không đối hình, và hỗn hợp khác của chúng, ngoài ra, các hợp chất có công thức I và IA bao gồm dạng Z- và E- (ví dụ, dạng cis- và trans-) của các hợp chất với các liên kết đôi. Trong các phương án trong đó các hợp chất có công thức I và IA tồn tại ở các dạng hỗn biến khác nhau, các hợp chất được đề xuất trong sáng chế này bao gồm tất cả các dạng hỗn biến của hợp chất này.

Các hợp chất có công thức I và IA cũng có thể tồn tại ở một số dạng hỗn biến bao gồm dạng enol, dạng keto, và hỗn hợp của chúng. Do đó, các cấu trúc hóa học được mô tả ở đây bao gồm tất cả các dạng hỗn biến có thể của các hợp chất được minh họa. Các hợp chất có thể tồn tại ở các dạng không solvat hóa cũng như các dạng solvat hóa, bao gồm các dạng hydrat hóa và các N-oxit. Nói chung, các hợp chất có thể được hydrat hóa, solvat hóa, hoặc các N-oxit. Một số hợp chất có thể tồn tại ở dạng tinh thể hoặc vô định hình đơn hoặc đa. Nói chung, tất cả các dạng vật chất tương đương để sử dụng dự kiến ở đây và được dự định đều thuộc phạm vi được đề xuất trong sáng chế

này. Hơn nữa, nếu các cấu trúc một phần của các hợp chất được minh họa, dấu hoa thị (*) dùng để chỉ điểm gắn của cấu trúc một phần vào phần còn lại của phân tử.

"Xycloalkyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc vòng alkyl no hoặc không no. Nếu mức bão hòa cụ thể được dự định, thì thuật ngữ "xycloalkanyl hoặc "xycloalkenyl" được sử dụng. Các ví dụ về các nhóm xycloalkyl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các nhóm dẫn xuất từ xyclopropan, xyclobutan, xyclopentan, xyclohexan. Trong một số phương án, nhóm xycloalkyl là C_{3-15} xycloalkyl, và trong một số phương án, C_{3-12} xycloalkyl hoặc C_{5-12} xycloalkyl.

"Xycloalkylalkyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc alkyl alicyclic trong đó một trong số các nguyên tử hydro được liên kết với nguyên tử cacbon, thông thường nguyên tử cacbon cuối hoặc sp^3 , được thay bằng nhóm xycloalkyl. Trong đó các gốc alkyl cụ thể được dự định, thuật ngữ xycloalkylalkanyl, xycloalkylalkenyl, hoặc xycloalkylalkynyl được sử dụng. Trong một số phương án, nhóm xycloalkylalkyl là C_{7-30} xycloalkylalkyl, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl của nhóm xycloalkylalkyl là C_{1-10} và gốc xycloalkyl là C_{6-20} , và trong một số phương án, nhóm xycloalkylalkyl là C_{7-20} xycloalkylalkyl, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl của nhóm xycloalkylalkyl là C_{1-8} và gốc xycloalkyl là C_{4-20} hoặc C_{6-12} .

"Halogen" dùng để chỉ nhóm flo, clo, bromo, hoặc iodo.

"Heteroalkyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ nhóm alkyl trong đó một hoặc nhiều nguyên tử cacbon (và các nguyên tử hydro được kết hợp bất kỳ) độc lập được thế bằng các nhóm nguyên tử khác loại giống nhau hoặc khác nhau. Trong một số phương án, các nhóm heteroalkyl có từ 1 đến 8 nguyên tử cacbon. Các ví dụ về các nhóm nguyên tử khác loại bao gồm, nhưng không giới hạn ở, -O-, -S-, -S-S-, -NR³⁸-, =N-N=, -N=N-, -N=N-NR³⁹R⁴⁰-, -PR⁴¹-, -P(O)₂-, -POR⁴²-, -O-P(O)₂-, -SO-, -SO₂-, -SnR⁴³R⁴⁴-, trong đó R³⁸, R³⁹, R⁴⁰, R⁴¹, R⁴², R⁴³, và R⁴⁴ độc lập là hydro, alkyl, alkyl được thế, aryl, aryl được thế, arylalkyl, arylalkyl được thế, xycloalkyl, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, heteroalkyl, heteroalkyl được thế, heteroaryl, heteroaryl được thế, heteroarylalkyl, hoặc heteroarylalkyl được thế. Nếu mức bão hòa cụ thể được dự định, thì thuật ngữ "heteroalkanyl," "heteroalkenyl," hoặc "heteroalkynyl" được sử dụng. Trong một số

phương án, R^{38} , R^{39} , R^{40} , R^{41} , R^{42} , R^{43} , và R^{44} độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro và C_{1-3} alkyl.

"Heteroaryl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc thiom dị vòng hóa trị một được dẫn xuất bằng cách loại bỏ một nguyên tử hydro khỏi nguyên tử đơn của hệ vòng thiom dị vòng ban đầu. Heteroaryl bao gồm hệ vòng đa có ít nhất một vòng thiom được ngưng tụ với ít nhất một vòng khác, có thể thiom hoặc không thiom trong đó ít nhất một nguyên tử trong vòng là nguyên tử khác loại. Heteroaryl bao gồm các vòng đơn thiom có từ 5 đến 12 cạnh, như có từ 5 đến 7 cạnh, chứa một hoặc nhiều, ví dụ, từ 1 đến 4, hoặc trong một số phương án, từ 1 đến 3, nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm bao gồm H, O, và S, với các nguyên tử trong vòng còn lại là cacbon; và các vòng heteroxycloalkyl đôi chứa một hoặc nhiều, ví dụ, từ 1 đến 4, hoặc trong một số phương án, từ 1 đến 3, nguyên tử khác loại được chọn từ nhóm bao gồm N, O, và S, với các nguyên tử trong vòng còn lại là cacbon và trong đó ít nhất một nguyên tử khác loại có mặt trong vòng thiom. Ví dụ, các heteroaryl bao gồm heteroxycloalkyl có từ 5 đến 7 cạnh, vòng thiom được ngưng tụ với vòng xycloalkyl có từ 5 đến 7 cạnh. Đối với các hệ vòng heteroaryl hai vòng ngưng tụ trong đó chỉ một trong số các vòng chứa một hoặc nhiều nguyên tử khác loại, điểm gắn có thể tại vòng thiom dị vòng hoặc vòng xycloalkyl, trong một số phương án, nếu tổng số lượng nguyên tử N, S, và O trong nhóm heteroaryl vượt quá một, các nguyên tử khác loại không liên kề với nhau. Trong một số phương án, tổng số lượng nguyên tử N, S, và O trong nhóm heteroaryl không quá hai. Trong một số phương án, tổng số lượng nguyên tử N, S, và O trong dị vòng thiom không nhiều hơn một. Heteroaryl không bao gồm hoặc trùng với aryl như được định nghĩa ở đây.

Các ví dụ về các nhóm heteroaryl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các nhóm dẫn xuất từ acridin, arsindol, cacbazol, β -cacbolin, croman, cromen, xinolin, furan, imidazol, indazol, indol, indolin, indolizin, isobenzofuran, isocromen, isoindot, isoindolin, isoquinolin, isothiazol, isoxazol, naphtyridin, oxadiazol, oxazol, perimidin, phenanthridin, phenanthrolin, phenazin, phthalazin, pteridin, purin, pyran, pyrazin, pyrazol, pyridazin, pyridin, pyrimidin, pyrol, pyrolizin, quinazolin, quinolin, quinolizin, quinoxalin, tetrazol, thiadiazol, thiazol, thiophen, triazol, xanthen, trong một số phương án, nhóm heteroaryl là heteroaryl có từ 5 đến 20 cạnh, và trong một số phương án là heteroaryl có từ 5 đến 12 cạnh hoặc heteroaryl có từ 5 đến 10 cạnh.

Trong một số phương án các nhóm heteroaryl là các nhóm dẫn xuất từ thiophen, pyrol, benzothiophen, benzofuran, indol, pyridin, quinolin, imidazol, oxazol, và pyrazin.

"Heteroarylalkyl riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc alkyl axyclic trong đó một trong số các nguyên tử hydro được liên kết với nguyên tử cacbon, thông thường nguyên tử cacbon cuối hoặc sp^3 , được thay bằng nhóm heteroaryl. Trong đó các gốc alkyl cụ thể được dự định, thuật ngữ heteroarylalkanyl, heteroarylalkenyl, hoặc heteroarylalkynyl được sử dụng. Trong một số phương án, nhóm heteroarylalkyl là heteroarylalkyl có từ 6 đến 30 cạnh, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl của heteroarylalkyl có từ 1 đến 10 cạnh và gốc heteroaryl là heteroaryl có từ 5 đến 20 cạnh, và trong một số phương án, là heteroarylalkyl có từ 6 đến 20 cạnh, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl của heteroarylalkyl có từ 1 đến 8 cạnh và gốc heteroaryl là heteroaryl có từ 5 đến 12 cạnh.

"Heteroxycloalkyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc vòng alkyl no một phần hoặc không no trong đó một hoặc nhiều nguyên tử cacbon (và các nguyên tử hydro được kết hợp bất kỳ) độc lập được thế bằng nguyên tử khác loại giống nhau hoặc khác nhau. Các ví dụ về các nguyên tử khác loại để thay thế (các) nguyên tử cacbon bao gồm, nhưng không giới hạn ở, N, P, Q, S, Si, và các nguyên tử tương tự. Nếu mức bão hòa cụ thể được dự định, thì thuật ngữ "heteroxycloalkanyl" hoặc "heterocydoalkenyl" được sử dụng. Các ví dụ về các nhóm heteroxycloalkyl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các nhóm dẫn xuất từ các epoxit, azirin, thiiran, imidazolidin, morpholin, piperazin, piperidin, pyrazolidin, pyrrolidin, quinuclidin.

"Heteroxycloalkylalkyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc alkyl axyclic trong đó một trong số các nguyên tử hydro được liên kết với nguyên tử cacbon, thông thường nguyên tử cacbon cuối hoặc sp^3 , được thay bằng nhóm heteroxycloalkyl. Trong đó các gốc alkyl cụ thể được dự định, thuật ngữ heteroxycloalkylalkanyl, heteroxycloalkylalkenyl, hoặc heteroxycloalkylalkynyl được sử dụng. Trong một số phương án, nhóm heteroxycloalkylalkyl là heteroxycloalkylalkyl có từ 6 đến 30 cạnh, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl của heteroxycloalkylalkyl có từ 1 đến 10 cạnh và gốc heteroxycloalkyl là heteroxycloalkyl có từ 5 đến 20 cạnh, và trong một số phương án, heteroxycloalkylalkyl có từ 6 đến 20 cạnh, ví dụ, gốc alkanyl, alkenyl, hoặc alkynyl

của heteroxycloalkyl có từ 1 đến 8 cạnh và gốc heteroxycloalkyl là heteroxycloalkyl có từ 5 đến 12 cạnh.

"Nhóm rời chuyển" dùng để chỉ nguyên tử hoặc nhóm có khả năng được thay thế bởi chất ái nhân và bao gồm halogen, như clo, bromo, flo, và iodo, alkoxycarbonyl (ví dụ, axetoxy), aryloxcarbonyl, mesyloxy, tosyloxy, triflometansulfonyloxy, aryloxy (ví dụ, 2,4-dinitrophenoxy), metoxy, 1,1-dimethylhydroxylamino.

"Hệ vòng thơm ban đầu" dùng để chỉ hệ vòng nhân hoặc đa nhân không no có hệ điện tử π (pi) được kết hợp. Bao gồm trong định nghĩa về "hệ vòng thơm ban đầu" là các hệ vòng ngưng tụ trong đó một hoặc nhiều vòng này là thơm và một hoặc nhiều vòng này là no hoặc không no, như, ví dụ, fluoren, indan, inden, phenalen, và các vòng tương tự. Các ví dụ về hệ vòng thơm ban đầu bao gồm, nhưng không giới hạn ở, axeanthrylen, axenaphtylen, axephenantrylen, anthraxen, azulen, benzen, chrysen, coron, fluoranthen, fluoren, hexaxen, hexaphen, hexalen, as-indaxen, s-indaxen, indan, inden, naphtalen, octaxen, octaphen, octalen, ovalen, penta-2,4-dien, pentaxen, pentalen, pentaphen, perylen, phenalen, phenanthren, picen, pleladen, pyren, pyranthren, rubicen, triphenylen, trinaphtalen.

"Hệ vòng thơm dị vòng ban đầu" dùng để chỉ hệ vòng thơm ban đầu trong đó một hoặc nhiều nguyên tử cacbon (và các nguyên tử hydro được kết hợp bất kỳ) độc lập được thế bằng nguyên tử khác loại giống nhau hoặc khác nhau. Các ví dụ về các nguyên tử khác loại để thay thế các nguyên tử cacbon bao gồm, nhưng không giới hạn ở, N, P, Q, S, Si, và các nguyên tử tương tự. Các nhóm cụ thể được bao gồm trong định nghĩa về "hệ vòng thơm dị vòng ban đầu" là các hệ vòng ngưng tụ trong đó một hoặc nhiều vòng này là thơm và một hoặc nhiều vòng này là no hoặc không no, như, ví dụ, arsindol, benzodioxan, benzofuran, croman, cromen, indol, indolin, xanthen, và các vòng tương tự. Các ví dụ về hệ vòng thơm dị vòng ban đầu bao gồm, nhưng không giới hạn ở, arsindol, cacbazol, β -cacbolin, croman, cromen, cinolin, furan, imidazol, indazol, indol, indolin, indolizin, isobenzofuran, isocromen, isoindol, isoindolin, isoquinolin, isothiazol, isoxazol, naphtyridin, oxadiazol, oxazol, perimidin, phenanthridin, phenanthrolin, phenazin, phthalazin, pteridin, purin, pyran, pyrazin, pyrazol, pyridazin, pyridin, pyrimidin, pyrol, pyrolizin, quinazolin, quinolin, quinolizin, quinoxalin, tetrazol, thiadiazol, thiazol, thiophen, triazol, xanthen.

"Perhaloalkyl" là tập hợp con của alkyl được thế trong đó mỗi nguyên tử hydro được thay bằng nguyên tử halogen giống nhau hoặc khác nhau. Các ví dụ về perhaloalkyl bao gồm, nhưng không giới hạn ở, $-\text{CF}_3$, $-\text{CF}_2\text{CF}_3$, và $-\text{C}(\text{CF}_3)_3$.

"Perhaloalkoxy" là tập hợp con của alkoxy được thế trong đó mỗi nguyên tử hydro của R^{31} được thay bằng nguyên tử halogen giống nhau hoặc khác nhau. Các ví dụ về perhaloalkoxy bao gồm, nhưng không giới hạn ở, $-\text{OCF}_3$, $-\text{OCF}_2\text{CF}_3$, và $-\text{OC}(\text{CF}_3)_3$.

"Nhóm bảo vệ" dùng để chỉ nhóm các nguyên tử, mà nếu được gắn với nhóm hoạt tính trong phân tử sẽ che giấu, làm giảm, hoặc ngăn chặn hoạt tính này. Các ví dụ về các nhóm bảo vệ có thể được tìm thấy trong tài liệu W'ufs và Greene, "Protective groups in organic Synthesis," John Wiley & Sons, 4th ed, 2006; Harrison và các đồng tác giả, "Compendium of organic Synthetic Methods," Vols. 1-11, John Wiley & Sons 1971-2003; Larock "Comprehensive organic Transformations," John Wiley & Sons, xuất bản lần thứ 2, 2000; và Paquette, "Encyclopedia of Reagents for organic Synthesis," John Wiley & Sons, xuất bản lần thứ 11, 2003. Các ví dụ về các nhóm bảo vệ amin bao gồm, nhưng không giới hạn ở, formyl, axetyl, trifloaxetyl, benzyl, benzyloxycarbonyl (CBZ), *tert*-butoxycarbonyl (Boc), trimetylsilyl (TMS), 2-trimetylsilyl-etansulfonyl (SES), trityl và các nhóm trityl được thế, alyloxycarbonyl, 9-florenylmethyloxycarbonyl (FMOC), nitro-veratryloxycarbonyl (NVOC), và các nhóm tương tự. Các ví dụ về các nhóm bảo vệ hydroxy bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các nhóm trong đó nhóm hydroxy được axyl hóa hoặc alkyl hóa như benzyl, và trityl ete cũng như alkyl ete, tetrahydropyranyl ete, trialkylsilyl ete, và alyl ete.

"Silyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc có công thức $-\text{SiR}^{30}\text{R}^{31}\text{R}^{31}$ trong đó mỗi R^{30} , R^{31} , và R^{31} độc lập được chọn từ nhóm bao gồm alkyl, alkoxy, và phenyl, mỗi nhóm có thể được thế, như được định nghĩa ở đây.

"Siloxy" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc có công thức $-\text{OSiR}^{30}\text{R}^{31}\text{R}^{31}$ trong đó mỗi nhóm R^{30} , R^{31} , và R^{31} độc lập được chọn từ nhóm bao gồm alkyl, alkoxy, và phenyl, mỗi nhóm có thể được thế, như được định nghĩa ở đây.

"Được thế" dùng để chỉ nhóm trong đó một hoặc nhiều nguyên tử hydro độc lập được thế bằng (các) nhóm thế giống nhau hoặc khác nhau. Các ví dụ về các nhóm thế bao gồm, nhưng không giới hạn ở, $-\text{R}^{64}$, $-\text{R}^{60}$, $-\text{O}^-$, $(-\text{OH})$, $=\text{O}$, $-\text{OR}^{60}$, $-\text{SR}^{60}$, $-\text{S}^-$, $=\text{S}$, -

$\text{NR}^{60}\text{R}^{61}$, $-\text{NR}^{60}$, $-\text{CX}_3$, $-\text{CN}$, $-\text{CF}_3$, $-\text{OCN}$, $-\text{SCN}$, $-\text{NO}$, $-\text{NO}_2$, $=\text{N}_2$, $-\text{N}_3$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{O}^-$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{OH}$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{60}$, $-\text{OS}(\text{O})_2\text{O}^-$, $-\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^{60}$, $-\text{P}(\text{O})(\text{O}^-)_2$, $-\text{P}(\text{O})(\text{OR}^{60})(\text{O}^-)$, $-\text{OP}(\text{O})(\text{OR}^{60})(\text{OR}^{61})$, $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{60}$, $-\text{C}(\text{S})\text{R}^{60}$, $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^{60}$, $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{60}\text{R}^{61}$, $-\text{C}(\text{O})\text{O}^-$, $-\text{C}(\text{S})\text{OR}^{60}$, $-\text{NR}^{62}\text{C}(\text{O})\text{NR}^{60}\text{R}^{61}$, $-\text{NR}^{62}\text{C}(\text{S})\text{NR}^{60}\text{R}^{61}$, $-\text{NR}^{62}\text{C}(\text{NR}^{63})\text{NR}^{60}\text{R}^{61}$, $-\text{C}(\text{NR}^{62})\text{NR}^{60}\text{R}^{61}$, $-\text{S}(\text{O})_2$, $\text{NR}^{60}\text{R}^{61}$, $-\text{NR}^{63}\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{60}$, $-\text{NR}^{63}\text{C}(\text{O})\text{R}^{60}$, và $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{60}$ trong đó mỗi $-\text{R}^{64}$ độc lập là halogen; mỗi R^{60} và R^{61} độc lập là hydro, alkyl, alkyl được thế, alkoxy, alkoxy được thế, xycloalkyl, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, aryl, aryl được thế, heteroaryl, heteroaryl được thế, arylalkyl, arylalkyl được thế, heteroarylalkyl, hoặc heteroarylalkyl được thế, hoặc R^{60} và R^{61} cùng với nguyên tử nitơ mà chúng liên kết tạo thành vòng heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, heteroaryl, hoặc heteroaryl được thế, và R^{62} và R^{63} độc lập là hydro, alkyl, alkyl được thế, aryl, aryl được thế, arylalkyl, arylalkyl được thế, xycloalkyl, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, heteroaryl, heteroaryl được thế, heteroarylalkyl, hoặc heteroarylalkyl được thế, hoặc R^{62} và R^{63} cùng với nguyên tử mà chúng liên kết tạo thành một hoặc nhiều vòng heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, heteroaryl, hoặc heteroaryl được thế. Trong một số phương án, amin bậc ba hoặc nitơ thơm có thể được thế bằng một hoặc nhiều nguyên tử oxy để tạo thành oxit nitơ tương ứng.

"Sulfonat" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc lưu huỳnh có công thức $-\text{S}(\text{O})_2\text{O}^-$.

"Sulfonyl" riêng một mình hoặc là một phần của nhóm thế khác dùng để chỉ gốc lưu huỳnh có công thức $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{60}$ trong đó R^{60} có thể được chọn từ nhóm bao gồm hydro, alkyl, alkyl được thế, alkoxy, alkoxy được thế, xycloalkyl, xycloalkyl được thế, heteroxycloalkyl, heteroxycloalkyl được thế, aryl, aryl được thế, heteroaryl, heteroaryl được thế, arylalkyl, arylalkyl được thế, heteroarylalkyl, và heteroarylalkyl được thế.

Trong một số phương án, aryl được thế và heteroaryl được thế bao gồm một hoặc nhiều nhóm thế sau: F, Cl, Br, I, C_{1-3} alkyl, alkyl được thế, C_{1-3} alkoxy, $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{50}\text{R}^{51}$, $-\text{NR}^{50}\text{R}^{51}$, $-\text{CF}_3$, $-\text{OCF}_3$, $-\text{CN}$, $-\text{NR}^{50}\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{51}$, $-\text{NR}^{50}\text{C}(\text{O})\text{R}^{51}$, C_{5-10} aryl, C_{5-10} aryl được thế, C_{5-10} heteroaryl, C_{5-10} heteroaryl được thế, $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^{50}$, $-\text{NO}_2$, $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{50}$, $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{50}\text{R}^{51}$, $-\text{OCHF}_2$, C_{1-3} axyl, $-\text{SR}^{50}$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{OH}$, $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{50}$, $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{50}$, $-\text{C}(\text{S})\text{R}^{50}$, $-\text{C}(\text{O})\text{O}^-$, $-\text{C}(\text{S})\text{OR}^{50}$, $-\text{NR}^{50}\text{C}(\text{O})\text{NR}^{51}\text{R}^{52}$, $-\text{NR}^{50}\text{C}(\text{S})\text{NR}^{51}\text{R}^{52}$, và -

$C(NR^{50})NR^{51}R^{52}$, C_{3-8} xycloalkyl, và C_{3-8} xycloalkyl được thế, trong đó mỗi R^{50} , R^{51} và R^{52} độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro và C_1 - C_4 alkyl,

Trừ khi có định nghĩa khác, tất cả các số thể hiện lượng các thành phần, các điều kiện phản ứng, và các đặc tính hoặc các thông số khác được sử dụng trong bản mô tả này được hiểu là có thể thay đổi trong tất cả các trường hợp bởi thuật ngữ "khoảng". Do đó, trừ khi có định nghĩa khác, cần hiểu rằng các thông số về số nêu trên trong bản mô tả dưới đây và yêu cầu bảo hộ là xấp xỉ. Ít nhất, và không có dự định giới hạn đơn tương đương với phần yêu cầu bảo hộ, các thông số về số cần được đọc theo các số có ý nghĩa được ghi nhận và ứng dụng các kỹ thuật làm tròn thông thường.

Tất cả các khoảng số ở đây bao gồm tất cả các trị số và khoảng của tất cả trị số trong khoảng của trị số được đọc. Hơn nữa, trong khi các khoảng số và các thông số tạo ra phạm vi bộc lộ rộng là xấp xỉ như được mô tả ở trên, các trị số nêu trên trong phần các Ví dụ được ghi nhận ở mức chính xác nhất có thể, tuy nhiên cần hiểu rằng, các trị số này vốn chứa sai số nhất định do thiết bị đo và/hoặc kỹ thuật đo.

Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "tế bào tinh thể lỏng" dùng để chỉ cấu trúc chứa vật liệu tinh thể lỏng có khả năng sắp xếp trật tự. Các tế bào tinh thể lỏng hoạt tính là các tế bào trong đó vật liệu tinh thể lỏng có khả năng chuyển đổi giữa các trạng thái trật tự và rối loạn hoặc giữa hai trạng thái sắp xếp trật tự bằng cách áp dụng lực từ bên ngoài, như điện trường hoặc từ trường. Tế bào tinh thể lỏng thụ động là các tế bào trong đó vật liệu tinh thể lỏng duy trì trạng thái trật tự. Một ví dụ không nhằm giới hạn về chi tiết hoặc thiết bị chứa tế bào tinh thể lỏng hoạt tính bộ là màn hình tinh thể lỏng.

Cụm từ "phủ ít nhất một phần" có nghĩa là lượng lớp phủ từ một phần đến hoàn toàn bề mặt chất nền. Cụm từ "lớp phủ được xử lý ít nhất một phần" dùng để chỉ lớp phủ trong đó các thành phần có thể xử lý hoặc có khả năng liên kết ngang được xử lý, được tạo liên kết ngang và/hoặc được phản ứng ít nhất một phần. Trong các phương án không nhằm giới hạn khác, mức các thành phần được phản ứng, có thể thay đổi trong khoảng rộng, ví dụ, từ 5% đến 100% tổng các thành phần có thể xử lý, có khả năng liên kết ngang và/hoặc có khả năng phản ứng.

Cụm từ "lớp phủ hoặc màng chống mài mòn ít nhất một phần" dùng để chỉ lớp phủ hoặc màng chứng tỏ Bayer Abrasion Resistance Index ít nhất là từ 1,3 đến 10,0 trong phương pháp ASTM F-735 Standard Test Method for Abrasion Resistance of Transparent Plastics và Coatings using the Oscillating Sand Method. Cụm từ "lớp phủ

chống phản chiếu ít nhất một phần" là lớp phủ cải thiện ít nhất một phần bản chất chống phản chiếu của bề mặt được phủ bằng cách gia tăng phần trăm truyền qua so với bề mặt không được phủ. Sự cải thiện phần trăm truyền qua có thể nằm trong khoảng từ 1 đến 9 phần trăm trên bề mặt không được xử lý. Nói cách khác, phần trăm truyền qua của bề mặt được xử lý có thể nằm trong khoảng từ phần trăm lớn hơn bề mặt không được xử lý tới 99,9.

Các phương án không giới hạn khác nhau của sáng chế này sẽ được mô tả. Một phương án không nhằm giới hạn đề xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt chứa nhóm kéo dài L cũng được mô tả sau đây. Phương án không nhằm giới hạn khác đề xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng thích hợp để có ít nhất trạng thái thứ nhất và trạng thái thứ hai, trong đó hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 1,5 ở ít nhất một trạng thái như được xác định theo phương pháp CELL METHOD, được mô tả chi tiết dưới đây. Hơn nữa, theo các phương án không giới hạn khác nhau, hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 1,5 ở trạng thái hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD. Như được sử dụng ở đây với các hợp chất đổi màu theo ánh sáng, thuật ngữ "trạng thái hoạt hóa" dùng để chỉ hợp chất đổi màu theo ánh sáng khi được bộc lộ ra bức xạ quang hóa thích hợp để gây ra ít nhất một phần hợp chất đổi màu theo ánh sáng chuyển đổi các trạng thái.

Nói chung, phương pháp CELL METHOD đo tỷ lệ hấp thụ trung bình của hợp chất đổi màu theo ánh sáng liên quan đến việc thu được phổ hấp thụ cho hợp chất đổi màu theo ánh sáng, ở trạng thái hoạt hóa hoặc không hoạt hóa, trong mỗi hướng trong số hai hướng phân cực trực giao trong khi hợp chất đổi màu theo ánh sáng được liên kết ít nhất một phần trong môi trường tinh thể lỏng được liên kết trong tổ hợp tế bào. Cụ thể hơn, tổ hợp tế bào này bao gồm hai nền thủy tinh đối diện cách nhau 20 micron $\pm$ 1 micron. Các nền được gắn dọc hai cạnh đối diện để tạo thành tế bào. Bề mặt bên trong của mỗi nền thủy tinh được phủ bằng lớp phủ polyimide, bề mặt của nó được sắp xếp trật tự ít nhất một phần bằng cách đánh bóng. Liên kết của hợp chất đổi màu theo ánh sáng đạt được bằng cách đưa hợp chất đổi màu theo ánh sáng và môi trường tinh thể lỏng vào tổ hợp tế bào này và cho phép môi trường tinh thể lỏng liên kết với bề mặt polyimide được đánh bóng. Vì hợp chất đổi màu theo ánh sáng có trong môi trường tinh thể lỏng, liên kết của môi trường tinh thể lỏng làm cho hợp chất đổi màu theo ánh

sáng được liên kết. Được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này đánh giá cao là sự lựa chọn môi trường tinh thể lỏng và nhiệt độ được sử dụng trong quá trình thử nghiệm có thể ảnh hưởng đến tỷ lệ hấp thụ được đo. Do đó, như được nêu chi tiết hơn trong các Ví dụ, với mục đích phương pháp CELL METHOD, phép đo tỷ lệ hấp thụ được thực hiện ở nhiệt độ trong phòng $22,8^{\circ}\text{C} \pm 0,3^{\circ}\text{C}$ ($73^{\circ}\text{F} \pm 0,5^{\circ}\text{F}$ hoặc cao hơn) và môi trường tinh thể lỏng là Licristal[®] E7 (được thông báo là hỗn hợp của các hợp chất tinh thể lỏng xyanobiphenyl và xyanoterphenyl).

Khi môi trường tinh thể lỏng và hợp chất đổi màu theo ánh sáng được liên kết, tổ hợp tế bào được đặt trên ống đo lường quang học (được mô tả chi tiết hơn trong các Ví dụ). Để thu được tỷ lệ hấp thụ trung bình ở trạng thái hoạt hóa, sự hoạt hóa hợp chất đổi màu theo ánh sáng đạt được bằng cách bộc lộ hợp chất đổi màu theo ánh sáng ra bức xạ UV trong thời gian thích hợp để đạt được trạng thái bão hòa hoặc gần như bão hòa (tức là, trạng thái trong đó các tính chất hấp thụ của hợp chất đổi màu theo ánh sáng không thay đổi căn bản trong khoảng thời gian quá trình đo được thực hiện). Các phép đo độ hấp thụ được thực hiện trong một khoảng thời gian (thông thường từ 10 đến 300 giây) ngắt quãng mỗi 3 giây để ánh sáng được phân cực tuyến tính vuông góc với ống đo lường quang học (được gọi là mặt phẳng hoặc hướng phân cực 0°) và ánh sáng phân cực tuyến tính trong mặt phẳng song song với ống đo lường quang học (được gọi là mặt phẳng hoặc hướng phân cực 90°) theo thứ tự sau: 0° , 90° , 90° , 0° và tương tự. Độ hấp thụ của ánh sáng được phân cực tuyến tính bởi các tế bào này được đo tại mỗi thời điểm cho tất cả các bước sóng được thử nghiệm và độ hấp thụ không hoạt hóa (tức là, độ hấp thụ của tế bào với vật liệu tinh thể lỏng và hợp chất đổi màu theo ánh sáng không hoạt hóa) trong cùng khoảng bước sóng được trừ đi để thu được phổ hấp thụ cho hợp chất đổi màu theo ánh sáng trong mỗi mặt phẳng phân cực 0° và 90° để thu được phổ hấp thụ biệt hóa trung bình trong mỗi mặt phẳng phân cực đối với hợp chất đổi màu theo ánh sáng ở trạng thái bão hòa hoặc gần bão hòa.

Ví dụ, tham khảo Fig. 1, thể hiện phổ hấp thụ biệt hóa trung bình (thường được xác định là 10) trong một mặt phẳng phân cực thu được cho hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo một phương án không nhằm giới hạn được bộc lộ ở đây. Phổ hấp thụ trung bình (thường được xác định là 11) là phổ hấp thụ biệt hóa trung bình thu được cho cùng hợp chất đổi màu theo ánh sáng trong mặt phẳng phân cực trực giao.

Dựa trên phổ hấp thụ biệt hóa trung bình thu được đối với hợp chất đổi màu theo ánh sáng, tỷ lệ hấp thụ trung bình của hợp chất đổi màu theo ánh sáng thu được như sau. Tỷ lệ hấp thụ của hợp chất đổi màu theo ánh sáng tại mỗi bước sóng trong khoảng bước sóng xác định trước tương ứng với $\lambda_{\text{max-vis}} \pm 5$ nanomet (thường được xác định là 14 trong Fig. 1), trong đó $\lambda_{\text{max-vis}}$ là bước sóng mà tại đó hợp chất đổi màu theo ánh sáng có độ hấp thụ trung bình cao nhất trong mặt phẳng bất kỳ, được tính toán theo phương trình sau:

$$AR_{\lambda_i} = Ab^1_{\lambda_i} / Ab^2_{\lambda_i} \quad \text{phương trình 1}$$

trong đó, AR_{λ_i} là tỷ lệ hấp thụ ở bước sóng λ_i , $Ab^1_{\lambda_i}$ là độ hấp thụ trung bình ở bước sóng λ_i theo hướng phân cực (tức là, 0° hoặc 90°) có độ hấp thụ cao hơn, và $Ab^2_{\lambda_i}$ là độ hấp thụ trung bình ở bước sóng λ_i theo hướng phân cực còn lại. Như đã được mô tả từ trước, "tỷ lệ hấp thụ" dùng để chỉ tỷ lệ của độ hấp thụ của bức xạ phân cực tuyến tính trong mặt phẳng thứ nhất với độ hấp thụ của cùng bước sóng bức xạ phân cực tuyến tính trong mặt phẳng trực giao với mặt phẳng thứ nhất, trong đó mặt phẳng thứ nhất là mặt phẳng có độ hấp thụ cao hơn.

Sau đó tỷ lệ hấp thụ trung bình ("AR") cho hợp chất đổi màu theo ánh sáng được tính toán bằng cách chia trung bình các tỷ lệ hấp thụ riêng thu được với các bước sóng trong khoảng bước sóng xác định trước (tức là, $\lambda_{\text{max-vis}} \pm 5$ nanomet) theo phương trình sau;

$$AR = (\lambda AR_{\lambda_i}) / n_i \quad \text{phương trình 2}$$

trong đó, AR là tỷ lệ hấp thụ trung bình của hợp chất đổi màu theo ánh sáng, AR_{λ_i} là các tỷ lệ hấp thụ riêng (như được xác định ở trên trong phương trình 1) với mỗi bước sóng trong khoảng bước sóng xác định trước (tức là, $\lambda_{\text{max-vis}} \pm 5$ nanomet), và n_i là số lượng tỷ lệ hấp thụ được tính trung bình.

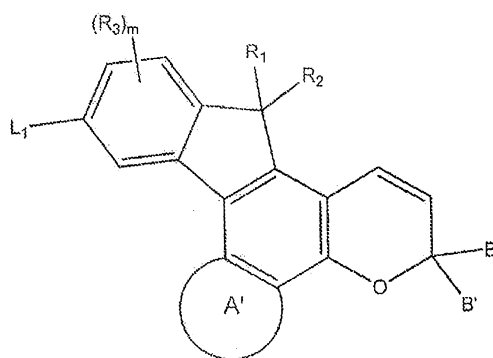
Như đã được mô tả từ trước, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt thông thường có thể chuyển đổi từ trạng thái thứ nhất sang trạng thái thứ hai trong tương ứng với bức xạ quang hóa, và quay trở lại trạng thái thứ nhất trong tương ứng với năng lượng nhiệt. Cụ thể hơn, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt thông thường có khả năng chuyển từ một dạng chất đồng phân (ví dụ và không giới hạn ở, dạng đóng) sang dạng chất đồng phân khác (ví dụ và không giới hạn ở, dạng mở) trong tương ứng với bức xạ quang hóa, và trở lại dạng đóng khi bộc lộ ra năng lượng nhiệt. Tuy nhiên, như đã được mô tả từ trước, nói chung các hợp chất đổi

màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt thông thường không chứng tỏ một cách mạnh mẽ tính lưỡng sắc.

Như được mô tả ở trên, các phương án không nhằm giới hạn được bộc lộ ở đây đề xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 1,5 ở ít nhất một trạng thái như được xác định theo phương pháp CELL METHOD và/hoặc hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có thể được sử dụng làm chất trung gian trong quá trình sản xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng có tỷ lệ hấp thụ lớn hơn 1,5. Vì vậy, hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt theo phương án không nhằm giới hạn này có thể thể hiện các đặc tính đổi màu theo ánh sáng hữu ích và/hoặc các đặc tính đổi màu theo ánh sáng hữu ích và lưỡng sắc. Tức là, hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có thể là hợp chất có thể đổi màu theo ánh sáng và/hoặc đổi màu theo ánh sáng-lưỡng sắc thuận nghịch nhiệt. Như được sử dụng ở đây với các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được mô tả ở đây, thuật ngữ "đổi màu theo ánh sáng-lưỡng sắc" có nghĩa là thể hiện cả hai đặc tính đổi màu theo ánh sáng và lưỡng sắc dưới các điều kiện nhất định, các đặc tính này ít nhất có thể được phát hiện bởi các thiết bị.

Theo các phương án không nhằm giới hạn khác, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có thể là các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi nhiệt có tỷ lệ hấp thụ trung bình nằm trong khoảng từ 4 đến 20, từ 3 đến 30, hoặc từ 2,0 đến 50 ở ít nhất một trạng thái như được xác định theo phương pháp CELL METHOD. Được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này đánh giá cao là tỷ lệ hấp thụ trung bình của hợp chất đổi màu theo ánh sáng càng lớn thì hợp chất đổi màu theo ánh sáng phân cực tuyến tính càng lớn. Do đó, theo các phương án không giới hạn khác nhau, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có thể có tỷ lệ hấp thụ trung bình bất kỳ cần thiết để đạt được mức phân cực tuyến tính mong muốn.

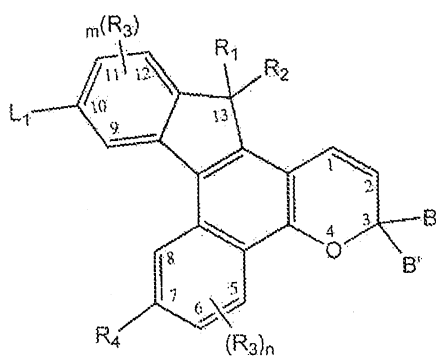
Trong một số phương án, các hợp chất được mô tả ở đây có thể là các hợp chất lưỡng sắc và/hoặc đổi màu theo ánh sáng, và có công thức I dưới đây, trong đó các định nghĩa về các nhóm thế có cùng nghĩa như được mô tả ở đây trừ khi có định nghĩa khác:



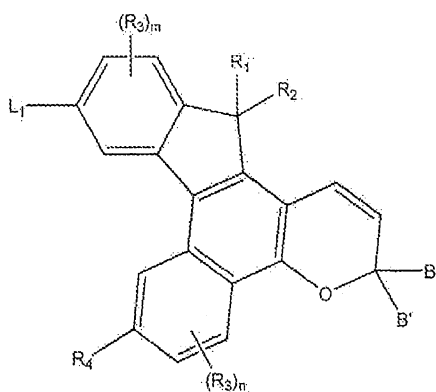
Công thức I

trong đó A' biểu diễn aryl tùy ý được thế hoặc heteroaryl tùy ý được thế. Tham khảo Công thức I, A' có thể bao gồm các nhóm "aryl" hoặc "heteroaryl" bất kỳ đã được định nghĩa ở trên, bao gồm các nhóm monoxyclic và multicyclic. Hơn nữa, A' có thể là không được thế, được thế một lần, hoặc được thế nhiều lần, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ các nhóm như đã được định nghĩa ở trên cho thuật ngữ "được thế." Cũng như vậy các phần tử thế tùy ý có thể độc lập được chọn từ các nhóm được định nghĩa dưới đây cho R₃ và R₄ trong Công thức IA. Ngoài ra, A' có thể được thế bằng từ 0 đến 10 nhóm, ví dụ, A' có thể được thế bằng từ 0 đến 8 nhóm, hoặc A' có thể được thế bằng từ 0 đến 6 nhóm, hoặc A' có thể được thế bằng từ 0 đến 4 nhóm hoặc A' có thể được thế bằng từ 0 đến 3 nhóm.

Các hợp chất được mô tả ở đây có thể có công thức dưới đây, trong đó các số là số lượng nguyên tử trong vòng naphthopyran và trong các định nghĩa về các nhóm thế có cùng nghĩa như được mô tả ở đây trừ khi có định nghĩa khác:



Cụ thể hơn, các hợp chất được mô tả ở đây có công thức IA dưới đây:



Công thức IA

trong đó;

mỗi R_1 và R_2 độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, hydroxy và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm heteroalkyl tùy ý được thế, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, halogen, amino tùy ý được thế, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkoxy tùy ý được thế, và aminocacbonyl, hoặc R_1 và R_2 có thể cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm oxo, xycloalkyl tùy ý được thế, và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

R_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm formyl, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, arylcacbonyl, aryloxycacbonyl, aminocacbonyloxy, alkoxycacbonylamino, aryloxycacbonylamino, axit boronic, các este của axit boronic, xycloalkoxycacbonylamino, heteroxycloalkyloxycacbonylamino, heteroaryloxycacbonylamino, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, halogen, xycloalkyl tùy ý được thế, aryl được thế tùy ý, heteroaryl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, và amino tùy ý được thế;

R_4 được chọn từ nhóm bao gồm hydro, R_3 và L_2 ;

mỗi m và n độc lập là số nguyên được chọn từ 0 đến 3;

mỗi B và B' độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L_3 , hydro, halogen, và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm metaloxenyl, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, và xycloalkyl tùy ý được thế, hoặc trong đó B và B' cùng với các

nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế; và

L_1 , L_2 , và L_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm kéo dài đối ảnh hoặc không đối ảnh có công thức:

- $[S_1]_c$ - $[Q_1-[S_2]_d]_d$ - $[Q_2-\{S_3\}_e]_e$ - $[Q_3-[4]_f]_f$ - S_5 - P trong đó:

(a) Q_1 , Q_2 và Q_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

trong đó các phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm P, mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly(C_1 - C_{18} alkoxy), C_1 - C_{18} alkoxyacetyl, C_1 - C_{18} alkylacetyl, C_1 - C_{18} alkoxyacetyloxy, aryloxyacetyloxy, perflu(C_1 - C_{18})alkoxy, perflu(C_1 - C_{18})alkoxyacetyl, perflu(C_1 - C_{18})alkylacetyl, perflu(C_1 - C_{18})alkylamino, di(perflu(C_1 - C_{18})alkyl)amino, perflu(C_1 - C_{18})alkylthio, C_1 - C_{18} alkylthio, C_1 - C_{18} axetyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl, C_3 - C_{10} xycloalkoxy, C_1 - C_{18} alkyl mạch thẳng, và C_1 - C_{18} alkyl mạch nhánh;

trong đó C_1 - C_{18} alkyl mạch thẳng và C_1 - C_{18} alkyl mạch nhánh này được thế một lần bằng nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xyano, halogen, và C_1 - C_{18} alkoxy; hoặc

trong đó C_1 - C_{18} alkyl mạch thẳng và C_1 - C_{18} alkyl mạch nhánh này được thế nhiều lần bằng ít nhất hai nhóm độc lập được chọn từ nhóm bao gồm halogen, $-M(T)_{(t-1)}$ và $-M(OT)_{(t-1)}$, trong đó M được chọn từ nhóm bao gồm nhôm, antimon, tantali, titan, zirconi và silicon, T được chọn từ nhóm bao gồm các gốc hữu cơ, các gốc hydrocacbon chức hữu cơ, các gốc hydrocacbon béo và các gốc hydrocacbon thơm, và t là hóa trị của M;

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

(i) alkylen tùy ý được thế, haloalkylen tùy ý được thế, $-\text{Si}(\text{CH}_2)_g-$, và $-\text{Si}[(\text{CH}_3)_2\text{O}]_h-$, trong đó g mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 20; h mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 16; và các nhóm thế cho alkylen và haloalkylen độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{18} alkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl và aryl;

(ii) $-\text{N}[Z]-$, $-\text{C}(Z)=\text{C}(Z)-$, $-\text{C}(Z)=\text{N}-$, $-\text{C}(Z)_2-\text{C}[Z']_2-$, và liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 -

C_{18} alkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl và aryl, và Z' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{18} alkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl và aryl; và

(iii) $-O-$, $-C(=O)-$, $-C\equiv C-$, $-N=N-$, $-S-$, $-S(=O)-$, $-(O=S(=O))-$, $-(O=S(=O))O-$, $-O(O=S(=O))O-$ và gốc C_1 - C_{24} alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh, gốc C_1 - C_{24} alkylen này không được thế, được thế một lần bởi xyano hoặc halogen, hoặc được thế nhiều lần bởi halogen,

với điều kiện là nếu hai đơn vị đệm chứa các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau thì các đơn vị đệm được liên kết sao cho các nguyên tử khác loại của đơn vị đệm thứ nhất không được liên kết trực tiếp với các nguyên tử khác loại của đơn vị đệm thứ hai, và

với điều kiện là nếu S_1 và S_5 được liên kết lần lượt với Công thức I và P, thì chúng được liên kết sao cho hai các nguyên tử khác loại không được liên kết trực tiếp với nhau;

(c) P mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydroxy, amino, C_2 - C_{18} alkenyl, C_2 - C_{18} alkynyl, azido, silyl, siloxy, silylhydrua, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, thio, isoxyanato, thioisoxyanato, acryloyloxy, metacrytoxyloxy, 2-(acryloyloxy)ethylcacbamyl, 2-(metacryloyloxy)ethylcacbamyl, aziridinyl, alyloxycacbonyloxy, epoxy, axit cacboxylic, este cacboxylic, acryloylamino, metacryloylamino, aminocacbonyl, C_1 - C_{18} alkyl aminocacbonyl, aminocacbonyl(C_1 - C_{18})alkyl, C_1 - C_{18} alkyloxycacbonyloxy, halocacbonyl, hydro, aryl, hydroxy(C_1 - C_{18})alkyl, (C_1 - C_{18})alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, amino(C_1 - C_{18})alkyl, C_1 - C_{18} alkylamino, di- $(C_1$ - $C_{18})$ alkylamino, C_1 - C_{18} alkyl(C_1 - C_{18})alkoxy, C_1 - C_{18} alkoxy(C_1 - C_{18})alkoxy, nitro, poly(C_1 - C_{18})alkyl ete, (C_1 - C_{18})alkyl(C_1 - C_{18})alkoxy(C_1 - C_{18})alkyl, polyetylenoxy, polypropylenoxy, etylen, acryloyl, acryloyloxy(C_1 - C_{18})alkyl, metacryloyl, metacryloyloxy(C_1 - C_{18})alkyl, 2-cloacryloyl, 2-phenylacryloyl, acryloyloxyphenyl, 2-cloacryloylamino, 2-phenylacryloylaminocacbonyl, oxetanyl, glyxidyl, xyano, isoxyanato(C_1 - C_{18})alkyl, este của axit itaconic, vinyl ete, vinyl este, dẫn xuất styren, polyme tinh thể lỏng mạch chính và mạch bên, dẫn xuất siloxan, dẫn xuất etyleimin, dẫn xuất axit maleic, dẫn xuất maleimit, dẫn xuất axit fumaric, dẫn xuất axit xinamic không được thế, dẫn xuất axit xinamic được thế bởi ít nhất một metyl, metoxy, xyano và halogen, và các nhóm hóa trị một hoặc hóa trị hai đối ảnh hoặc không đối ảnh được thế hoặc không được thế được chọn từ nhóm bao gồm gốc steroid, gốc terpenoit, gốc alkaloit và hỗn hợp của chúng, trong đó các nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao

gồm C_1-C_{18} alkyl, C_1-C_{18} alkoxy, amino, C_3-C_{10} xycloalkyl, C_1-C_{18} alkyl(C_1-C_{18})alkoxy, flo(C_1-C_{18})alkyl, xyano, xyano(C_1-C_{18})alkyl, xyano(C_1-C_{18})alkoxy hoặc hỗn hợp của chúng, hoặc P là cấu trúc có từ 2 đến 4 nhóm phản ứng hoặc P là tiền chất polyme hóa hoán vị mở vòng không được thế hoặc được thế hoặc P là hợp chất đổi màu theo ánh sáng được thế hoặc không được thế; và

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

Tham khảo Công thức IA, mỗi R_1 và R_2 có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, hydroxy, và các nhóm đối ảnh và không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm heteroalkyl tùy ý được thế, alkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkylhalogen tùy ý được thế, amino tùy ý được thế, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkoxy tùy ý được thế, và aminocacbonyl hoặc R_1 và R_2 có thể cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm oxo, xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

R_3 mỗi lần xuất hiện, có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm formyl, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, arylcacbonyl, aryloxycacbonyl, alkyl tùy ý được thế, este của axit boronic, halogen, xycloalkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế và amino tùy ý được thế;

mỗi m và n có thể độc lập là số nguyên được chọn từ 0 đến 2;

mỗi B và B' có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L_3 , hydro, halogen, các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, và xycloalkyl tùy ý được thế, hoặc trong đó B và B' cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

L_1 , L_2 , và L_3 mỗi lần xuất hiện, có thể độc lập được chọn từ nhóm kéo dài đối ảnh hoặc không đối ảnh có công thức:

$-[S_1]_c-[Q_1-[S_2]_d]_{d'}-[Q_2-[S_3]_e]_{e'}-[Q_3-[S_4]_f]_{f'}-S_5-P$ trong đó:

(a) Q_1 , Q_2 , và Q_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế và heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

trong đó các nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm P, mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly(C_1 - C_{12} alkoxy), C_1 - C_{12} alkoxycarbonyl, C_1 - C_{12} alkylcarbonyl, perflo(C_1 - C_{12})alkoxy, perflo(C_1 - C_{12})alkoxycarbonyl, perflo(C_1 - C_{12})alkylcarbonyl, C_1 - C_{18} axetyl, C_3 - C_7 xycloalkyl, C_3 - C_7 xycloalkoxy, C_1 - C_{12} alkyl mạch thẳng, và C_1 - C_{12} alkyl mạch nhánh,

trong đó C_1 - C_{12} alkyl mạch thẳng, và C_1 - C_{12} alkyl mạch nhánh này được thế một lần bằng nhóm được chọn từ nhóm bao gồm halogen, C_1 - C_{12} alkoxy, hoặc

trong đó C_1 - C_{12} alkyl mạch thẳng, và C_1 - C_{12} alkyl mạch nhánh này được thế nhiều lần bằng ít nhất hai nhóm độc lập được chọn từ halogen;

(b) mỗi c, d, e, và f độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 10; và mỗi S_1 , S_2 , S_3 , S_4 , và S_5 độc lập được chọn mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm được chọn từ:

(i) alkylen được thế hoặc không được thế, haloalkylen được thế hoặc không được thế, $-\text{Si}(\text{CH}_2)_g-$, và $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$, trong đó g mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 10; h mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 8; và các nhóm thế cho alkylen và haloalkylen độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl và phenyl;

(ii) $-\text{N}(\text{Z})-$, $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$, và liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl và phenyl; và

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

với điều kiện là nếu hai đơn vị đệm chứa các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau thì các đơn vị đệm được liên kết sao cho các nguyên tử khác loại của đơn vị đệm thứ nhất không được liên kết trực tiếp với các nguyên tử khác loại của đơn vị đệm thứ hai, và

với điều kiện là nếu S_1 và S_5 được liên kết lần lượt với Công thức I và P, thì chúng được liên kết sao cho hai các nguyên tử khác loại không được liên kết trực tiếp với nhau;

(c) P mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydroxy, amino, C_2 - C_{12} alkenyl, C_2 - C_{12} alkenyl, silyl, siloxy, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, isoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, epoxy, axit cacboxylic, este cacboxylic, C_1 - C_{12} alkyloxycarbonyloxy, halocarbonyl, hydro, aryl, hydroxy(C_1 - C_{12})alkyl, C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, etylen, acryloyl, acryloyloxy(C_1 - C_{12})alkyl, metacryloyl, metacryloyloxy(C_1 - C_{12})alkyl, oxetanyl, glycidyl, vinyl ete, dẫn xuất siloxan, dẫn xuất

axit xinamic không được thế, dẫn xuất axit xinamic được thế bởi ít nhất một metyl, metoxy, xyano và halogen, và các nhóm hóa trị một hoặc hóa trị hai đối ảnh hoặc không đối ảnh được thế hoặc không được thế được chọn từ gốc steroid, trong đó mỗi nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₁₂ alkyl, C₁-C₁₂ alkoxy, amino, C₃-C₇ xycloalkyl, C₁-C₁₂ alkyl(C₁-C₁₂)alkoxy, hoặc flo(C₁-C₁₂)alkyl, hoặc P là cấu trúc có từ 2 đến 4 nhóm phản ứng; và

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

Ngoài ra, mỗi R₁ và R₂ có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, hydroxy, và các nhóm đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm heteroalkyl tùy ý được thế, alkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, halogen, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkoxy tùy ý được thế, và aminocacbonyl hoặc R₁ và R₂ có thể cùng với các nguyên tử ở giữa để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm oxo và xycloalkyl tùy ý được thế;

R₃ mỗi lần xuất hiện, có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, alkyl tùy ý được thế, este của axit boronic, halogen, xycloalkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế và amino tùy ý được thế;

trong đó mỗi m và n độc lập là số nguyên được chọn từ 0 đến 2;

mỗi B và B' độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L₃, hydro, các nhóm đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, và xycloalkyl tùy ý được thế, hoặc trong đó B và B' cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ xycloalkyl tùy ý được thế;

L₁, L₂, và L₃ mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm kéo dài đối ảnh hoặc không đối ảnh có công thức:

- [S1]c -[Q1-[S2]d]d' -[Q2 -[S3]e]e' -[Q3-[S4]f]f' -S5 -P trong đó:

(a) Q₁, Q₂, và Q₃ mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế và heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế và eteroxycloalkyl tùy ý được thế;

trong đó các phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm P, C₁-C₆ alkoxycacbonyl, perflo(C₁-C₆)alkoxy, C₃-C₇ xycloalkyl, C₃-C₇ xycloalkoxy, C₁-C₆ alkyl mạch thẳng, và C₁-C₆ alkyl mạch nhánh,

trong đó C1-C6 alkyl mạch thẳng, và C1-C6 alkyl mạch nhánh này được thể một lần bằng nhóm được chọn từ nhóm bao gồm halogen và C1-C12 alkoxy, hoặc

trong đó C1-C6 alkyl mạch thẳng, và C1-C6 alkyl mạch nhánh này được thể nhiều lần bằng ít nhất hai nhóm độc lập được chọn từ halogen;

(b) mỗi c, d, e, và f độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 10; và mỗi S1, S2, S3, S4, và S5 độc lập được chọn mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm được chọn từ:

(i) alkylene được thể hoặc không được thể;

(ii) -N(Z)-, -C(Z)=C(Z)-, và liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro và C1-C6 alkyl; và

(iii) -O-, -C(=O)-, -C=C-, và -N=N-, -S-;

với điều kiện là nếu hai đơn vị đệm chứa các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau thì các đơn vị đệm được liên kết sao cho các nguyên tử khác loại của đơn vị đệm thứ nhất không được liên kết trực tiếp với các nguyên tử khác loại của đơn vị đệm thứ hai, và

với điều kiện là nếu S1 và S5 được liên kết lần lượt với Công thức I và P, thì chúng được liên kết sao cho hai các nguyên tử khác loại không được liên kết trực tiếp với nhau;

(c) P mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydroxy, amino, C2-C6 alkenyl, C2-C6 alkenyl, siloxy, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, isoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, epoxy, axit cacboxylic, este cacboxylic, C1-C6 alkyloxycarbonyloxy, hydro, aryl, hydroxy(C1-C6)alkyl, C1-C6 alkyl, etylen, acryloyl, acryloyloxy(C1-C12)alkyl, oxetanyl, glyxydyl, vinyl ete, dẫn xuất siloxan, và các nhóm hóa trị một hoặc hóa trị hai đối ảnh hoặc không đối ảnh được thể hoặc không được thể được chọn từ gốc steroid, trong đó mỗi nhóm thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C1-C6 alkyl, C1-C6 alkoxy, amino, C3-C7 xycloalkyl.

Cụ thể hơn, mỗi R1 và R2 có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm metyl, etyl, propyl và butyl; R3 và R4 mỗi lần xuất hiện có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm metyl, etyl, brom, clo, flo, iot, metoxy, etoxy và CF₃: mỗi B và B' độc lập được chọn từ phenyl được thể bằng một hoặc nhiều nhóm độc lập được chọn từ nhóm bao gồm aryl, heteroaryl, heteroxycloalkyl, alkyl, alkenyl, alkynyl, alkoxy, halogen, amino, alkylcarbonyl, cacboxy, và alkoxycarbonyl; và với L1: Q1 là aryl không được thể; e' là 1 hoặc 2; e mỗi lần xuất hiện là 1; S3 mỗi lần xuất hiện là liên kết đơn; Q2 mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ aryl tùy ý được thể; f' là 1; f là 1; S4 là liên kết

đơn; và Q3 là xycloalkyl tùy ý được thế; S5 là $-(CH_2)_g-$, trong đó g là số nguyên từ 1 đến 20; và P là hydro.

Thông thường, R1 và R2 là metyl; R3 và R4 mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm metyl, brom, clo, flo, metoxy, và CF_3 ; mỗi B và B' độc lập được chọn từ phenyl được thế bằng một nhóm được chọn từ nhóm bao gồm C1-C4 alkoxy, flo, CF_3 , piperidinyl, và morpholino; và đối với L1:Q1 là phenyl không được thế; Q2 mỗi lần xuất hiện là phenyl không được thế; Q3 là xyclohexyl không được thế; và g là 5,

Trong số các hợp chất theo sáng chế, L1 có thể được chọn từ nhóm bao gồm:

- 4-[4-(4-butyl-xyclohexyl)-phenyl]-xyclohexyloxy;
- 4"-butyl-[1, 1', 4', 1"]terxyclohexan-4-yloxy;
- 4-[4-(4-butyl-phenyl)-xyclohexyloxycarbonyl]-phenoxy;
- 4'-(4-butyl-benzoyloxy)-biphenyl-4-cacbonyloxy;
- 4-{4-pentyl-phenylazo)-phenylcacbamoyl};
- 4-(4-dimethylamino-phenylazo)-phenylcacbamoyl;
- 4-[5-(4-propyl-benzoyloxy)-pyrimidin-2-yl]-phenyl
- 4-[2-(4'-metyl-biphenyl-4-cacbonyloxy)-1,2-diphenyl-etoxycarbonyl]-phenyl;
- 4-(1,2-diphenyl-2-{3-[4-(4-propyl-benzoyloxy)-phenyl]-acryloyloxy}-etoxycarbonyl)-phenyl;
- 4-[4-(4-{4-[3-(6-{4-[4-{4-nonyl-benzoyloxy)-phenoxyacarbonyl]-phenoxy}-hexyloxycarbonyl)propionyloxy]-benzoyloxy}-benzoyloxy)-phenyl]-piperazin-1-yl;
- 4-[4-(4-{4-[4-(4-nonyl-benzoyloxy)-benzoyloxy]-benzoyloxy}-benzoyloxy)-phenyl]-piperazin-1-yl;
- 4-(4'-propyl-biphenyl-4-yletynyl)-phenyl;
- 4-(4-flo-phenoxyacarbonyloxy)-piperidin-1-yl;
- 2-[17-(1,5-dimetyl-hexyl)-10,13-dimetyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxy]-indan-5-yl;
- 4-[17-(1,5-dimetyl-hexyl)-10,13-dimetyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxycarbonyloxy]-piperidin-1-yl;
- 4-{biphenyl-4-cacbonyloxy)-piperidin-1-yl};
- 4-{naphtalen-2-cacbonyloxy)-piperidin-1-yl};
- 4-(4-phenylcacbamoyl-phenylcacbamoyl)-piperidin-1-yl;
- 4-(4-(4-phenylpiperidin-1-yl)-benzoyloxy)-piperidin-1-yl;

4-butyl-[1,1',4' 1"]terpheny[-4-yl;
 4-{4-pentadecafluoroheptyloxy-phenylcacbamoyl)-benzyloxy;
 4-(3-piperidin-4-yl-propyl)-piperidin-1-yl;
 4-(4-{4-[17-(1,5-dimethyl-hexyl)-10,13-dimethyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,
 15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxycacbonyloxy]-
 benzoyloxy}-phenoxycacbonyl)phenoxy-methyl;
 4-[4-(4-xyclohexyl-phenylcacbamoyl)-benzyloxy]-piperidin-1-yl;
 4-[4-(4-xyclohexyl-phenylcacbamoyl)-benzoyloxy]-piperidin-1-yl;
 N-{4-[(4-pentyl-benzyliden)-amino]-phenyl}-axetamidyl;
 4-(3-piperidin-4-yl-propyl)-piperidin-1-yl;
 4-{4-hexyloxy-benzoyloxy)-piperidin-1-yl;
 4-{4'-hexyloxy-biphenyl-4-cacbonyloxy)-piperidin-1-yl;
 4-(4-butyl-phenylcacbamoyl)-piperidin-1-yl;
 4-[4-[4-[4-piperidinyl-4-oxy]-phenyl]phenoxy]piperidin-4-yl;
 4-(4-(9-(4-butylphenyl)-2,4,8,10-tetraoxaspiro[5.5]undec-3-yl)
 phenyl)piperazin-1-yl;
 4-(6-(4-butylphenyl)cacbonyloxy-(4,8-dioxabicyclo[3.3.0]oct-2-
 yl))oxycacbonyl)phenyl;
 1-{4-[5-(4-butyl-phenyl)-[1,3]dioxan-2-yl]-phenyl}-4-methyl-piperazin-1-yl;
 4-(7-(4-propylphenylcacbonyloxy)bicyclo[3.3.0]oct-2-yl)oxycacbonyl)phenyl;
 4-[17-(1,5-dimethyl-hexyl)-10,13-dimethyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,-16,17-
 tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxycacbonyloxy;
 (4-trans-(4-pentylxyclohexyl)benzamido)phenyl;
 (4-(4-trans-(4-pentylxyclohexyl)phenoxy)cacbonyl) phenyl;
 4-(4-(4-trans-(4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido) phenyl;
 4-(((trans-(4'-pentyl-[1,1'-bi(xyclohexan)]-4-yl)oxy)cacbonyl)phenyl;
 4-(4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl;
 4-(((4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)oxy)benzamido;
 4-(4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)piperazin-1-yl;
 4-(4-(4-trans-(4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-2-(trifluoromethyl)phenyl;
 2-methyl-4-trans-(4-(((4'-trans-(4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-yloxy)cacbonyl)-
 xyclohexanecacboxamido)phenyl;
 4'-(4'-pentylbi(xyclohexan-4-)cacbonyloxy)biphenylcacbonyloxy;

4-(((3S,8S,9S,10R,13R,14S,17R)-10,13-dimethyl-17-((R)-6-methylheptan-2-yl)-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]-phenanthren-3-yloxy)cacbonyl)piperazin-1-yl; và

4-((S)-2-methylbutoxy)phenyl)-10-(4-(((3R,3aS,6S,6aS)-6-(4'-trans-(4-pentylxyclohexyl)biphenylcacbonyloxy)hexahydrofuro[3,2-b]furan-3-yloxy)cacbonyl)phenyl.

Cụ thể hơn, các hợp chất được mô tả ở đây có thể được chọn từ nhóm bao gồm:

3,3-Bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzamido)-phenyl]-13,13-dimethyl-12-brom-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]napbtho[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypheyl)-10-[4-((4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenoxy)-cacbonyl)phenyl]-6,13,13-trimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-11,13,13-trimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzamido)-phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxypheyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxypheyl)-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-((4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenoxy)cacbonyl)phenyl]-12-brom-5,7-diflo-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-ptperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-5,7-diflo-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-((4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenoxy)cacbonyl)phenyl]-12-brom-5,7-diflo-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-pipendinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxydinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-6,7-dimetox-11,13,13-trimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxyphenyl)-10,12-bis[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxyphenyl)-10,12-bis[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-5,7-diflo-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-flophenyl)-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-metoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-flophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]-naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-flophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-enzamtdo)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]-naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-metoxyphenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-13,13-dimetyl-3-(4-morpholinophenyl)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-6-(iriflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-(4-(4-metoxyphenyl)piperazin-1-yl)phenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3-phenyl-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(((trans, trans-4'-pentyl-[1,1'-bi(xyclohexan)]-4-yl)oxy)cacbonyl)phenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-6-(triflornetyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-metoxyphenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3-(4-(triflometoxy)phenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-hydroxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dthydro-indeno[2',3':3,4]-naphto[1,2-b]pyran;

12-brom-3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-((4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)oxy)benzamido)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-5,7-diclo-11-metoxo-3-(4-metoxoiphenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)-phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)oxy)benzamido)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

5,7-diclo-3,3-bis(4-hydroxyphenyl)-11-metoxo-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

6,8-diclo-3,3-bis(4-hydroxyphenyl)-11-metoxo-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-5,8-diflo-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)piperazin-1-yl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran ;

3-(4-Morpholinophenyl)-3-(4-metoxoiphenyl)-10,7-bis[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5-flo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Morpholinophenyl)-3-(4-metoxoiphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-2-(triflometyl)phenyl]-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxoiphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)-2-(triflometyl)phenyl]-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Morpholinophenyl)-3-(4-metoxoiphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-2-(triflometyl)phenyl]-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxoiphenyl)-13,13-dimetyl-10-(2-metyl-4-(trans-4-((4'-((trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-yloxy)cacbonyl)xyclohexancacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-(4-(4-Butylphenyl)piperazin-1-yl)phenyl)-3-(4-metoxypheyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcacboxamit)-2-(triflometyl)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-(4-(4-Butylphenyl)piperazin-1-yl)phenyl)-3-(4-metoxypheyl)-13,13-dimetyl-10-(2-metyl-4-(4'-trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcacboxamit)-phenyl)-7-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxypheyl)-13,13-dimetyl-7,10-bis(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-biphenyl-4-ylcacboxamido)phenyl)-3-phenyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-p-Tolyl-3-(4-metoxypheyl)-6-metoxi-13,13-dimetyl-7-(4'-(trans,trans-4'-pentylbi(xyclohexan-4-)cacbonyloxy)biphenylcacbonyloxy)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

10-(4-(((3S,8S,9S,10R,13R,14S,17R)-10,13-Dimetyl-17-((R)-6-metylheptan-2-yl)-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]-phenanthren-3-yloxy)cacbonyl)piperazin-1-yl)-3-(4-metoxypheyl)-13,13-dimetyl-3-(4-morpholinophenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

6-Metoxi-3-(4-metoxypheyl)-13,13-dimetyl-3-(4-((S)-2-metylbutoxy)-phenyl)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

6-Metoxi-3-(4-metoxypheyl)-13,13-dimetyl-3-(4-((S)-2-metylbutoxy)-phenyl)-7-(4'-(trans,trans-4'-pentylbi(xyclohexan-4-)cacbonyloxy)biphenylcacbonyloxy)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcacboxamido)-phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran; và

6-Metoxi-3-(4-metoxypheyl)-13,13-dimetyl-3-(4-((S)-2-metylbutoxy)-phenyl)-10-(4-(((3R,3aS,6S,6aS)-6-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenylcacbonyloxy)-hexahydrofuro[3,2-b]furan-3-yloxy)cacbonyl)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Trong tất cả các ví dụ nêu trên, các hợp chất được mô tả có thể hữu ích khi sử dụng một mình, dưới dạng hỗn hợp, hoặc kết hợp với các hợp chất, các hợp phần, và/hoặc các vật liệu khác.

Các phương pháp để thu được các hợp chất mới được mô tả ở đây sẽ trở nên rõ ràng với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này, các quy trình thích hợp sẽ được mô tả, ví dụ, trong các sơ đồ phản ứng và các ví dụ dưới đây, và trong các tham khảo được nêu ở đây.

Trong các sơ đồ và các ví dụ dưới đây, các chữ viết tắt dưới đây có ý nghĩa như sau. Nếu các chữ viết tắt không được định nghĩa, thì nói chung nó có nghĩa được chấp nhận thông thường.

BINAP = 2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl

Bi(OTf)₃ = bismut triflat

CuI = đồng iodua

DHP = 3,4-dihydro-2H-pyran

DCC = dicyclohexylcarbodiimide

DCM = dichlorometan

DBSA = axit dodecylbenzenesulfonic

DIBAL = diisobutylaluminium hydrua

DMAP = 4-dimethylaminopyridin

DME = dimetyl ete

DMF = N,N-dimetylformamit

DMSO = dimetylsulfoxit

Dppf = 1,1'-bis(diphenylphosphino)feroxen

EtMgBr = etyl magie bromua

Et₂O = dietylete

g = gam

h = giờ

HPLC = sắc ký lỏng hiệu năng cao

(iPr)₂NH = diisopropyl amin

HOAc = axit axetic

LDA = lithi diisopropylamit

KMnO₄ - kali permanganate

M = mol (molarity)

mCPBA = axit meta-Cloperoxybenzoic

MeLi = metyl lithi

mg = miligam

min = phút

mL = mililit

mmol - milimol

mM = millimolar

NatOBu = natri tert-butoxit

N = bình thường (normality)

ng = nanogam

nm = nanomét

nM = nanomolar

NMP = N-metyl pyrrolidon

NMR = cộng hưởng từ hạt nhân

Pd(OAc)₂ = paladi axetat

Pd₂(dba)₃ = tris(dibenzylidenaxeton)dipaladi(0)

PPh₃ = triphenyl phosphin

PPTS = pyridin p-toluensulfonat

pTSA = axit p-toluensulfonic

PdCl₂(PPh₃)₂ = bis(triphenylphosphin)paladi(II) clorua

PBS = dung dịch muối đệm phosphat

TBAF = Tetra-n-butylamoni florua

THF = tetrahydrofuran

TLC = sắc ký lớp mỏng

t-BuOH = t-butanol

(Tf)₂O = axit triflometansulfonic anhydrua

?L = microlít

?M = micromolar

Zn(OAc)₂ = kẽm axetat

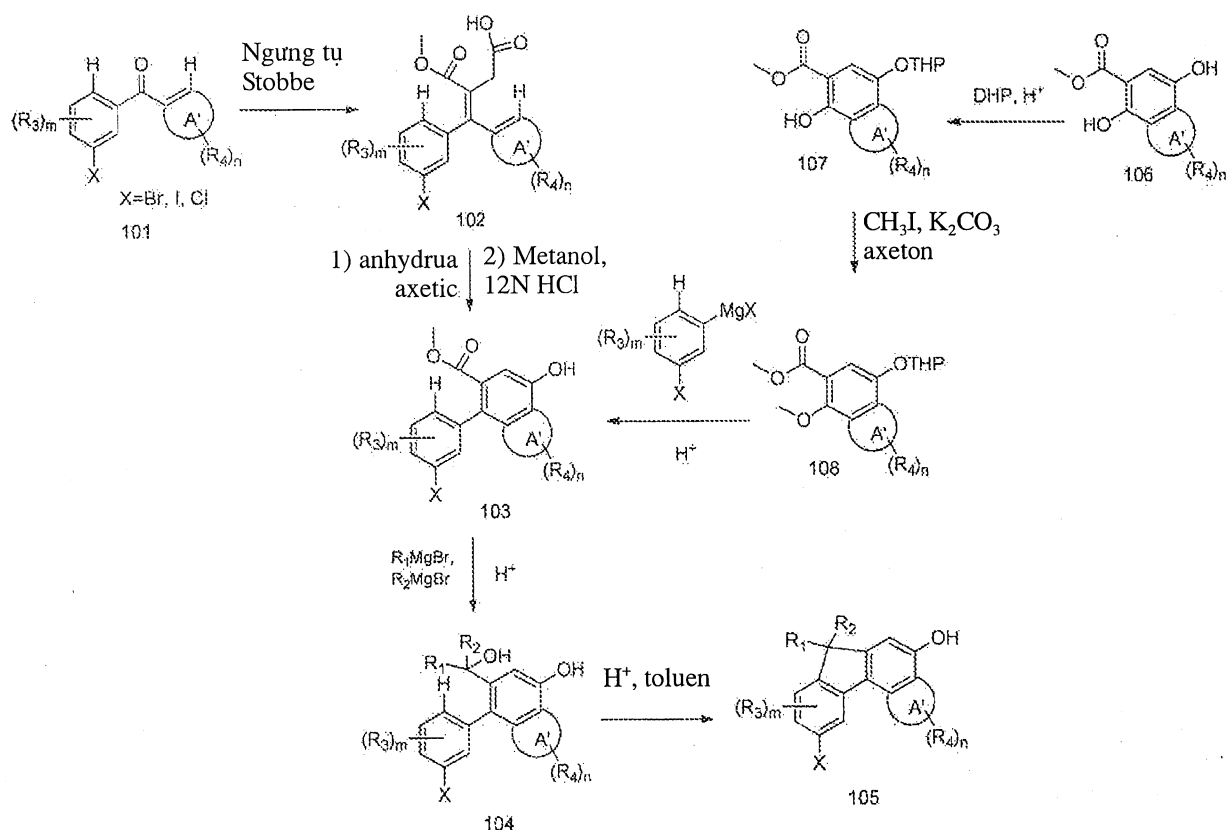
Zn(CN)₂ = kẽm xyanua

Như được mô tả trong các Sơ đồ phác thảo bổ sung dưới đây, hợp chất có công thức 105 thể hiện một chất trung gian có thể dùng làm chất cơ bản để điều chế thuốc nhuộm lưỡng sắc đổi màu theo ánh sáng được mô tả ở đây. Ví dụ, chất này có thể được điều chế như được thể hiện trong Sơ đồ 1, 2, 3, 4 và 5. Khi được điều chế, chức hydroxy của hợp chất có công thức 105 có thể được sử dụng để tạo thành pyran như được thấy trong Sơ đồ 6. Halogen của hợp chất có công thức 105 có thể được chuyển

hóa vào nhóm kéo dài qua phản ứng Suzuki hoặc được chuyển hóa vào nhóm chức Q khác như được minh họa trong Sơ đồ 6. Các hóa chất có thể được sử dụng để chuyển hóa nhóm chức có thể được quan sát thấy trong Sơ đồ 7, 8 và 9, nhóm chức Q mới có thể là nhóm kéo dài hoặc được chuyển hóa thành nhóm kéo dài.

Trong tất cả các sơ đồ, X có thể được chọn từ halogen, ví dụ, F, Br, Cl và I. Mỗi m và n là số nguyên được chọn từ 0 đến tổng số vị trí có thể. Từ các Sơ đồ 1 đến Sơ đồ 9, R₃ mỗi lần xuất hiện, có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, halogen và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể được chọn từ alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, xycloalkyl, aryl, heteroaryl, alkoxy, perfloalkoxy, heteroalkyl, heteroxycloalkyl, alkylthiol, arylthiol, amino aminocarbonyl, aryloxyacarbonyl, alkyloxyacarbonyl, aminocarbonyloxy, alkoxyacarbonylamino, aryloxyacarbonyl-amino, xycloalkoxyacarbonylamino, heteroxycloalkyloxyacarbonylamino và heteroaryloxyacarbonylamino. R₄ được chọn từ R₃.

Sơ đồ 1

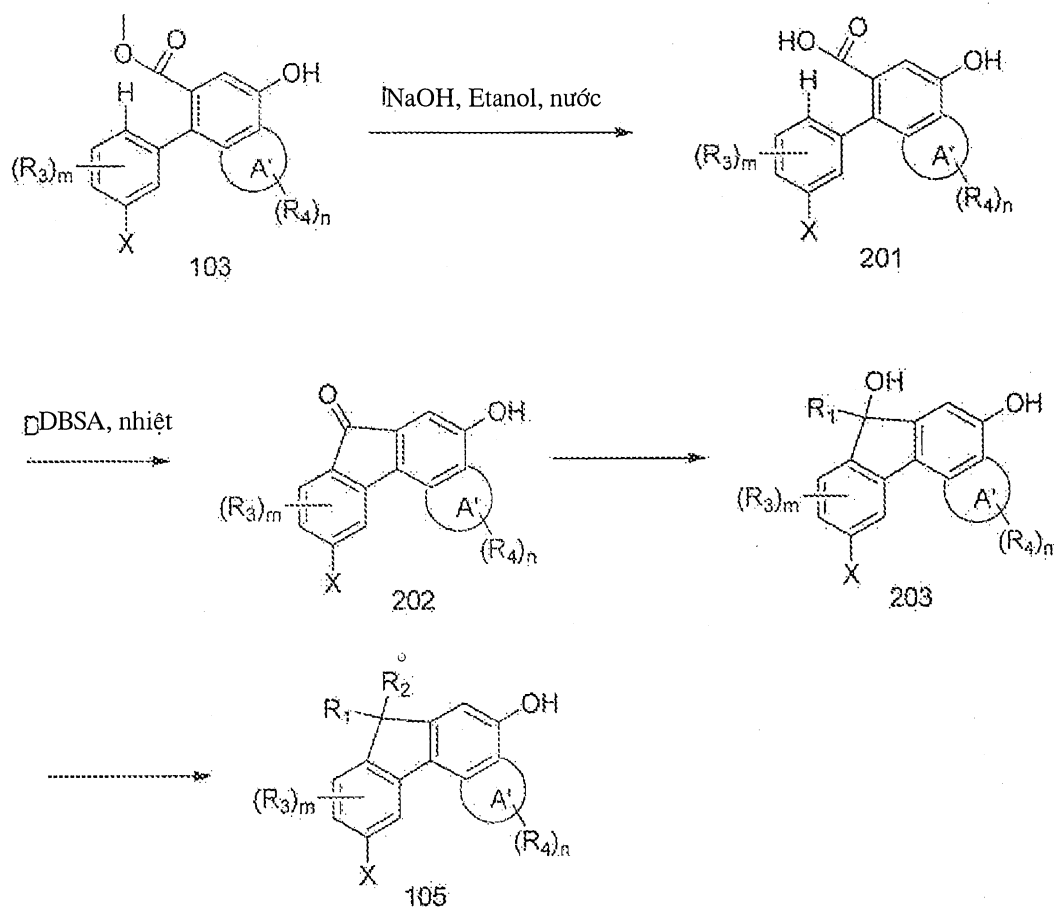


Sơ đồ 1 thể hiện một cách điều chế hợp chất có công thức 105, R₁ và R₂ có thể được chọn từ các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể như heteroalkyl, alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl, và heteroxycloalkyl.

Aryl keton có công thức 101 có thể được mua hoặc được điều chế bởi các phương pháp Friedel-Crafts hoặc các phương pháp Grignard hoặc Cuperate đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này. Ví dụ, xem tài liệu: "Friedel-Crafts and Related Reactions, George A. Olah, interscience Publishers, 1964, Vol. 3, Chapter XXXI (Tổng hợp keton thơm)"; "Regioselective Friedel-Crafts Acylation of 1,2,3,4-Tetrahydroquinoline and Related Nitrogen Heterocycles: Effect, on NH Protective Groups and Ring Size" của Ishihara, "Yugi et al, J. Chem. Soc, Perkin Trans. 1, pages 3401 to 3406, 1992"; "Addition of Grignard Reagents to Aryl Acid Chlorides: An efficient synthesis of aryl ketones" của Wang, Xiao-jun và các đồng tác giả, "Organic Letters, Vol. 7, No. 25, 5593-5595, 2005" và các tham khảo được nêu ở đây, các bộ lọc liên quan đến các phương pháp tổng hợp nêu trên được đưa toàn bộ ra đây để tham khảo. Phản ứng Stobbe của aryl keton có công thức 101 với dimetyl succinat với sự có mặt của kali t-butoxit tạo thành sản phẩm ngưng tụ của hợp chất có công thức 102, hợp chất này được đưa vào phản ứng đóng vòng trong anhydrua axetic sau đó metanol phân để tạo thành sản phẩm của hợp chất có công thức 103.

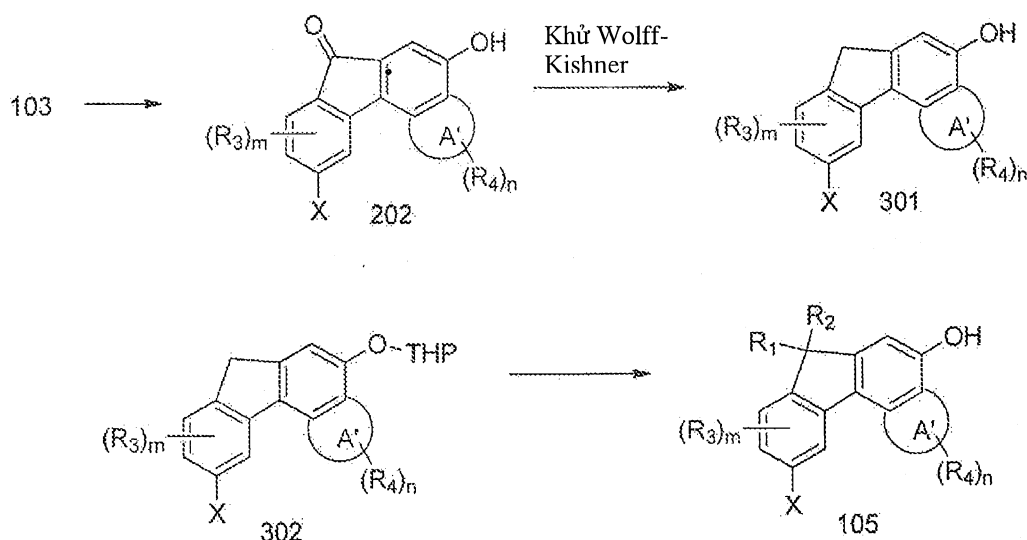
Hợp chất có công thức 103 cũng có thể được điều chế từ phản ứng thế thơm ái nhân qua trung gian este bắt đầu từ hợp chất có công thức 108 bằng các phương pháp đã biết bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này, ví dụ, như còn được mô tả trong tài liệu: "Synthesis, January 1995, pages 41-43"; "The Journal of Chemistry Society Perkin Transaction 1, 1995, pages 235-241" và patent Mỹ số 7,557,208 B2, bộ lọc này đề cập đến các phương pháp tổng hợp được đưa toàn bộ ra đây để tham khảo.

Khi được điều chế, hợp chất có công thức 103 có thể được chuyển hóa tiếp thành hợp chất được ngưng tụ indeno của hợp chất có công thức 105 với các nhóm thế khác nhau trên cầu cacbon qua các phản ứng nhiều bước khác nhau có thể được tìm thấy trong các tài liệu patent Mỹ số 5,645,767; 5,869,658; 5,698,141; 5,723,072; 5,961,892; 6,113,814; 5,955,520; 6,555,028; 6,296,785; 6,555,028; 6,683,709; 6,660,727; 6,736,998; 7,008,568; 7,166,357; 7,262,295; 7,320,826 và 7,557,208, bộ lọc này đề cập đến các nhóm thế trên cầu cacbon được đưa toàn bộ ra đây để tham khảo. Sơ đồ 1 minh họa rằng hợp chất có công thức 103 phản ứng với chất phản ứng Grignard sau đó phản ứng đóng vòng để tạo thành hợp chất có công thức 105.



Sơ đồ 2 minh họa cách thứ hai chuyển hóa hợp chất có công thức 103 thành hợp chất có công thức 105. Sau khi thủy phân hợp chất có công thức 103 sau đó phản ứng đóng vòng, thu được hợp chất có công thức 202. Nhóm cacbonyl của hợp chất có công thức 202 có thể phản ứng với chất ái nhân, giống chất phản ứng Grignard, chất phản ứng lithi hữu cơ, hoặc perfloalkyl trimetylsilan để tạo thành hợp chất có công thức 203. R_1 có thể được chọn từ các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể như heteroalkyl, alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl và heteroxycloalkyl. Nhóm hydroxyl của hợp chất có công thức 203 có thể dễ dàng được chuyển hóa vào R_2 , có thể được chọn từ halogen và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể như alkoxy, silanoxo, heteroaryloxy và aryloxy.

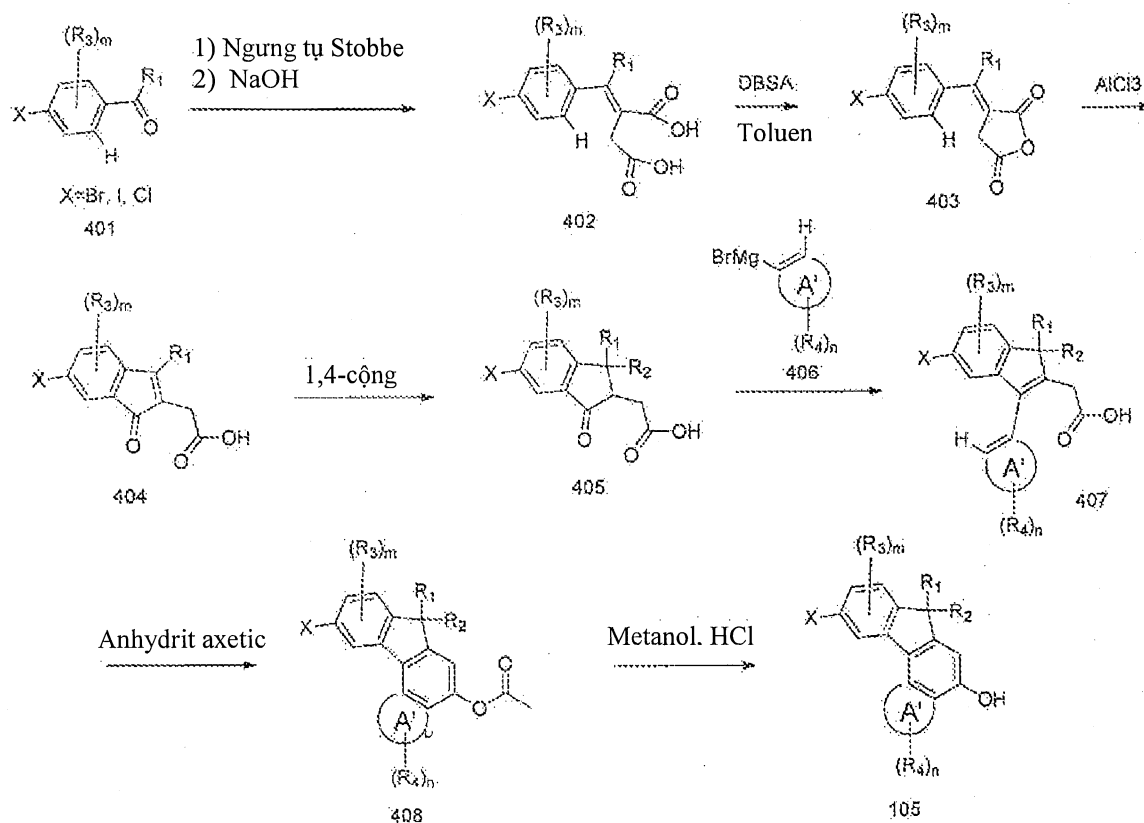
Sơ đồ 3



Sơ đồ 3 minh họa cách thứ ba chuyển hóa hợp chất có công thức 103 thành hợp chất có công thức 105. Hợp chất có công thức 202 của Sơ đồ 2 có thể được khử thành hợp chất có công thức 301 sử dụng phản ứng khử Wolff-Kishner hoặc phiên bản cải biến của nó. Các ví dụ có thể được tìm thấy trong tài liệu: "Practical procedures for the preparation of N-tert-butyldimethylsilylhydrozones and their use in modified Wolff-Kishner reductions and in the synthesis of vinyl halides and gem-dihalides" bởi Furrow, M.E., và các đồng tác giả, J Am Chem Soc: 126(17): 5438-45, May 5 2004, và các tham khảo ở đây, bộc lộ này đề cập đến phản ứng khử Wolff-Kishner được đưa ra đây để tham khảo. Sau khi bảo vệ hydroxy, hợp chất có công thức 302 có gem-cacbon rất ái nhân khi được deproton hóa bởi bazơ như LDA hoặc chất phản ứng methyl Grignard. Bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này, hợp chất được deproton hóa có công thức 302 có thể được chuyển hóa thành R_1 và R_2 bằng cách cho phản ứng với chất ái điện tử như các dẫn xuất alkyl halogenua, cacbon dioxit, các axit clorua, nitril và cloformat. Kết quả là, hợp chất có công thức 105 có thể được điều chế với R_1 và R_2 được chọn từ nhóm bao gồm hydro, các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể được chọn từ heteroalkyl, alkyl, xycloalkyl, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxyacabonyl, alkylcacbonyl, alkoxyacabonyl, aminocacbonyl, arylcacbonyl, aryloxyacabonyl, hoặc R_1 và R_2 có thể cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ oxo, xycloalkyl tùy ý được thể, và heteroxycloalkyl tùy ý được thể.

Các Sơ đồ 4 và 5 tóm tắt hai phương pháp mới để điều chế hợp chất có công thức 105, được cho là chưa từng được mô tả.

Sơ đồ 4

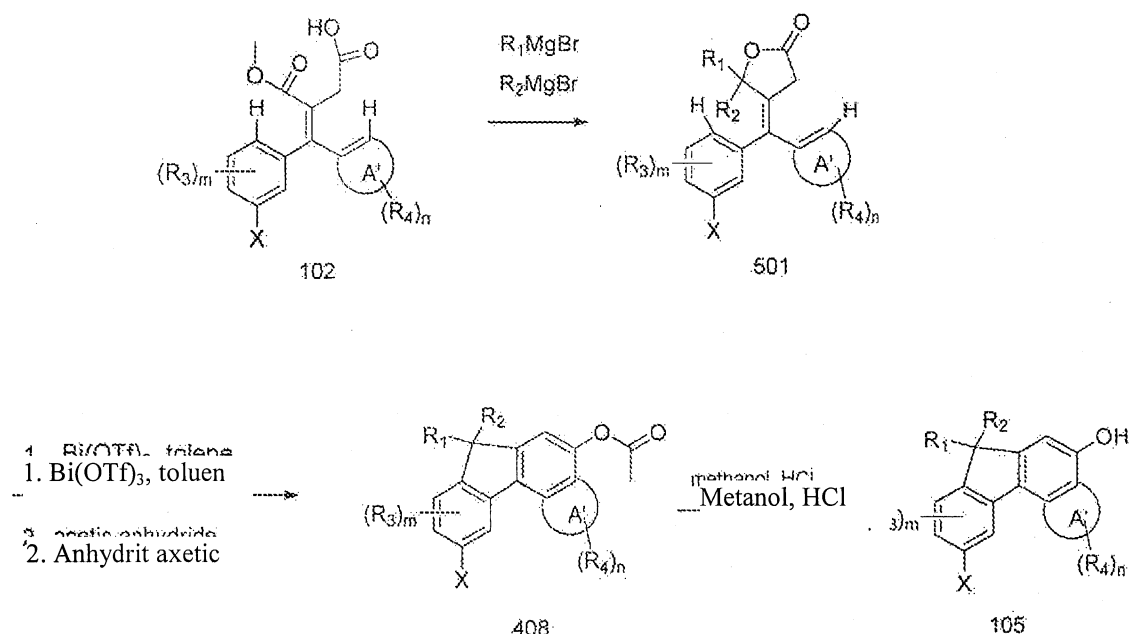


Sơ đồ 4 bắt đầu từ aryl keton có công thức 401. R_1 có thể được chọn từ nhóm bao gồm hydro, các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể như heteroalkyl, alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl và heteroxycloalkyl.

Sau phản ứng Stobbe với dimetyl succinat, hợp chất có công thức 402 được chuyển hóa thành anhydrua có công thức 403. Anhydrua này có thể được chuyển thành axit indenon có công thức 404 có sử dụng nhôm clorua. Phản ứng 1,4-cộng có thể được thực hiện sử dụng các chất ái nhân như chất phản ứng kim loại hữu cơ, amin, alcohol và thiol. Phản ứng này tạo thành axit indano có công thức 405. R_2 có thể được chọn từ nhóm bao gồm hydro, các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể như heteroalkyl, alkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl, heteroxycloalkyl, amino, alkoxy, và thiol. Hợp chất có công thức 405 có thể phản ứng với chất phản ứng Grignard có công thức 406 để tạo thành hợp chất có công thức 407 sau khi kiểm tra độ axit. Hợp chất có công thức 407 được làm phản ứng đóng vòng trong anhydrua axetic sau đó metanol phân để tạo thành sản phẩm có công thức 408,

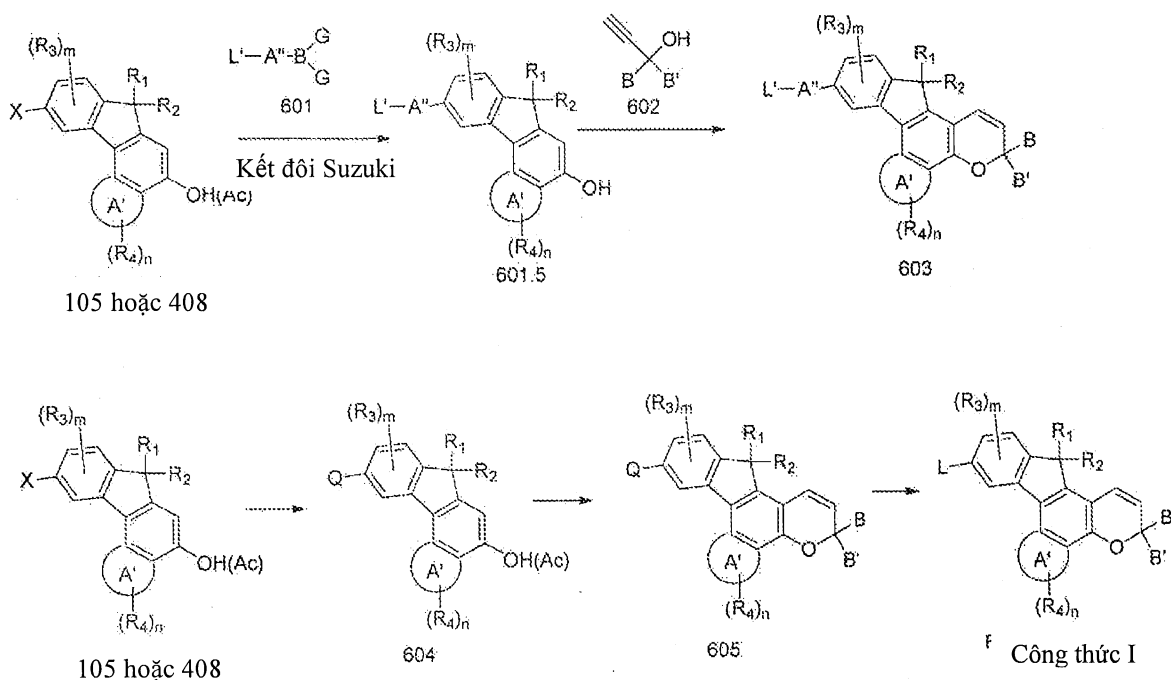
có thể được sử dụng trực tiếp trong Sơ đồ 8 hoặc được chuyển hóa thành hợp chất có công thức 105 bằng cách thủy phân.

Sơ đồ 5



Sơ đồ 5 bắt đầu từ sản phẩm Stobbe có công thức 102, phản ứng với các chất phản ứng Grignard để tạo thành hợp chất có công thức 501. R_1 và R_2 có thể được chọn từ các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể như heteroalkyl, alkyl, perfluoroalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl và heteroxycloalkyl. Sau khi xử lý bằng bismut triflat trong toluen và sau đó là axetic anhydrua, hai phản ứng đóng vòng xuất hiện lần lượt trong cùng một bình. Phản ứng tạo thành hợp chất có công thức 408, có thể được chuyển hóa vào hợp chất có công thức 105.

Sơ đồ 6



Sơ đồ 6 minh họa các phương pháp chuyển hóa các hợp chất có công thức 105 và 408 vào các thuốc nhuộm đổi màu theo ánh sáng lưỡng sắc. Nếu phản ứng Suzuki được áp dụng, thì nhóm kéo dài được bổ sung sử dụng dẫn xuất boronic có công thức 801, Quy trình tổng hợp có thể tìm thấy trong tài liệu: "Palladium(Q)-Catalyzed Cross-Coupling Reaction of Alkoxyd boron with Haloarenes: A Direct Procedure for Arylboronic Esters, J.Org. Chem. 60, trang 7508-7519, 1995" bởi Miyaura, Norio và các đồng tác giả và các tham khảo ở đây, bộc lộ này đề cập đến các phương pháp tổng hợp được đưa ra đây để tham khảo. Vòng pyran của hợp chất có công thức 603 được tạo thành có ghép đôi với propargyl alcohol có công thức 602. Hợp chất có công thức 803 cũng có thể thu được nếu thứ tự của hai phản ứng này thay đổi. Như được mô tả ở đây, G có thể là -OH hoặc -O-Alkyl; A" có thể được chọn từ nhóm bao gồm aryl, alkenyl, alkynyl và heteroaryl; A" và L' cùng nhau tạo thành nhóm L_1 , L_2 hoặc L_3 ; và mỗi B và B' có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L_3 , hydro, halogen, và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh tùy ý được thể như metaloxenyl, alkyl hoặc perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, heteroalkyl, alkoxy, perfloalkoxy, aryl, heteroaryl, heterocycloalkyl, và xycloalkyl, hoặc trong đó B và B' cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm như xycloalkyl tùy ý được thể và heterocycloalkyl tùy ý được thể.

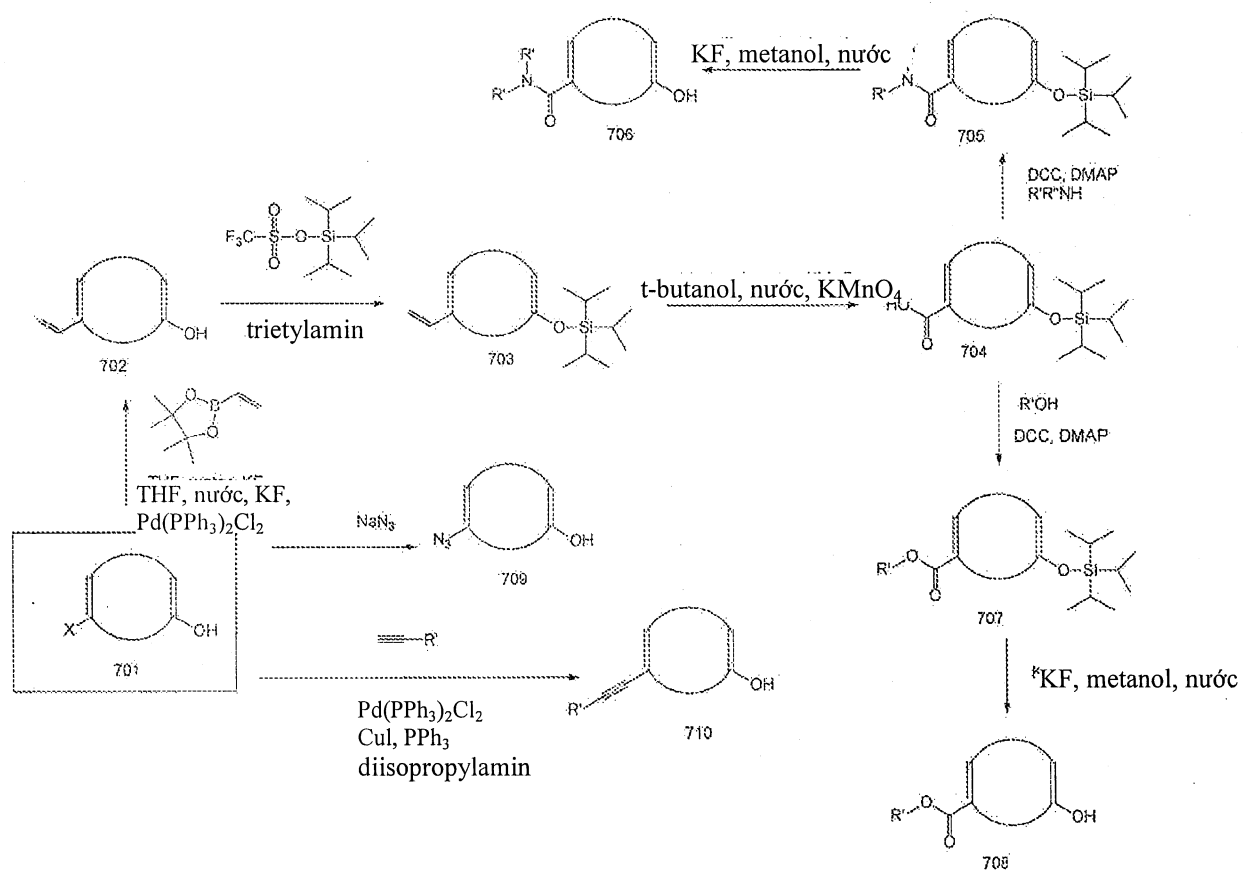
Cũng được thể hiện trong Sơ đồ 6 là cách khác để kết hợp các nhóm kéo dài, halogen X có thể được chuyển hóa vào nhóm chức Q khác để tạo thành hợp chất có công thức 804. Hợp chất có công thức 604 có thể phản ứng với rượu propargyl để tạo

thành thuốc nhuộm pyran có công thức 605, có thể làm thuốc nhuộm đổi màu theo ánh sáng lưỡng sắc hoặc có thể được chuyển hóa thành thuốc nhuộm đổi màu theo ánh sáng lưỡng sắc có Công thức I. Các nhóm chức Q mới này có thể bao gồm:

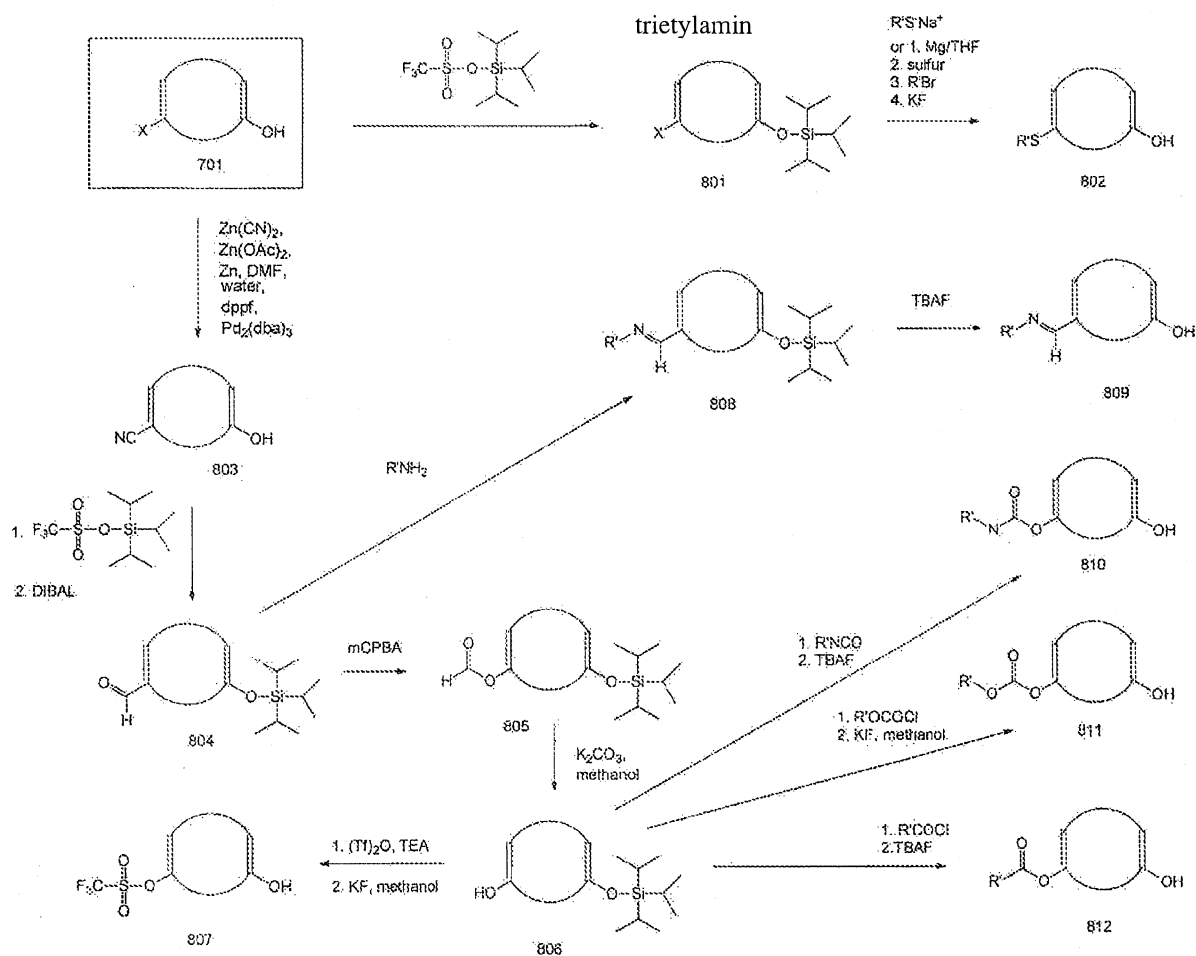
$-N_3$, $-CN$, $-COOR'$, $-CCR^1-CHCHR'$, $-OCOR'$, $-OCOOR'$, $-SR'$, $-OSO_2R'$, $-OR'$, $-OTf$, $-CHO$, $-OCHO$, $-OCONR'$, $-NR'R'$, $-NR'CONR'R'$, $-NR'COR'$, $-NR'COOR'$, $-CHNR'$, và $-CONR'R'$, trong đó R' có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, L, nhóm alkyl không được thế hoặc được thế có từ 1 đến 18 nguyên tử cacbon, nhóm aryl không được thế hoặc được thế, nhóm alken hoặc alkyn không được thế hoặc được thế có từ 2 đến 18 nguyên tử cacbon, nhóm $-CF_3$ và alkyl perflorinat hóa có từ 2 đến 18 nguyên tử cacbon hoặc hai R^1 có thể cùng với $-N$ và tạo thành heteroxycloalkyl như piperazinyl.

Các Sơ đồ 7, 8 và 9 minh họa chi tiết quy trình chuyển hóa halogen thành các nhóm chức khác có thể được chuyển hóa tiếp thành các nhóm kéo dài hoặc bản thân chúng là các nhóm kéo dài. Các phản ứng hóa học được thực hiện ở giai đoạn hydroxy bắt đầu từ hợp chất có công thức 105, được thể hiện dưới dạng hợp chất có công thức 701 trong các Sơ đồ 7 và 8. Mỗi sản phẩm hydroxy của các hợp chất có công thức 702, 706, 708, 709, 710, 802, 803, 807, 809, 810, 811, 812, 901, 903, 904 và 906 có thể được chuyển hóa thành các hợp chất đổi màu theo ánh sáng pyran sử dụng phản ứng hóa học propargyl alcohol được thể hiện trong Sơ đồ 6.

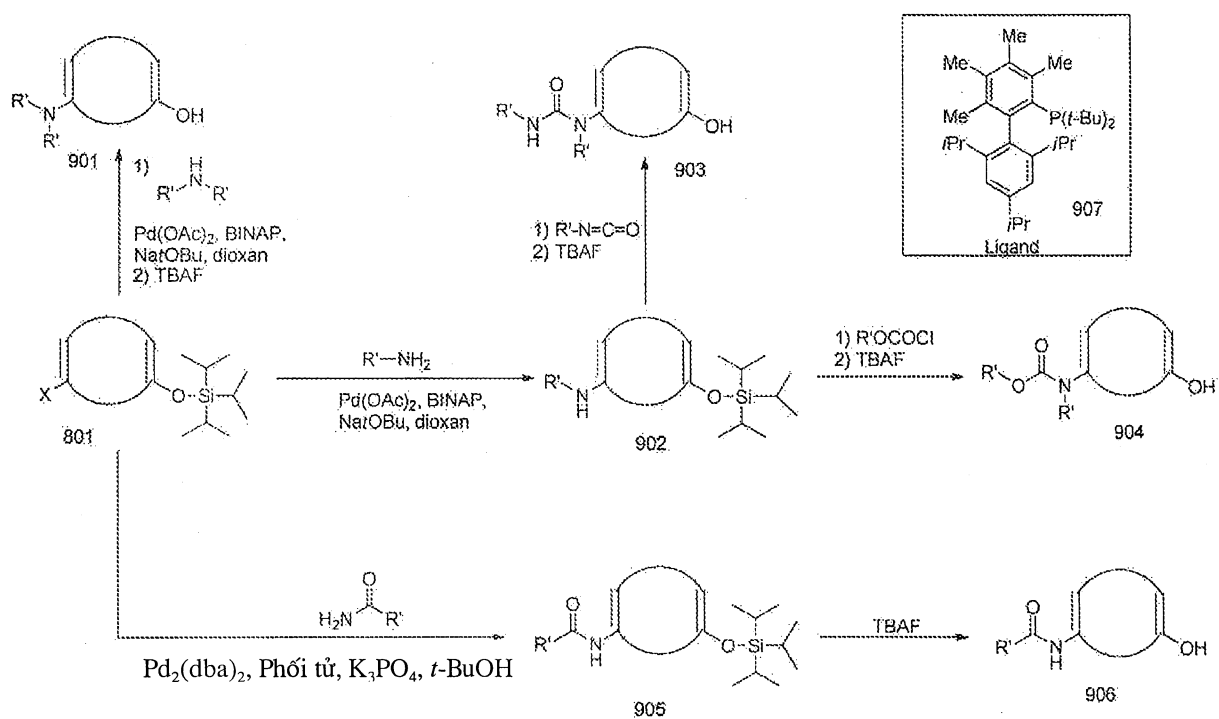
Sơ đồ 7



Sơ đồ 8

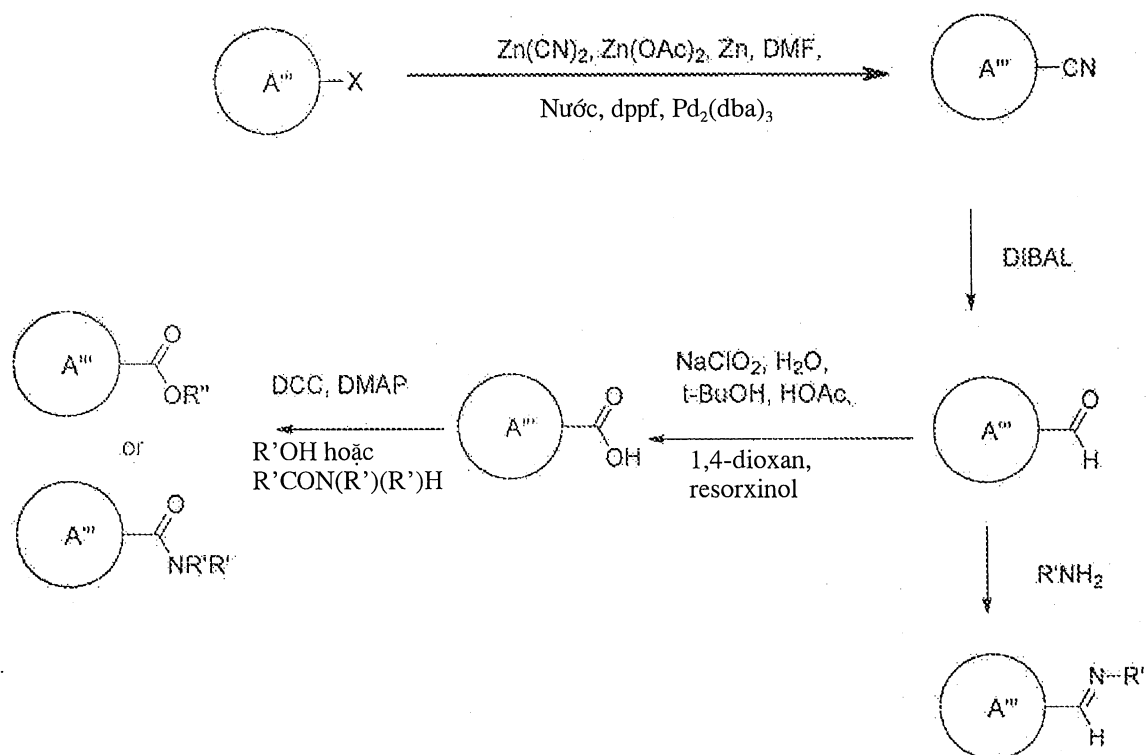


Sơ đồ 9



Sơ đồ 10 thể hiện các phản ứng hóa học có thể được thực hiện trên thuốc nhuộm đổi màu theo ánh sáng lưỡng sắc. A''' là cách thể hiện đơn giản của Công thức I với R₃ hoặc R₄ được chọn từ halogen X. X nằm ở một trong các vị trí mà trong đó R₃ và R₄ có thể định vị. Sơ đồ này có thể được thực hiện từ các Sơ đồ từ 1 đến 9 đối với R₃ và R₄ và các nhóm hệ thống như xyano, aldehyt, axit cacboxylic, và các nhóm đổi ảnh hoặc không đổi ảnh tùy ý được thể được chọn từ imin, alkoxycarbonyl, aminocarbonyl và aryloxy carbonyl để làm R₃ và R₄. Các phương pháp xyanat hóa và oxy hóa đã được mô tả trong Công bố Patent Mỹ số 2009/0309D76A1, trong đó các phương pháp xyanat hóa và oxy hóa này được đưa ra đây để tham khảo.

Sơ đồ 10



Các hợp chất được mô tả ở đây có thể hữu ích để làm các hợp chất và/hoặc các chế phẩm đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây. Các hợp chất này có thể hữu ích trong nhiều ứng dụng khác nhau để tạo thành các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và/hoặc đổi màu theo ánh sáng-lưỡng sắc.

Các chế phẩm đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế có thể bao gồm ít nhất một trong số các hợp chất được mô tả ở đây, và ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng

tùy ý khác. Chế phẩm đổi màu theo ánh sáng có thể được chọn từ các vật liệu khác nhau. Các ví dụ về các vật liệu này có thể được chọn từ:

- (a) hợp chất đổi màu theo ánh sáng đơn;
- (b) hỗn hợp gồm các hợp chất đổi màu theo ánh sáng;
- (c) vật liệu chứa ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng như nhựa polyme hoặc dung dịch monome hữu cơ;
- (d) vật liệu như monome hoặc polyme mà có ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng được liên kết hóa học với;
- (e) vật liệu (c) hoặc (d) còn chứa thêm lớp phủ ngăn chặn hoàn toàn sự tiếp xúc của ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng với các vật liệu bên ngoài;
- (f) polyme đổi màu theo ánh sáng; hoặc
- (g) hỗn hợp của chúng.

Sáng chế còn đề xuất sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa vật liệu hữu cơ và hợp chất /chế phẩm đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế liên kết với ít nhất một phần của vật liệu chủ hữu cơ. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "liên kết với" có nghĩa là liên kết trực tiếp với đối tượng hoặc liên kết gián tiếp với đối tượng thông qua một hoặc nhiều cấu trúc hoặc vật liệu khác, ít nhất một trong số chúng liên kết trực tiếp với đối tượng. Hơn nữa, hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể được liên kết với ít nhất một phần vật chủ bằng cách kết hợp vào vật liệu chủ hoặc bằng cách phủ lên vật liệu chủ, ví dụ, làm một phần của lớp phủ hoặc lớp. Ngoài hợp chất đổi màu theo ánh sáng, chế phẩm đổi màu theo ánh sáng có thể chứa thêm ít nhất một chất phụ gia được chọn từ nhóm bao gồm thuốc nhuộm, chất kích thích định hướng, chất chống oxy hóa, chất phụ gia cải thiện động học, chất khơi mào quang hóa, chất khơi mào nhiệt, chất ức chế polyme hóa, dung môi, chất ổn định quang, ví dụ, các chất hấp thụ ánh sáng tử ngoại và chất ổn định amin bị cản trở, chất ổn định nhiệt, chất giải phóng khuôn, chất kiểm soát độ lưu biến, chất tạo mức, chất tẩy tạp gốc tự do, chất gel hóa và chất cải thiện độ dính.

Các ví dụ về thuốc nhuộm có thể có mặt trong lớp phủ ít nhất một phần theo các phương án khác nhau được bộc lộ ở đây bao gồm thuốc nhuộm hữu cơ có khả năng tạo màu mong muốn hoặc đặc tính quang học khác cho lớp phủ ít nhất một phần.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "chất kích thích định hướng" có nghĩa là chất phụ gia có thể tạo điều kiện ít nhất một tỷ lệ và độ đồng nhất của sự định hướng của vật liệu mà chất này được bổ sung vào.

Các ví dụ về chất thúc đẩy tạo liên kết có thể có mặt trong lớp phủ ít nhất một phần theo các phương án khác nhau được bộc lộ ở đây bao gồm các chất được mô tả trong patent Mỹ số 8,338,808 và Công bố Patent Mỹ số 2002/0039627.

Các chất chống oxy hóa, ví dụ, các chất chống oxy hóa polyphenolic, là các hợp chất organic được sử dụng để làm chậm quá trình oxy hóa. Các ví dụ về các chất chống oxy hóa được mô tả trong patent Mỹ số 4,720,356, 5,391,327 và 5,770,115, các bộc lộ của chúng được đưa ra đây để tham khảo.

Các ví dụ về các chất phụ gia cải thiện động học có thể có mặt trong lớp phủ ít nhất một phần theo các phương án khác nhau được bộc lộ ở đây bao gồm các hợp chất chứa epoxy, các polyol hữu cơ, và/hoặc các chất hóa dẻo. Các ví dụ cụ thể hơn về các chất phụ gia cải thiện động học được bộc lộ trong patent Mỹ số 6,433,043 và Công bố đơn Mỹ số 2003/0045812.

Các ví dụ về các chất khơi mào quang hóa có thể có mặt trong lớp phủ ít nhất một phần theo các phương án khác nhau được bộc lộ ở đây bao gồm các chất khơi mào quang hóa kiểu phân cắt và chất khơi mào quang hóa kiểu chiết. Các ví dụ về các chất khơi mào quang hóa kiểu phân cắt bao gồm các axetophenon, α -aminoalkylphenon, benzoin ete, benzoyl oxim, axylphosphin oxit và bisaxylphosphin oxit hoặc hỗn hợp gồm các chất khơi mào này. Các ví dụ về các chất khơi mào quang hóa có bán trên thị trường là DAROCURE® 4265, của Clba Chemicals, Inc. Các ví dụ về các chất khơi mào quang hóa kiểu chiết bao gồm benzophenon, Michler's keton, thioxanthon, anthraquinon, camphorquinon, fluoron, ketocoumarin hoặc hỗn hợp gồm các chất khơi mào này.

Các Ví dụ khác về các chất khơi mào quang hóa có thể có mặt trong các phương án khác nhau được bộc lộ ở đây các chất khơi mào quang hóa ánh sáng khả kiến. Các ví dụ về chất khơi mào quang hóa ánh sáng khả kiến thích hợp được nêu trong cột 12, dòng 11 đến cột 13, dòng 21 của Patent Mỹ số. 6,602,603.

Các ví dụ về chất khơi mào nhiệt bao gồm các hợp chất peroxy hữu cơ và các hợp chất azobis(organonitril). Các ví dụ cụ thể về các hợp chất peroxy hữu cơ hữu ích để làm chất khơi mào nhiệt bao gồm các peroxymonocacbonat este, như tertiarybutyl

peroxy isopropyl cacbonat; các peroxydicacbonat este, như di(2-ethylhexyl)peroxydicacbonat, di(butyl bậc hai) peroxydicacbonat và diisopropylperoxydicacbonat; các diaxyperoxit, như 2,4-diclobenzoyl peroxit, isobutyryl peroxit, decanoyl peroxit, lauroyl peroxit, propionyl peroxit, axetyl peroxit, benzoyl peroxit và p-clobenzoyl peroxit; các peroxyeste như t-butylperoxy pivalat, t-butylperoxy octylat và t-butylperoxyisobutyrat; metyletylketon peroxit, và axetylxcyclohexan sulfonyl peroxit. Trong một phương án, chất khơi mào nhiệt được sử dụng là các chất không làm mất màu polymerizat tạo thành. Các ví dụ về các hợp chất azobis(organonitril) có thể được sử dụng làm chất khơi mào nhiệt bao gồm azobis(isobutyronitril), azobis(2,4-dimetylvaleronitril) hoặc hỗn hợp của chúng.

Các ví dụ về các chất ức chế polyme hóa bao gồm: nitrobenzen, 1,3,5-trinitrobenzen, p- benzoquinon, cloranil, DPPH, FeCl_3 , CuCl_2 , oxy, lưu huỳnh, anilin, phenol, p-dihydroxybenzen, 1,2,3-trihydroxybenzen, và 2,4,6-trimetylphenol.

Các ví dụ về các dung môi có thể có mặt trong các chế phẩm LC theo các phương án khác nhau được bộc lộ ở đây bao gồm các dung môi sẽ hòa tan các thành phần rắn của các chế phẩm LC, tương hợp với các chế phẩm LC và các thiết bị và nền, và/hoặc có thể đảm bảo bao phủ đồng nhất (các) bề mặt mà chế phẩm LC được phủ. Các dung môi tiềm năng bao gồm các chất dưới đây: propylen glycol monometyl ete axetat và các dẫn xuất của chúng (được bán dưới dạng các dung môi công nghiệp DOWANOL®), axeton, amyl propionat, anisol, benzen, butyl axetat, xyclohexan, các dialkyl ete của etylen glycol, ví dụ, dietylen glycol dimetyl ete và các dẫn xuất của chúng (được bán dưới dạng các dung môi công nghiệp CELLOSOLVE®), dietylen glycol, dibenzoat, dimetyl sulfoxit, dimetyl formamit, dimetoxibenzen, etyl axetat, isopropyl alcohol, metyl xyclohexanon, xyclopentanon, metyl etyl keton, metyl isobutyl keton, metyl propionat, propylen cacbonat, tetrahydrofuran, toluen, xylen, 2-metoxetyl ete, 3-propylen glycol metyl ete, và hỗn hợp của chúng.

Các ví dụ về các chất ổn định nhiệt có thể bao gồm hợp chất chứa nitơ bazơ ví dụ, biure, alantoin hoặc muối kim loại của chúng, axit cacboxylic hydrazit, ví dụ, axit cacboxylic hydrazit béo hoặc thơm, muối kim loại của axit cacboxylic hữu cơ, hợp chất kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ, hydrotalxit, zeolit và hợp chất có tính axit (ví dụ, hợp chất axit boric, hợp chất vòng chứa nitơ có nhóm hydroxyl, hoặc chứa

nhóm cacboxyl, (poly)phenol, hydroxytoluen butylat hóa, và axit aminocacboxylic) hoặc hỗn hợp của chúng.

Các ví dụ về các chất giải phóng khuôn bao gồm các este của các axit béo mạch dài và các alcohol như pentaerythritol, các alcohol guerbet, các keton mạch dài, các siloxan, các alpha-olefin polyme, các alkan mạch dài và các hydrocacbon có từ 15 đến 600 nguyên tử cacbon.

Các chất kiểm soát độ lưu biến là các chất làm đầy là các bột thông thường có thể là các vật liệu vô cơ, như silic oxit, vật liệu hữu cơ như xenluloza vi tinh thể hoặc polyme dạng hạt, Chất gel hóa hoặc các chất tạo gel thường là các vật liệu hữu cơ cũng có thể ảnh hưởng đến tính xúc biến của vật liệu mà chúng được bổ sung vào. Các ví dụ về chất gel hóa hoặc các chất tạo gel thích hợp bao gồm các gôm tự nhiên, tinh bột, pectin, aga-aga, và gelatin. Các chất gel hóa hoặc các chất tạo gel thường có thể dựa trên các polysacarit hoặc protein.

Trong một số phương án, một hoặc nhiều chất hoạt động bề mặt có thể được sử dụng. Các chất hoạt động bề mặt bao gồm các vật liệu đã biết dưới dạng chất làm ướt, các chất chống tạo bọt, các chất nhũ hóa, các chất phân tán, các chất cân bằng và các chất tương tự. Các chất hoạt động bề mặt có thể là anion, cation và không ion, và nhiều chất hoạt động bề mặt thuộc mỗi loại có bán trên thị trường. Các ví dụ về các chất hoạt động bề mặt không ion có thể được sử dụng bao gồm các alkyl phenol etoxyl hóa, như các chất hoạt động bề mặt IGEPAL[®]DM hoặc octyl-phenoxypolyetoxyetanol được bán dưới tên gọi TRITON[®]X-100, axetylen diol như 2,4,7,9-tetrametyl-5-dexyn-4,7-diol được bán dưới tên gọi SURFYNOL[®]104, các axetylenic diol etoxyl hóa, như các chất hoạt động bề mặt SURFYNOL[®]400, các chất hoạt động bề mặt flo, như các chất hoạt động bề mặt flochemical FLUORAD[®], và các chất không ion tốt hơn như octyl phenol etoxylat tốt hơn benzyl được bán dưới tên gọi TRITON[®]CF87, alkyl etoxylat tốt hơn propylen oxit, được bán dưới dạng các chất hoạt động bề mặt PLURAFAC[®]RA, octylphenoxyhexadecyletoxy benzyl ete, polyete được cải biến dimetylpolysiloxan copolyme trong dung môi được bán dưới tên gọi là chất phụ gia BYK[®]-306 của Byk Chemie và hỗn hợp gồm các chất hoạt động bề mặt nêu trên.

Các chất tẩy tạp gốc tự do bao gồm các pseudopeptit tổng hợp kháng thủy phân như Carcinine hydroclorua; các lipoamino axit như L-t sine lauroylmethionin; các dịch chiết cây chứa đa enzym; tocopherol tự nhiên và các hợp chất có liên quan cũng như

các hợp chất chứa hydro hoạt tính như nhóm -OH, -SH, hoặc -NRH. Các ví dụ khác nữa về các chất tẩy tạp gốc tự do được chọn từ các nhóm amin cản trở dẫn hướng (HALS-chất ổn định ánh sáng amin cản trở) mà, không giống như các chất bảo vệ khỏi ánh sáng có bán trên thị trường, các chất này không dựa trên độ hấp thụ của ánh sáng được chiếu hoặc trên sự tắt ánh sáng được hấp thụ, mà dựa trên khả năng ăn hoặc thay thế các gốc tự do và hydroperoxit được tạo thành trong quá trình giảm cấp quang hóa của các vật liệu polyme và các chất chống oxy hóa.

Chất kích thích độ dính bao gồm các vật liệu sifan hữu cơ cải thiện độ dính, như các vật liệu aminoorganosilan, các chất kết đôi silan, các chất kết đôi titanat hữu cơ và các chất kết đôi zirconat hữu cơ được mô tả trong Công bố đơn Patent Mỹ số 2004/0207809 ở các đoạn từ [0033] đến [0042]. Các ví dụ khác nữa về chất kích thích độ dính bao gồm các hợp chất kích thích độ dính zircon-aluminat có bán trên thị trường của Rhone-Poulenc. Việc điều chế các phức chất nhôm-zirconi được mô tả trong các Patent Mỹ số 4,539,048 và 4,539,049. Các patent này mô tả các sản phẩm phản ứng phức chất zirco-aluminat tương ứng với công thức thực nghiệm: $(Al_2(OR_1O)_aA_bB_c)_x(OC(R_2)O)_Y(ZrA_dB_e)_z$ trong đó X, Y, và Z ít nhất là 1, R_2 là nhóm alkyl, alkenyl, aminoalkyl, cacboxyalkyl, mercaptoalkyl, hoặc epoxyalkyl, có từ 2 đến 17 nguyên tử cacbon, và tỷ lệ của X:Z là từ khoảng 2:1 đến khoảng 5:1. Các phức chất zirco-aluminat bổ sung được mô tả trong Patent Mỹ số 4,650,526.

Các ví dụ không nhằm giới hạn về các vật liệu chủ hữu cơ có thể được sử dụng kết hợp với các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây bao gồm các vật liệu tinh thể lỏng và các vật liệu polyme. Các vật liệu tinh thể lỏng có thể được chọn từ các polyme tinh thể lỏng, các tiền polyme tinh thể lỏng và các monome tinh thể lỏng. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "tiền-polyme" có nghĩa là các vật liệu được polyme hóa một phần. Các polyme tinh thể lỏng ("LCPs") là các polyme có khả năng tạo các vùng có cấu trúc trật tự cao trong khi vẫn ở pha lỏng. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "monome tinh thể lỏng" có nghĩa là hợp chất monome có thể thể hiện các đặc tính tinh thể lỏng ở trạng thái monome và/hoặc ở trạng thái polyme. Tức là, monome tinh thể lỏng này tự chúng có thể thể hiện các đặc tính tinh thể lỏng và/hoặc sau khi chúng được kết hợp vào polyme hoặc copolyme để tạo thành polyme tinh thể lỏng (LCP). Các LCP có thể thể hiện ít nhất một pha nematic, pha smetic, pha nematic đối ảnh (tức là, pha cholesteric), pha discotic (bao gồm discotic đối ảnh), pha khối không liên tục, pha lục giác, pha khối song liên tục, pha phân lớp, pha trụ hình lục giác

thuận nghịch, hoặc pha khối ngược. Ngoài ra, trong một số LCPs theo sáng chế, các monome LC hoặc các gốc của chúng có thể chuyển từ pha này sang pha kia, ví dụ, trong tương ứng với năng lượng nhiệt hoặc bức xạ quang hóa.

Các ví dụ về các vật liệu polyme bao gồm các homopolyme và copolyme, được điều chế từ các monome và hỗn hợp gồm các monome được mô tả trong Patent Mỹ số 5,962,617 và trong Patent Mỹ số 5,658,501 từ cột 15, dòng 28 đến cột 16, dòng 17, vật liệu oligomer, vật liệu monome hoặc hỗn hợp hoặc kết hợp của chúng. Các vật liệu polyme có thể là các vật liệu polyme dẻo nhiệt hoặc rắn nhiệt, có thể là trong suốt hoặc trong quang học, và có thể có chỉ số khúc xạ cần thiết bất kỳ. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các monome và polymer được bộc lộ bao gồm: các polyol(aryl cacbonat) monome, ví dụ, các aryl diglycol cacbonat như dietylen glycol bis(aryl cacbonat), monome này được bán dưới nhãn hiệu CR-39 của PPG Industries, Inc.; các polyure-polyuretan (polyure-uretan) polyme, được điều chế, ví dụ, bằng phản ứng của polyuretan prepolymer và chất xử lý diamine, chế phẩm của một polyme này được bán dưới nhãn hiệu TRIVEX bởi PPG industries, Inc.; monome cacbonat kết thúc bằng polyol(met)acryloyl; các monome dietylen glycol dimetacrylat; các monome phenol metacrylat etoxyl hóa; các monome diisopropenyl benzen; các monome isopropylolpropan triacrylat etoxyl hóa; các monome etylen glycol bismetacrylat; các monome poly(etilen glycol) bismetacrylat; các monome uretan acrylat; poly(bisphenol A dimetacrylat etoxyl hóa); poly(vinyl axetat); poly(vinyl alcohol); poly(vinyl clorua); poly(vinyliden clorua); polyetylen; polypropylen; các polyuretan; các polythiouretan; các polycacbonat dẻo nhiệt, như nhựa liên kết cacbonat dẫn xuất từ bisphenol A và phosgen, một vật liệu này được bán dưới nhãn hiệu LEXAN; các polyeste, như vật liệu được bán dưới nhãn hiệu MYLAR; poly(etilen terephtalat); polyvinyl butyral; poly(metyl metacrylat), như vật liệu được bán dưới nhãn hiệu PLEXIGLAS, và các polyme được điều chế bằng cách cho các isoxyanat đa chức phản ứng với các monome polythiol hoặc polyepisulfua, homopolyme hóa hoặc co-và/hoặc terpolyme hóa với các polythiol, polyisoxyanat, polyisothioxyanat và các monome không no etylen hóa tùy ý hoặc các monome thơm chứa vinyl halogen hóa. Cũng dự kiến là các copolyme của các monome này và hỗn hợp của các polyme và copolyme được mô tả với các polyme khác, ví dụ, để tạo thành các copolyme khối hoặc các sản phẩm mạng thẩm thấu. Các vật liệu polyme cũng có thể là các vật liệu tự tổ hợp.

Trong các phương án cụ thể, polyme có thể là copolyme khối hoặc không khối. Trong một số phương án, copolyme khối có thể bao gồm các khối cứng và các khối mềm. Trong các phương án khác, polyme có thể là copolyme không khối (tức là, copolyme không có khối lớn các gốc monome cụ thể), như copolyme ngẫu nhiên, copolyme luân phiên, copolyme tuần hoàn, và copolyme thống kê. Sáng chế này cũng nhắm đến các copolyme phủ của hơn hai loại gốc co-monome khác nhau.

Theo một phương án không nhằm giới hạn cụ thể, vật liệu chủ hữu cơ được chọn từ nhóm bao gồm các potyacrylat, polymetacrylat, poly(C_1 - C_2) alkyl metacrylat, polyoxy(alkylen metacrylat), poly(phenol metacrylat alkoxy hóa), xenluloza axetat, xenluloza triaxetat, xenluloza axetat propionat, xenluloza axetat butyrat, poly(vinyl axetat), poly(vinyl alcohol), poly(vinyl clorua), poly(vinyliden clorua), polyvinylpyrrolidon, poly((met)acrylamit), poly(dimetylacrylamit), poly(hydroxyetyl metacrylat), poly(axit (met)acrylic), polycacbonat dẻo nhiệt, polyeste, polyuretan, polythiouretan, poly(etylen terephthalat), polystyren, poly(alpha metylstyren), copoly(styren-metylmetacrylat), copoly(styren-acrylonitril), polyvinylbutyral và các polyme là thành phần của nhóm bao gồm các monome polyol(alkyl cacbonat), các monome acrylat đơn chức, các monome metacrylat đơn chức, các monome acrylat đa chức, các monome metacrylat đa chức, các monome dietylen glycol dimetacrylat, các monome diisopropenyl benzen, các monome polyhydric alcohol alkoxy hóa và các monome dialylden pentaerythritol.

Theo phương án không nhằm giới hạn cụ thể khác, vật liệu chủ hữu cơ là homopolyme hoặc copolyme của (các) monome được chọn từ nhóm bao gồm các acrylat, metacrylat, metyl metacrylat, etylen glycol bis metacrylat, bisphenol A dimetacrylat etoxyl hóa, vinyl axetat, vinylbutyrat, uretan, thiouretan, dietylen glycol bis(alkyl cacbonat), dietylen glycol dimetacrylat, diisopropenyl benzen, và trimetylol propan triacrylat etoxyl hóa. Các vật liệu polyme này thường bao gồm các vật liệu tinh thể lỏng, các vật liệu tự tổ hợp, polycacbonat, polyamit, polyimide, poly(met)acrylat, polyoxycyclic alken, polyuretan, poly(ure)uretan, polythiouretan, polythio(ure)uretan, polyol(alkyl cacbonat), xenluloza axetat, xenluloza dixetat, xenluloza triaxetat, xenluloza axetat propionat, xenluloza axetat butyrat, polyalken, polyalkylen-vinyl axetat, poly(vinylaxetat), polyvinyl alcohol, poly(vinyl clorua), poly(vinylformal), poly(vinyl(axetal)), poly(vinyliden clorua), poly(etylen terephthalat), polyeste, polysulfon, polyolefin, các copolyme của chúng, và/hoặc hỗn hợp của chúng.

Hơn nữa, theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây, vật liệu chủ hữu cơ có thể tạo thành chi tiết quang học hoặc phần của chúng. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các thiết bị quang học bao gồm các chi tiết liên quan đến mắt, các chi tiết hiển thị, cửa sổ, và gương. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "quang học" có nghĩa là gắn liền với hoặc kết hợp với ánh sáng và/hoặc ánh sáng khả kiến. Ví dụ, mặc dù không giới hạn ở đây, theo các phương án không giới hạn khác nhau, chi tiết hoặc thiết bị quang học có thể được chọn từ các chi tiết và thiết bị liên quan đến mắt, các chi tiết và thiết bị hiển thị, cửa sổ, gương, vật liệu bao gói như băng co, và các chi tiết và thiết bị tế bào tinh thể lỏng hoạt động và thụ động.

Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "liên quan đến mắt" có nghĩa là thuộc về hoặc kết hợp với mắt và thị giác. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các thiết bị bao gồm thấu kính hiệu chỉnh và không-hiệu chỉnh, bao gồm thấu kính tầm nhìn đơn hoặc đa tầm nhìn, có thể là thấu kính đa tầm nhìn phân khúc hoặc không-phân khúc (như, nhưng không giới hạn ở, kính hai tròng, kính ba tròng và thấu kính tiến triển), cũng như các thiết bị khác được sử dụng để hiệu chỉnh, bảo vệ, hoặc cải thiện (để trang điểm hoặc việc khác) thị giác, bao gồm nhưng không giới hạn ở, kính áp tròng, kính trong mắt, kính lúp, và kính hoặc tấm che mặt bảo vệ. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "hiển thị" có nghĩa là sự thể hiện có thể nhìn được hoặc đọc được bằng máy các thông tin bằng từ ngữ, số, ký hiệu, cách trình bày hoặc hình vẽ. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các chi tiết và thiết bị hiển thị bao gồm màn hình, monitor, và chi tiết an toàn, bao gồm nhưng không giới hạn ở, các dấu bảo đảm và dấu xác nhận. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "cửa sổ" có nghĩa là lỗ mở cho phép tia sáng truyền qua. Các ví dụ không nhằm giới hạn về cửa sổ bao gồm các vật trong suốt trong máy bay và ô tô, bộ lọc, các lá chắn sáng, và thiết bị chuyển mạch quang học. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "gương" có nghĩa là bề mặt phản chiếu phần lớn ánh sáng tới.

Ví dụ, vật liệu chủ hữu cơ có thể là chi tiết liên quan đến mắt, và cụ thể hơn, là kính mắt.

Hơn nữa, dự kiến là các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng hữu cơ bổ sung khác có ít nhất một trong các trị số hấp thụ hoạt hóa cực đại nằm trong khoảng từ 300 nm đến 1000 nm, bao gồm cả giới hạn (hoặc các chất chứa chúng). Ví dụ, hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây có thể được kết hợp với ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng hữu cơ thông thường khác sao cho sự

kết hợp của hợp chất đổi màu theo ánh sáng, khi được hoạt hóa, thể hiện màu sắc mong muốn. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các hợp chất đổi màu theo ánh sáng hữu cơ thông thường thích hợp bao gồm các pyran, oxazin, các fulgit và fulgimit được mô tả sau đây.

Các ví dụ không nhằm giới hạn về các pyran đổi màu theo ánh sáng bổ sung thuận nghịch nhiệt bao gồm các benzopyran, naphthopyran, ví dụ, naphtho[1,2-b]pyran, naphtho[2,1-b]pyran, các naphthopyran ngưng tụ indeno, như được bộc lộ trong Patent Mỹ số 5,645,767, và các naphthopyran ngưng tụ heterocyclic, như được bộc lộ trong các Patent Mỹ số 5,723,072, 5,698,141, 6,153,126, và 6,022,497, được đưa ra đây để tham khảo cho các bộc lộ về các naphthopyran; spiro-9-floreno[1,2-b]pyran; phenanthropyran; quinopyran; floanthenopyran; spiropyran, ví dụ, spiro(benzindolin)naphthopyran, spiro(indolin)benzopyran, spiro(indolin)naphthopyran, spiro(indolin)quinopyran và spiro(indolin)pyran. Các ví dụ cụ thể hơn về các naphthopyran và các chất đổi màu theo ánh sáng hữu cơ bổ sung được mô tả trong Patent Mỹ số 5,658,501, các bộc lộ của chúng được đưa ra cụ thể ra đây để tham khảo. Spiro(indolin)pyran cũng được mô tả trong tài liệu, Techniques in Chemistry, Volume III, "Photochromism", Chapter 3, Glenn H. Brown, Editor, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1971, bộc lộ của chúng được đưa ra đây để tham khảo.

Các ví dụ không nhằm giới hạn về các oxazin đổi màu theo ánh sáng bổ sung thuận nghịch nhiệt bao gồm các benzoxazin, naphtoxazin, và spiro-oxazin, ví dụ, spiro(indolin)naphtoxazin, spiro(indolin)pyridobenzoxazin, spiro(benzindolin)-pyridobenzoxazin, spiro(benzindolin)naphtoxazin, spiro(indolin)benzoxazin, spiro(indolin)floranthenoxazin, và spiro(indolin)quinoxazin.

Các ví dụ không nhằm giới hạn khác nữa về các fulgit đổi màu theo ánh sáng bổ sung thuận nghịch nhiệt bao gồm: các fulgimit, và 3-furyl và 3-thienyl fulgit và fuigimit, được bộc lộ trong Patent Mỹ số 4,931,220 (trong đó bộc lộ về các fuigimit được đưa ra cụ thể ra đây để tham khảo) và hỗn hợp gồm các vật liệu/các hợp chất đổi màu theo ánh sáng bất kỳ nêu trên.

Ví dụ, dự kiến là các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với hợp chất đổi màu theo ánh sáng hữu cơ thông thường khác (như được mô tả ở trên), với lượng hoặc tỷ lệ sao cho vật liệu chủ hữu cơ mà các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được kết hợp vào, hoặc trên đó các vật

liệu chủ hữu cơ được phủ, có thể thể hiện màu hoặc các màu mong muốn, ở trạng thái hoạt động hoặc "tắt trắng". Lượng các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được sử dụng này không được giới hạn với điều kiện là lượng thích hợp có mặt để tạo ra hiệu quả đổi màu theo ánh sáng mong muốn. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "lượng đổi màu theo ánh sáng" dùng để chỉ lượng hợp chất đổi màu theo ánh sáng cần thiết để tạo ra hiệu quả đổi màu theo ánh sáng mong muốn.

Sáng chế cũng đề xuất sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa nền, và lớp phủ ít nhất một phần của chế phẩm phủ có lượng đổi màu theo ánh sáng của hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế liên kết với ít nhất một phần của ít nhất một bề mặt của nền. Hơn nữa, mặc dù không giới hạn ở đây, ít nhất một phần của lớp phủ ít nhất một phần có thể được cố định ít nhất một phần. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "cố định" có nghĩa là cố định trong định hướng mong muốn.

Ví dụ, theo phương án không nhằm giới hạn nêu trên, chế phẩm phủ có thể được chọn từ nhóm bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các chế phẩm phủ polyme, sơn, và mực. Hơn nữa, ngoài các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây, các chế phẩm phủ theo các phương án không giới hạn khác nhau có thể bao gồm thêm ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng hữu cơ thông thường khác có ít nhất một trị số hấp thụ hoạt hóa cực đại nằm trong khoảng từ 300 nm đến 1000 nm, bao gồm cả giới hạn.

Các ví dụ không nhằm giới hạn về các nền thích hợp mà các chế phẩm phủ chứa lượng đổi màu theo ánh sáng của các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể được phủ lên đó bao gồm thủy tinh, công trình nề, vải, gốm, kim loại, gỗ, giấy và các vật liệu hữu cơ polyme. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các vật liệu hữu cơ polyme thích hợp là như nêu trên.

Đề xuất tiếp theo là các thiết bị quang học chứa nền và lớp phủ ít nhất một phần chứa ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế liên kết với ít nhất một phần của nền. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các chi tiết quang học bao gồm, các chi tiết liên quan đến mắt, các chi tiết hiển thị, cửa sổ, và gương. Ví dụ, chi tiết quang học có thể là chi tiết liên quan đến mắt, và nền có thể là nền liên quan đến mắt được chọn từ nhóm bao gồm thấu kính hiệu chỉnh và không-hiệu chỉnh, thấu kính được tạo thành một phần, và thấu kính trống.

Mặc dù không giới hạn ở đây, các chi tiết quang học có thể bao gồm lượng hợp chất đổi màu theo ánh sáng bất kỳ cần để đạt được các đặc tính quang học mong muốn, như nhưng không giới hạn ở, các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và các đặc tính lưỡng sắc.

Các ví dụ khác không nhằm giới hạn về các nền thích hợp để sử dụng kết hợp với phương án không nhằm giới hạn nêu trên bao gồm các nền không nhuộm màu, nền nhuộm màu, nền đổi màu theo ánh sáng, nền nhuộm màu-đổi màu theo ánh sáng, nền phân cực tuyến tính, nền phân cực vòng tròn, nền phân cực hình elip, nền phản xạ, và nền dạng tấm lượn sóng hoặc làm chậm, ví dụ, tấm lượn sóng phân tử và tấm lượn sóng một nửa. Như được sử dụng ở đây, tham chiếu đến các nền, thuật ngữ "không nhuộm màu" có nghĩa là các nền cần phải không bổ sung các chất phụ gia tạo màu (như, nhưng không giới hạn ở, các thuốc nhuộm thông thường) và có phổ hấp thụ với bức xạ khả kiến không đáng kể trong tương ứng với bức xạ quang hóa. Hơn nữa, tham chiếu đến các nền, thuật ngữ "nhuộm màu" có nghĩa là các nền có bổ sung các chất phụ gia tạo màu (như, nhưng không giới hạn ở, các thuốc nhuộm thông thường) và phổ hấp thụ với bức xạ khả kiến không đáng kể trong tương ứng với bức xạ quang hóa.

Như được sử dụng ở đây thuật ngữ phân cực tuyến tính" tham chiếu đến các nền dùng để chỉ các nền có thể thích hợp với bức xạ phân cực tuyến tính (tức là, giữ các dao động của vectơ điện của các sóng ánh sáng theo một hướng). Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "phân cực vòng tròn" tham chiếu đến các nền dùng để chỉ các nền có thể thích hợp với bức xạ phân cực vòng tròn. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "phân cực hình elip" tham chiếu đến các nền dùng để chỉ các nền có thể thích hợp với bức xạ phân cực hình elip. Như được sử dụng ở đây với thuật ngữ "đổi màu theo ánh sáng" tham chiếu đến các nền dùng để chỉ các nền có phổ hấp thụ với bức xạ khả kiến thay đổi trong tương ứng với ít nhất là bức xạ quang hóa và thuận nghịch nhiệt. Hơn nữa, như được sử dụng ở đây tham chiếu đến các nền, thuật ngữ "nhuộm màu-đổi màu theo ánh sáng" có nghĩa là các nền chứa chất phụ gia tạo màu cũng như hợp chất đổi màu theo ánh sáng, và có phổ hấp thụ với bức xạ khả kiến thay đổi trong tương ứng với ít nhất là bức xạ quang hóa và thuận nghịch nhiệt. Vì vậy ví dụ, nền nhuộm màu-đổi màu theo ánh sáng có thể có tính chất màu thứ nhất của chất tạo màu và tính chất màu thứ hai của kết hợp của chất tạo màu và hợp chất đổi màu theo ánh sáng khi bộc lộ ra bức xạ quang hóa.

Sáng chế cũng đề cập đến chi tiết quang học chứa nền và lớp phủ ít nhất một phần chứa ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế liên kết với ít nhất một phần của nền. Hơn nữa, ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng thuận nghịch nhiệt có thể là hợp chất đổi màu theo ánh sáng-luồng sắc có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 1,5 ở trạng thái hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD.

Như được mô tả ở trên, các chi tiết quang học theo sáng chế có thể là các chi tiết hiển thị, như, nhưng không giới hạn ở màn hình, monitor, và các chi tiết an toàn. Ví dụ, chi tiết quang học có thể là chi tiết hiển thị chứa nền thứ nhất có bề mặt thứ nhất, nền thứ hai có bề mặt thứ hai, trong đó bề mặt thứ hai của nền thứ hai đối diện và cách bề mặt thứ nhất của nền thứ nhất sao cho tạo ra một kẽ hở; và vật liệu lỏng chứa ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế được đưa vào trong kẽ hở được xác định bởi bề mặt thứ nhất của nền thứ nhất và bề mặt thứ hai của nền thứ hai. Hơn nữa, ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể là hợp chất đổi màu theo ánh sáng-luồng sắc có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 1,5 ở trạng thái hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD,

Hơn nữa, theo phương án không nhằm giới hạn này, các nền thứ nhất và thứ hai này có thể độc lập được chọn từ nhóm bao gồm các nền không nhuộm màu, các nền nhuộm màu, các nền đổi màu theo ánh sáng, các nền nhuộm màu-đổi màu theo ánh sáng, các nền phân cực tuyến tính, các nền phân cực vòng tròn, các nền phân cực hình elip và các nền phản xạ và các nền làm chậm.

Sáng chế cũng đề xuất chi tiết an toàn chứa nền và ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế liên kết với ít nhất một phần của nền. Các ví dụ không nhằm giới hạn về các thiết bị an toàn bao gồm các dấu bảo đảm và dấu xác nhận liên kết với ít nhất một phần của nền, như và không giới hạn ở: thẻ truy cập và thông qua, ví dụ, vé, huy hiệu, thẻ căn cước hoặc thẻ thành viên, thẻ ghi nợ, và các thiết bị tương tự; thương phiếu và chứng từ không thương lượng ví dụ, ngân phiếu, séc, hợp đồng, bản ghi nhớ, chứng chỉ tiền gửi, cổ phiếu, và các chứng từ, thương phiếu tương tự; các tài liệu của chính phủ, ví dụ, tiền tệ, giấy phép, chứng minh thư, thẻ phúc lợi, visa, hộ chiếu, các giấy chứng nhận của nhà nước, chứng thư và các tài liệu tương tự; các sản phẩm tiêu dùng, ví dụ, phần mềm, đĩa compact ("đĩa CD"), đĩa video kỹ thuật số ("đĩa DVD"), đồ gia dụng, các thiết bị điện tử tiêu dùng, các sản phẩm thể thao, ô tô, và các sản phẩm tương tự; các thẻ tín dụng; và thẻ hàng hóa, nhãn hàng và bao bì.

Mặc dù không giới hạn ở đây, chi tiết an toàn có thể được liên kết với ít nhất một phần nền được chọn từ nhóm bao gồm nền trong suốt và nền phản xạ. Theo cách khác, trong đó nền phản xạ là được yêu cầu, nếu nền này không phản xạ hoặc phản xạ không đầy đủ cho ứng dụng dự kiến, thì vật liệu phản xạ có thể được phủ trước hết lên ít nhất một phần nền trước khi dấu an toàn được phủ lên đó. Ví dụ, lớp phủ nhôm phản xạ có thể được phủ lên ít nhất một phần nền trước khi tạo chi tiết an toàn trên đó. Hơn nữa, chi tiết an toàn có thể được liên kết với ít nhất một phần nền được chọn từ nhóm bao gồm các nền không nhuộm màu, các nền nhuộm màu, các nền đổi màu theo ánh sáng, các nền nhuộm màu-đổi màu theo ánh sáng, các nền phân cực tuyến tính, phân cực vòng tròn, và các nền phân cực hình elip.

Ngoài ra, ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể là hợp chất đổi màu theo ánh sáng-luồng sắc thuận nghịch nhiệt có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 1,5 ở trạng thái hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD.

Hơn nữa, chi tiết an toàn nêu trên có thể bao gồm thêm một hoặc nhiều lớp hoặc tấm phủ khác để tạo thành chi tiết an toàn phản xạ đa lớp với các tính chất phụ thuộc góc nhìn như được mô tả trong Patent Mỹ số 6,641,874, bộc lộ này đề cập đến màng đa phản xạ được đưa cụ thể ra đây để tham khảo.

Các sản phẩm đổi màu theo ánh sáng và các chi tiết quang học được mô tả ở trên có thể được tạo thành bằng các phương pháp đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này. Mặc dù không giới hạn ở đây, dự kiến rằng các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây có thể được liên kết với nền hoặc vật chủ bằng cách kết hợp vào vật liệu chủ hoặc phủ lên vật chủ hoặc nền, như tạo thành lớp phủ.

Ví dụ, hợp chất đổi màu theo ánh sáng-luồng sắc có thể được kết hợp vào vật liệu chủ hữu cơ bằng cách hòa tan hoặc phân tán hợp chất đổi màu theo ánh sáng trong vật liệu chủ, ví dụ, đúc tại chỗ bằng cách bổ sung hợp chất đổi màu theo ánh sáng vào vật liệu chủ monome trước khi polyme hóa, hấp thụ hợp chất đổi màu theo ánh sáng vào vật liệu chủ bằng cách nhúng vật liệu chủ trong dung dịch nóng chứa hợp chất đổi màu theo ánh sáng hoặc bằng cách truyền nhiệt. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "hấp thụ" bao gồm phương pháp thẩm hợp chất đổi màu theo ánh sáng một mình vào vật liệu chủ, dung môi hỗ trợ chuyển hợp chất đổi màu theo ánh sáng vào polyme xốp, chuyển pha hơi, và các phương pháp chuyển khác.

Ngoài ra, hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây có thể được phủ lên vật liệu chủ hữu cơ hoặc nền khác như là một phần của chế phẩm phủ (như được mô tả ở trên) hoặc tấm chứa hợp chất đổi màu theo ánh sáng. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "lớp phủ" có nghĩa là màng đỡ dẫn xuất từ chế phẩm có thể chảy được, có thể có hoặc không có độ dày đồng nhất. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ "tấm" có nghĩa là màng được tạo trước có độ dày nói chung là đồng nhất và có khả năng tự nâng đỡ, trong trường hợp các chất hấp thụ ánh sáng tử ngoại có thể được trộn với các vật liệu đổi màu theo ánh sáng trước khi chúng được bổ sung vào lớp phủ hoặc tấm hoặc các chất hấp thụ này có thể được chồng lên, ví dụ, đặt lên trên cùng, làm lớp phủ hoặc màng giữa sản phẩm đổi màu theo ánh sáng và ánh sáng tới.

Các phương pháp không nhằm giới hạn phủ các chế phẩm phủ chứa các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây bao gồm các phương pháp đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này để phủ lớp phủ, như, phủ quay, phủ phun, phủ phun và quay, phủ màng che, phủ chảy, phủ nhúng, đúc phun, đúc, phủ cuộn, phủ lưới, và đúc trên. Lớp phủ chứa hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể được phủ lên khuôn nền có thể được tạo thành bên trên lớp phủ (tức là, đúc trên). Ngoài ra hoặc theo cách khác, chế phẩm phủ không chứa hợp chất đổi màu theo ánh sáng trước tiên có thể được phủ lên nền hoặc vật liệu chủ hữu cơ sử dụng kỹ thuật bất kỳ nêu trên và sau đó hấp thụ bằng hợp chất đổi màu theo ánh sáng như được mô tả ở trên.

Các ví dụ không nhằm giới hạn về các chế phẩm phủ chứa các polyme tạo màng có thể bao gồm các vật liệu đổi màu theo ánh sáng như sau: các lớp phủ tinh thể lỏng đổi màu theo ánh sáng/lưỡng sắc, như được mô tả trong Patent Mỹ số 7,256,921 từ cột 2, dòng 60 đến cột 94, dòng 23; các lớp phủ polyuretan đổi màu theo ánh sáng, như được mô tả trong Patent Mỹ số 6,187,444 từ cột 3, dòng 4 đến cột 12, dòng 15; các lớp phủ nhựa aminoplast đổi màu theo ánh sáng, như được mô tả trong các Patent Mỹ số 8,432,544 từ cột 2, dòng 52 đến cột 14, dòng 5 và 6,506,488 từ cột 2, dòng 43 đến cột 12, dòng 23; các lớp phủ polysiloxan đổi màu theo ánh sáng, như được mô tả trong Patent Mỹ số 4,556,605 từ cột 2, dòng 15 đến cột 7, dòng 27; các lớp phủ poly(met)acrylat đổi màu theo ánh sáng, như được mô tả trong các Patent Mỹ số 6,602,603 từ cột 3, dòng 15 đến cột 7, dòng 50, 6,150,430 từ cột 8, các dòng 15-38, và 6,025,026 từ cột 8, dòng 66 đến cột 10, dòng 32; các lớp phủ polyanhydrua đổi màu theo ánh sáng, như được mô tả trong Patent Mỹ số 6,436,525 từ cột 2, dòng 52 đến cột 11, dòng 60; các lớp phủ polyacrylamit đổi màu theo ánh sáng như được mô tả trong

Patent Mỹ số 6,060,001 từ cột 2, dòng 6 đến cột 5, dòng 40; các lớp phủ nhựa epoxy đổi màu theo ánh sáng, như được mô tả trong các Patent Mỹ số 6,268,055 từ cột 2, dòng 63 đến cột 15, dòng 2; và các lớp phủ poly(ure-uretan) đổi màu theo ánh sáng, như được mô tả trong Patent Mỹ số 6,531,076 từ cột 2, dòng 60 đến cột 10, dòng 49.

Các phương pháp không nhằm giới hạn để phủ các tấm chứa hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây lên nền bao gồm, ví dụ, ít nhất một: cán tạo lớp, nung chảy, đúc trong khuôn, và liên kết bám dính tấm polyme lên ít nhất một phần nền. Như được sử dụng ở đây, phương pháp đúc trong khuôn bao gồm các kỹ thuật đúc khác nhau, như nhưng không giới hạn ở: đúc trên, trong đó tấm này được đặt vào khuôn và nền được tạo thành (ví dụ bằng cách đúc) trên ít nhất một phần của nền; và đúc phun, trong đó nền được tạo thành xung quanh tấm này. Hơn nữa, dự kiến rằng hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể được phủ lên tấm này để làm lớp phủ, được kết hợp vào tấm này bằng cách hấp thụ hoặc bằng các phương pháp thích hợp khác, trước khi phủ tấm này lên nền hoặc sau đó.

Tấm polyme có thể bao gồm chế phẩm polyme là chế phẩm bất kỳ trong số khoảng rộng các polyme, bao gồm cả các polyme rắn nhiệt và các polyme dẻo nhiệt. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "polyme" được dự định bao gồm cả các polyme và oligome, cũng như cả các homopolyme và copolyme. Các polyme này có thể bao gồm, ví dụ, các acrylic polyme, polyester polyme, polyuretan polyme, poly(ure)uretan polyme, polyamin polyme, polyepoxit polyme, polyamit polyme, polyete polyme, polysiloxan polyme, polysulfua polyme, copolyme của chúng, và hỗn hợp của chúng. Nói chung các polyme này có thể là polyme bất kỳ trong số các loại được sản xuất bằng phương pháp bất kỳ đã biết bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này.

Các polyme được sử dụng để tạo thành tấm polyme cũng có thể chứa các nhóm chức bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các nhóm axit cacboxylic, các nhóm amin, các nhóm epoxit, các nhóm hydroxyl, các nhóm thiol, các nhóm cacbamat, các nhóm amit, các nhóm ure, các nhóm isoxyanat (bao gồm các nhóm isoxyanat bị khóa), các nhóm mercaptan, các nhóm có etylen không no (ví dụ, các nhóm acrylat), các nhóm vinyl, và kết hợp của chúng. Các hỗn hợp thích hợp gồm các nhựa tạo màng cũng có thể được sử dụng trong sản xuất các chế phẩm phủ. Nếu chế phẩm polyme từ đó tấm polyme được tạo thành bao gồm các polyme chứa nhóm chức (như các polyme chứa nhóm chức bất kỳ đã nêu trên), chế phẩm polyme có thể bao gồm thêm vật liệu chứa các

nhóm chức phản ứng với các nhóm chức của polyme này. Phản ứng có thể được làm dễ dàng, ví dụ, bằng các kỹ thuật nhiệt, khởi đầu quang học, oxy hóa, và/hoặc xử lý bằng bức xạ. Cũng dự kiến là hỗn hợp gồm các polyme bất kỳ nêu trên.

Các ví dụ không nhằm giới hạn khác nữa về các polyme thích hợp để sử dụng để tạo thành tấm polyme theo sáng chế là các copolyme khối dẻo nhiệt chứa polyalkyl(met)acrylat và polyamit được mô tả trong Đơn Patent Mỹ đã công bố số 2004/0068071 A1 tại các đoạn [0020] - [0042]; và Patent Mỹ số 6,096,375 từ cột 18, dòng 8 đến cột 19, dòng 5

Trong phương án cụ thể theo sáng chế, tấm polyme bao gồm polyme đàn hồi, ví dụ các polyme đàn hồi dẻo nhiệt. Như được sử dụng ở đây, "polyme đàn hồi" có nghĩa là polyme có mức co giãn và đàn hồi cao sao cho có khả năng biến dạng hoặc kéo dài có thể thuận nghịch ít nhất một phần. Trong một số ví dụ, khi được kéo căng, các phân tử của chất đàn hồi được liên kết và có thể sắp xếp tinh thể; và khi giải phóng, chất đàn hồi có thể, trong một số trường hợp, trở về trạng thái rối loạn ban đầu. Với mục đích của sáng chế, các polyme đàn hồi có thể bao gồm các polyme dẻo nhiệt, dẻo nhiệt đàn hồi, và rắn nhiệt với điều kiện các polyme này nằm trong phần mô tả nêu trên cho "polyme đàn hồi".

Polyme đàn hồi có thể bao gồm chất bất kỳ trong số khoảng rộng các chất đàn hồi đã biết bao gồm nhưng không giới hạn ở các copolyme trong số các polyme nêu trên. Trong một phương án theo sáng chế, polyme đàn hồi có thể bao gồm copolyme có liên kết ete và/hoặc este trong khung polyme. Các ví dụ về các copolyme khối thích hợp có thể bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các copolyme khối poly(amit-ete), các copolyme khối poly(este-ete), các copolyme khối poly(ete-uretan), các copolyme khối poly(este- uretan), và/hoặc các copolyme khối poly(ete- ure). Các ví dụ cụ thể thích hợp về các polyme đàn hồi có thể bao gồm, nhưng không giới hạn ở, các chất có bán trên thị trường với tên thương mại là DESMOPAN[®] và TEXIN[®] của Bayer Material Science; ARNITEL[®] của Royal DSM; và PEBAX[®] của Atofina Chemicals hoặc Cordis Corporation.

Hơn nữa, như được mô tả ở trên, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng được bộc lộ ở đây có thể được kết hợp hoặc được phủ một mình, hoặc kết hợp với ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng hữu cơ thông thường khác, hợp chất này cũng có thể được phủ hoặc được kết hợp vào các vật liệu chủ và các nền như được mô tả ở trên.

Các lớp phủ bổ sung có thể được phủ lên sản phẩm đổi màu theo ánh sáng bao gồm các lớp phủ đổi màu theo ánh sáng khác, các lớp phủ chống-phản xạ, các lớp phủ phân cực tuyến tính, các lớp phủ chuyển tiếp, các lớp phủ lót, các lớp phủ dính, các lớp phủ phản chiếu và các lớp phủ bảo vệ bao gồm các lớp phủ chống đọng sương, các lớp phủ chống oxy và các lớp phủ hấp thụ ánh sáng tử ngoại.

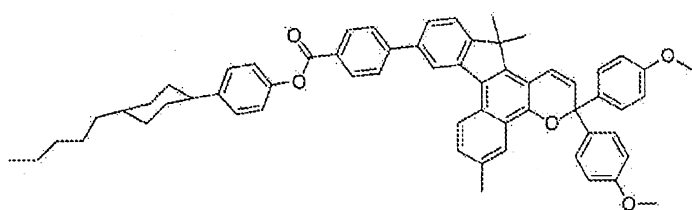
Các phương án được mô tả ở đây được minh họa tiếp bằng các ví dụ không nhằm giới hạn dưới đây.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Phần 1 mô tả việc điều chế các Ví dụ từ 1 đến 34. Phần 2 mô tả thử nghiệm các đặc tính đổi màu theo ánh sáng của các Ví dụ. Phần 3 mô tả thử nghiệm các đặc tính lưỡng sắc của các Ví dụ.

Phần 1 - Điều chế các Ví dụ 1-34

Ví dụ 1



Bước 1

3-brom-4'-methylbenzophenon (50 g), dimetyl succinat (34,5 g) và toluen (1 lít (L)) được bổ sung vào bình phản ứng được lắp máy khuấy cơ học, phễu bổ sung chất rắn và lớp phủ nitơ. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng cho đến khi các chất rắn được hòa tan. Kali t-butoxit rắn (22,4 g) được bổ sung qua phễu bổ sung chất rắn và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 4 giờ. Hỗn hợp phản ứng tạo thành được rót vào 1 L nước và lớp nước, chứa sản phẩm này, được thu gom. Lớp toluen được chiết bằng 200 ml nước. Dung dịch nước kết hợp này được rửa bằng toluen. HCl (2 N, 20 mL) được bổ sung vào dung dịch nước này. Dầu màu vàng được kết tủa. Hỗn hợp tạo thành được chiết bằng etyl axetat, được làm khô trên magie sulfat, được cô và làm khô trong chân không. Thu được dầu dạng thủy tinh màu vàng (55 g) làm sản phẩm. Sản phẩm này được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 2

Hỗn hợp gồm các sản phẩm axit Stobbe từ Bước 1 (55 g) và axetic anhydrua (300 mL) được trộn và được hồi lưu trong bình phản ứng được lắp thiết bị ngưng tụ. Sau một giờ, axetic anhydrua được loại bỏ bằng cách làm bay hơi trong chân không và dầu thu được 55 gam làm sản phẩm. Sản phẩm này được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 3

Bổ sung metanol (300 mL) và HCl (12 N, 1 ml) vào bình phản ứng chứa 55 gam dầu thu được từ Bước 2. Hỗn hợp này được hồi lưu trong bốn giờ. Metanol được loại bỏ bằng cách làm bay hơi trong chân không. Dầu thu hồi được hòa tan trong metylen clorua, được rửa bằng nước bão hòa natri bicacbonat, được làm khô trên magie sulfat, được cô và làm khô trong chân không. Dầu tạo thành (51 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 4

Sản phẩm (51 g) từ Bước 3 được hòa tan trong 500 ml THF khan trong bình được làm khô trong lò được lắp phễu nhỏ giọt và que khuấy từ. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và dung dịch metyl magie bromua 1,6 M trong toluen/THF (1:1) được bổ sung nhỏ giọt. Sau khi bổ sung, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong khoảng 16 giờ. Sau đó hỗn hợp phản ứng được rót vào 2 L nước đá. Độ pH của hỗn hợp này được điều chỉnh đến ~2 sử dụng HCl (12 N). Etyl axetat (500 mL) được bổ sung. Lớp hữu cơ tạo thành được tách, được làm khô trên magie sulfat, được cô và làm khô trong chân không. Sản phẩm thu hồi (50 g dầu) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 5

Sản phẩm từ Bước 4 (50 g) và xylen (300 ml) được bổ sung vào bình phản ứng được lắp que khuấy từ. Axit p-toluensulfonic (1 g) được bổ sung và hỗn hợp tạo thành được hồi lưu trong tám giờ. Xylen được loại bỏ bằng cách làm bay hơi trong chân không và sản phẩm dạng dầu tạo thành được hòa tan trong etyl axetat, được rửa bằng nước, được làm khô trên magie sulfat và được cô. Một phần nhỏ của sản phẩm (50 g dầu) chứa bốn naphthol chất đồng phân. Sản phẩm này (1,8 g) được tinh chế sử dụng CombiFlash[®] Rf của Teledyne ISCO. Sau khi tách, thu được bốn phân đoạn theo nhóm, phân tích NMR thể hiện các sản phẩm này có các cấu trúc phù hợp với: 8-brom-

3,7,7-trimetyl-7H-benzo[c]fluoren-8-ol (0,32 g); 4-brom-7,7,9-trimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol (0,08 g); và hỗn hợp (0,36 g) gồm 10-brom-3,7,7-trimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol (chất đồng phân mong muốn, bằng 55 % trọng lượng của hỗn hợp này) và 2-brom-7,7,9-trimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol (chất đồng phân không mong muốn bằng 45 % trọng lượng của hỗn hợp này).

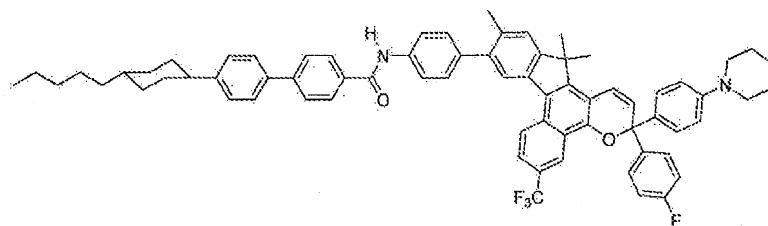
Bước 6

Hỗn hợp các naphtol từ Bước 5, (0,36 g) gồm 10-brom-3,7,7-trimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol và 2-brom-7,7,9-trimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol được cho vào bình phản ứng. Bổ sung 0,27 gam 1,1-bis(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol, vài tinh thể axit p-toluensulfonic và metylen clorua (10 ml) vào bình này. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 18 giờ. Sự tạo thành thuốc nhuộm màu xanh dương và thuốc nhuộm màu tím được quan sát từ TLC. Sản phẩm này được tinh chế sử dụng a CombiFlash® Rf. Thu được sản phẩm (0,5 g) với hai chất đồng phân. Sản phẩm này được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 7

Hỗn hợp thuốc nhuộm từ Bước 6 (0,5 g) được cho vào bình phản ứng và các chất sau được bổ sung: 4-(4 trans-pentylxyclohexyl)phenyl 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoat (0,39 g, được điều chế theo quy trình từ Bước 2 của Ví dụ 3 ngoại trừ là 4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenol và axit 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic được sử dụng thay cho 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anilin và axit 4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-benzoic); kali florua (0,19 g); diclobis(triphenylphosphin)paladi (II) (0,012 g); THF (20 mL) và nước (20 mL). Hỗn hợp này được khử khí, được bảo vệ bằng nitơ và gia nhiệt đến hồi lưu. Sau 18 giờ, TLC thể hiện sự tạo thành thuốc nhuộm màu xám và thuốc nhuộm màu tím. Hỗn hợp này được chiết sử dụng metylen clorua và nước. Lớp hữu cơ được thu hồi, được tách, được làm khô trên magie sulfat và được cô. Sản phẩm tạo thành được tinh chế sử dụng CombiFlash® Rf. Thu được thuốc nhuộm màu xám dưới dạng chất rắn màu xanh lá (0,25 g, kém phân cực). Thu được thuốc nhuộm màu tím dưới dạng chất rắn màu trắng đục (0,18 g, phân cực hơn). Phân tích NMR thể hiện thuốc nhuộm màu tím phân cực hơn có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10-[4-((4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenoxy)carbonyl)phenyl]-6,13,13-trimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 2



Bước 1

Magie (3,2 g) và THF (50 ml) được đặt trong bình khô được lắp phễu nhỏ giọt chứa hỗn hợp gồm 1-brom-4-(triflometyl)benzen (30 g) và THF (200 ml). 20 ml dung dịch trong phễu nhỏ giọt được bổ sung vào bình này. Vài giọt dibromoetan cũng được bổ sung vào bình này để bắt đầu phản ứng. Vài phút sau, dung môi trong bình phản ứng bắt đầu sôi. Phần dung dịch còn lại trong phễu nhỏ giọt được bổ sung nhỏ giọt. Nước đá thỉnh thoảng được sử dụng để làm mát hỗn hợp phản ứng. Sau khi bổ sung, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong hai giờ. Sau đó 3-brom-4-metylbenzonitril (26 g) được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng. Hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng qua đêm. Dung dịch HCl 3 N (200 ml) được bổ sung. Hỗn hợp này được khuấy trong 4 giờ. Lớp hữu cơ được thu gom bằng phễu tách và sau đó được cô. Phương pháp tách bằng cột nhồi silicagel được sử dụng để làm sạch sản phẩm sử dụng hỗn hợp dung môi 90/10 hexan/etyl axetat. Loại silica gel được sử dụng trong Bước này và các bước khác là Grade 60, 230-400 mesh. Thu được các tinh thể màu trắng (19 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-brom-4-metyl-4'-triflometylbenzophenon.

Bước 2

Huyền phù chứa 1-brom-4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzen (96 g), axit 4-(metoxycacbonyl)phenylboronic (56 g), K_2CO_3 (17 g), $Pd(PPh_3)_4$ (1,5 g), 1,4-dioxan (400 mL) và nước (12 mL) được cho vào bình phản ứng và được khuấy ở 105°C trong 10 giờ. Sau phản ứng, hỗn hợp này được rót vào nước (1 L) có khuấy. Chất rắn màu xám thu được sau khi lọc. Chất rắn này được rửa bằng nước, được hòa tan trong CH_2Cl_2 (400 ml), được làm khô trên $MgSO_4$ và được lọc qua xelit. Dịch lọc được cô và được rót vào metanol (600 mL) có khuấy. Chất kết tủa được thu gom bằng cách lọc, được rửa bằng metanol và làm khô. Thu được chất rắn màu trắng (80,4 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với metyl 4'-(4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-carboxylat.

Bước 3

Sản phẩm từ Bước 2 (20 g) được trộn với natri hydroxit (6,57 g) và etanol (500 mL) trong bình phản ứng. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 4 giờ, làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được axit hóa sử dụng HCl đậm đặc. Chất kết tủa được thu gom bằng cách lọc, được rửa bằng nước và làm khô. Thu được chất rắn màu trắng (18,2 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit 4'-(4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-carboxylic.

Bước 4

Sản phẩm từ Bước 3 (18,2 g) được trộn với SOCl_2 (300 ml) và DMF (ba giọt) trong bình phản ứng và gia nhiệt đến hồi lưu trong 8 giờ. Dung dịch này được cô dưới áp suất cao và cặn tạo thành được rót vào 200 mL hexan có khuấy. Chất rắn màu trắng kết tủa được thu gom bằng cách lọc, được rửa bằng hexan và làm khô. Thu được chất rắn màu trắng (17,53 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 4'-(4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-carbonyl clorua.

Bước 5

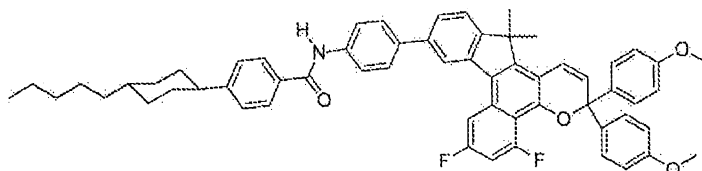
Sản phẩm từ Bước 4 (10 g) trong metylen clorua (30 ml) được nhỏ giọt vào dung dịch 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anilin (5,94 g) và TEA (4,13 g) trong CH_2Cl_2 (60 ml) có khuấy. Sau khi bổ sung, dung dịch này được khuấy tiếp trong 24 giờ. Sau đó dung dịch này được rửa bằng nước (50 mL) ba lần, được làm khô trên MgSO_4 , được cô dưới áp suất giảm và sau đó được rót vào metanol (200 ml) có khuấy. Chất kết tủa được lọc, được rửa bằng metanol và làm khô. Thu được chất rắn màu trắng (12,24 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 4'-(4-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)biphenyl-4-carboxamit.

Bước 6

Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 7 của Ví dụ 1 được tuân theo ngoại trừ là 3-brom-4-metyl-4'-triflometylbenzophenon từ Bước 1 của ví dụ này được sử dụng thay cho 3-brom-4'-metylbenzophenon trong Bước 1 của Ví dụ 1, 1-(4-flophenyl)-1-(4-(piperidin-1-yl)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1,1-bis(4-metoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol trong Bước 6 của Ví dụ 1 và 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaboro-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-carboxamit từ Bước 5 của ví dụ này được sử dụng thay cho 4-(4-trans-

pentylxyclohexyl)phenyl 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoat trong Bước 7 của Ví dụ 1. Thu được chất rắn màu xanh dương làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-11,13,13-trimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 3



Bước 1

Magie (5,26 g) và THF (50 ml) được đặt trong bình khô được lắp phễu nhỏ giọt, chứa dung dịch 1-brom-3,5-diflobenzen (44 g) trong THF (400ml). Một phần muối dung dịch này trong phễu nhỏ giọt được bổ sung vào bình. Vài giọt dibromoetan cũng được bổ sung vào bình này để bắt đầu phản ứng. Vài phút sau, dung môi trong bình phản ứng bắt đầu sôi, bể nước đá được sử dụng. Phần dung dịch còn lại trong phễu nhỏ giọt được bổ sung nhỏ giọt ở nhiệt độ 0°C trong nửa giờ. Nửa giờ sau khi bổ sung, hầu hết Mg biến mất. Hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ nữa. Toàn bộ Mg đã vào dung dịch. Ở nhiệt độ 0°C, bis[2-(N,N-dimetyl-amino)etyl]ete (35 g) được bổ sung. Khuấy trong 15 phút. Sau đó 3-brombenzoyl clorua (50 g) được bổ sung trong một phần. Hỗn hợp được khuấy trong 2 giờ ở nhiệt độ 0°C, nước (500 ml) được bổ sung vào hỗn hợp này. Dung dịch 12N HCl được sử dụng để điều chỉnh độ pH đến ~2. DCM được bổ sung vào hỗn hợp này (500 ml). Lớp hữu cơ được thu gom, được rửa bằng nước một lần, được rửa bằng natri bicacbonat một lần, được làm khô trên magie sulfat và được cô. Thu được dầu nhớt (57 g). Dầu này được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo. NMR thể hiện rằng 3-brom-3',5'-diflobenzophenon là thành phần chính trong dầu này.

Bước 2

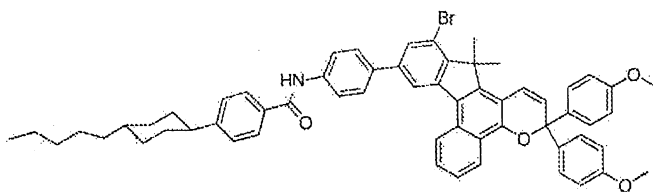
Hỗn hợp gồm 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anilin (52 g), axit 4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzoic (65 g), DCC (64,4 g), DMAP (3 g) và metylen clorua (500 ml) được cho vào bình phản ứng và được khuấy trong 24 giờ. Chất rắn được lọc bỏ. Dịch lọc được cô. Metanol (1 L) được bổ sung. Các tinh thể tạo thành được thu gom bằng cách lọc và làm khô. Thu được các tinh thể màu trắng (91 g) làm

sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 4-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)benzamidit.

Bước 3

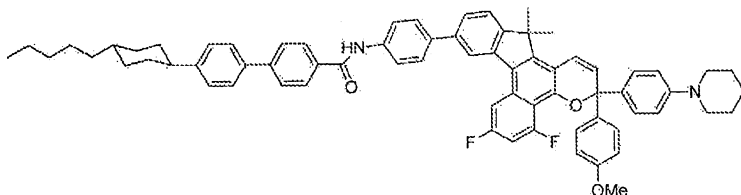
Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 7 của Ví dụ 1 được tuân theo ngoại trừ là 3-brom-3',5'-diflobenzophenon từ Bước 1 của ví dụ này được sử dụng thay cho 3-brom-4'-methylbenzophenon trong Bước 1 của Ví dụ 1, và 4-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)benzamidit từ Bước 2 của ví dụ này được sử dụng thay cho 4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoat trong Bước 7 của Ví dụ 1. Thu được chất rắn màu xám làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)benzamido)-phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 4



Các quy trình từ Ví dụ 3 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 1, tribromobenzen được sử dụng thay cho 1-brom-3,5-diflobenzen và benzoyl clorua được sử dụng thay cho 3-brombenzoyl clorua. Thu được chất rắn màu đen làm sản phẩm. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)benzamido)phenyl]-13,13-dimethy-12-brom-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]napbtho[1,2-b]pyran.

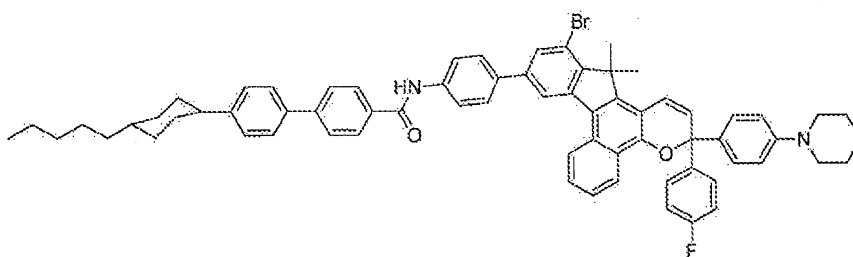
Ví dụ 5



Các quy trình từ Ví dụ 1 được tuân theo ngoại trừ là 3-brom-3',5'-diflobenzophenon từ Bước 1 của Ví dụ 3 được sử dụng thay cho 3-brom-4'-methylbenzophenon trong Bước 1, 1-(4-metoxypheyl)-1-(4-(N-piperidino)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1,1-bis(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol trong Bước 6

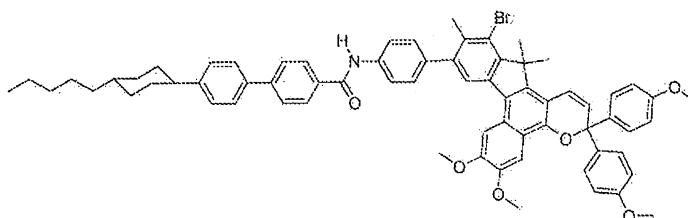
và 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit được sử dụng thay cho 4-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)benzamid trong Bước 7. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-metoxyphenyl)-3-(4-(N-piperidino)phenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 6



Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 3 của Ví dụ 3 được tuân theo ngoại trừ là: trong Bước 1, tribromobenzen được sử dụng thay cho 1-brom-3,5-diflobenzen và benzoyl clorua được sử dụng thay cho 3-brombenzoyl clorua; trong Bước 3, 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-piperidino)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1,1-bis(4-metoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol; 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit được sử dụng thay cho 4-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)benzamid. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-(N-piperidino)phenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 7

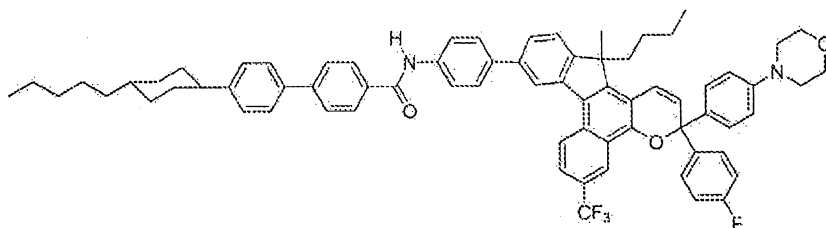


Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 3 của Ví dụ 3 được tuân theo ngoại trừ là: trong Bước 1, 2,4,6-tribromotoluen được sử dụng thay cho 1-brom-3,5-diflobenzen và 3,4-dimetoxibenzoyl clorua được sử dụng thay cho 3-brombenzoyl clorua; trong Bước

3, 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit được sử dụng thay cho 4-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)benzamit.

Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-methoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-6,7-dimethoxy-11,13,13-trimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 8



Bước 1

Hỗn hợp gồm 4-bromaxetophenon (148 g), dimetyl succinic este (130 g) và toluen (2,5 L) được khuấy cơ học trong bình phản ứng. Kali t-butoxit (100 g) được bổ sung trong một phần. Quan sát thấy màu vàng. Rất nhiều kết tủa được tạo thành. Một giờ sau, nước (1 L) được bổ sung. Lớp nước được thu gom và được rửa bằng toluen hai lần. Sau đó nó được trung hòa bằng dung dịch dung dịch HCl 12 N. Sản phẩm này được chiết bằng etyl axetat và sau đó được tái kết tinh từ etyl ete/hexan. Thu được 170 g tinh thể màu trắng. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit (E)-4-(4-bromphenyl)-3-(metoxycarbonyl)pent-3-enoic.

Bước 2

Axit (E)-4-(4-bromphenyl)-3-(metoxycarbonyl)pent-3-enoic (160 g) từ Bước 1 được trộn với dung dịch nước natri hydroxit 50% (200 g) và nước (4 lít) trong cốc dung tích bốn lít. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến sôi. Một giờ sau, TLC thể hiện rằng phản ứng đã hoàn thành. Độ pH của dung dịch này được điều chỉnh đến 2 sử dụng dung dịch HCl 12 N. Chất kết tủa được thu gom bằng cách lọc. Thu được các tinh thể màu trắng đục (152 gam). Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit (E)-2-(1-(4-bromphenyl)etyliden)succinic.

Bước 3

Hỗn hợp gồm axit (E)-2-(1-(4-bromphenyl)etyliden)succinic (152 g) từ Bước 2, DBSA (5 g) và toluen (1 L) được gia nhiệt đến hồi lưu đồng thời loại bỏ nước bằng bẫy Dean-Stark. Vật liệu rắn ban đầu thực sự biến mất trong một giờ. Sau 2 giờ, TLC

thể hiện rằng phản ứng đã hoàn thành. Hỗn hợp được chuyển qua cột được nhồi đầy silica gel. Sản phẩm được rửa khỏi cột nhồi bằng 1/4 etyl axetat/hexan. Sau khi cô, thu được dầu. Bổ sung hexan (1 L) vào dầu này. Sản phẩm được kết tinh. Tinh thể được thu gom bằng cách lọc và làm khô trong chân không. Thu được các tinh thể màu trắng đục (130 gam). Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với (E)-3-(1-(4-bromophenyl)-etyliden)dihydrofuran-2,5-dion.

Bước 4

(E)-3-(1-(4-bromophenyl)etyliden)dihydrofuran-2,5-dion (125 g) từ Bước 3 được bổ sung làm ba phần vào hỗn hợp được khuấy gồm nhôm clorua (130 g) và metylen clorua (1 L), trong 5 phút. Hỗn hợp trở nên sẫm màu. Sau khi khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ, hỗn hợp phản ứng được rót chậm vào nước (2 L). Khói tạo thành được quan sát. Một lượng lớn chất rắn màu vàng được tạo thành. THF (1 L) được bổ sung vào hỗn hợp này để hòa tan chất rắn màu vàng này. Lớp nước được làm bão hòa bằng NaCl rắn và sau đó được loại bỏ bằng phễu tách. Dung dịch hữu cơ được làm khô trên magie sulfat và được cô đến nhớt. Etyl axetat (200 ml) được bổ sung và hỗn hợp này được để yên ở nhiệt độ trong phòng. Các tinh thể màu vàng rơi ra và được thu gom và làm khô (50 gam). Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit 2-(6-brom-3-metyl-1-oxo-1H-inden-2-yl)axetic.

Bước 5

Hỗn hợp gồm mangan clorua (7,46 g) và lithi clorua (5 g) được làm khô ở nhiệt độ 200 °C trong lò chân không trong một giờ. Dưới sự bảo vệ của nitơ, THF được bổ sung (200 ml). Việc hòa tan kéo dài khoảng 30 phút. Đồng (I) clorua (0,59 g) và axit 2-(6-brom-3-metyl-1-oxo-1H-inden-2-yl)axetic (19,4 g) từ Bước 4 được bổ sung vào dung dịch này. Hỗn hợp này được khuấy đến trong và sau đó làm lạnh đến nhiệt độ 0°C. Dung dịch butylmagie bromua 2M trong THF (99 ml) được bổ sung nhỏ giọt. Hỗn hợp phản ứng trở thành màu đen hoàn toàn nhờ bổ sung thêm BuMgBr. Việc bổ sung kết thúc trong 2 giờ. Sau khi bổ sung, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ 0°C trong 2 giờ nữa và sau đó dập tắt phản ứng bằng cách sử dụng nước (200 ml). Độ pH của hỗn hợp này được điều chỉnh đến ~2 sử dụng dung dịch HCl 12 N. Etyl axetat (200 ml) được bổ sung. Phần hữu cơ được thu gom bằng phễu tách, được làm khô, và được cô. Sản phẩm này được tinh chế bằng CombiFlash[®] Rf. Thu được dầu (4 g) làm

sản phẩm. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit 2-(5-brom-1-butyl-1-metyl-3-oxo-2,3-dihydro-1H-inden-2-yl)axetic.

Bước 6

Magie rắn (1,5 g) được cho vào bình phản ứng được lắp phễu nhỏ giọt và làm khô trong lò. THF (60 ml) và 1-brom-4-triflometylbenzen (15,3 g) được bổ sung. Bắt đầu bằng 1 giọt 1,2-dibromoetan, Grignard bắt đầu tạo thành, bể nước đá thỉnh thoảng được sử dụng để kiểm soát tốc độ phản ứng. Hai giờ sau, tất cả magie đã hết. Trong phễu nhỏ giọt, axit 2-(5-brom-1-butyl-1-metyl-3-oxo-2,3-dihydro-1H-inden-2-yl)axetic (4,2 g) từ Bước 5 được trộn với THF khan (20 ml) và được nhỏ giọt vào dung dịch Grignard. Việc bổ sung hoàn thành trong 10 phút. Sau khi bổ sung, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ. Phản ứng được dừng lại bằng cách bổ sung nước (100 ml). Độ pH được điều chỉnh đến 2 sử dụng dung dịch HCl 12 N. Etyl axetat được bổ sung (100 ml). Pha hữu cơ được thu gom bằng phễu tách, được rửa bằng NaCl/nước, được làm khô trên magie sulfat và được cô. Dầu thu được được hòa tan lại trong toluen (100 ml) trong bình phản ứng. Axetic anhydrua (10 gam) và bismut triflat (0,5 g) được bổ sung. Hỗn hợp này được hồi lưu trong 1 giờ và được làm mát đến nhiệt độ trong phòng. Metanol (100 ml) và dung dịch HCl 12 N (1 ml) được bổ sung, Hỗn hợp này được hồi lưu trong 12 giờ. Tất cả dung môi được loại bỏ. Phương pháp tách bằng cột nhồi silicagel được dùng cho sản phẩm này. Thu được dầu (3 g) làm sản phẩm. Phân tích NMR cho thấy rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 10-brom-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]florene-5-ol.

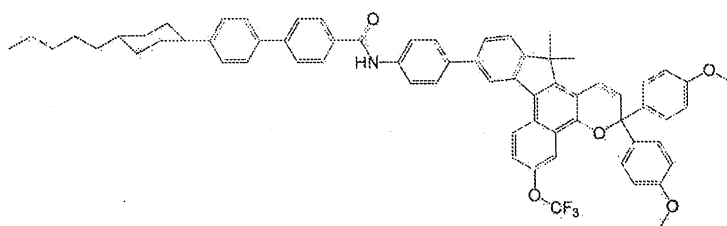
Bước 7

10-brom-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]florene-5-ol (3 g) từ Bước 6 được cho vào bình phản ứng. Bổ sung 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol (2,1 g), 1,2-dicloetan (30 ml) và axit p-toluensulfonic (70 mg) vào bình này. Hỗn hợp này được hồi lưu trong 4 giờ. Toàn bộ dung môi được loại bỏ, cột được nhồi đầy silica gel được sử dụng để tinh chế sản phẩm này. Thu được dầu màu nâu nhạt (2 gam) làm sản phẩm. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-(N-morpholino)phenyl)-10-brom-6-triflometyl-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphtho[1,2-b]pyran.

Bước 8

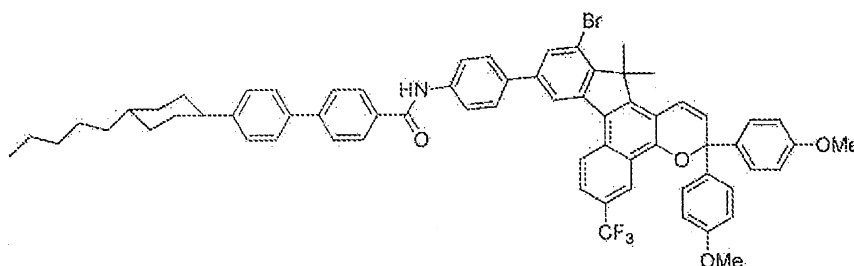
Hỗn hợp gồm 3-(4-flophenyl)-3-(4-(N-morpholino)phenyl)-10-brom-6-triflometyl-13-metyl-13-butyl-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran (1,4 g) từ Bước 7, 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit (1,5 g), paladi axetat (24 mg), triphenyl phosphin (112 mg), natri cacbonat (0,8 g), THF (20 ml) và nước (10 ml) được khử khí và được hồi lưu trong 4 giờ. Hỗn hợp phản ứng được chuyển qua bộ lọc XELIT® có hỗ trợ elite để loại bỏ chất rắn không hòa tan trong hỗn hợp này. Sản phẩm được rửa bỏ sử dụng metylen clorua. Sau khi chiết bằng nước, lớp hữu cơ được thu gom và được cô. Sản phẩm này được tinh chế bằng CombiFlash® Rf. Thu được chất rắn màu xanh dương (0,7 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-(N-morpholino)phenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 9



Các quy trình từ Ví dụ 8 được tuân theo ngoại trừ là: trong Bước 5, dung dịch metyl magie bromua 1,4M trong THF được sử dụng thay cho butyl magie bromua; trong Bước 6, 1-brom-4-triflometoxybenzen được sử dụng thay cho 1-brom-4-triflometylbenzen; trong Bước 7, 1,1-bis(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometoxy-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphtbo[1,2-b]pyran.

Ví dụ 10



Bước 1

Bình 2 L chứa tribromobenzen (100 g) và que khuấy từ được làm khô trong lò chân không ở nhiệt độ 80 °C trong 4 giờ. THF khan (500 ml) được bổ sung. Hỗn hợp tạo thành được đặt trong bể nước đá bão hòa NaCl. Bổ sung nhỏ giọt 3M isopropyl magie clorua (160 ml) vào dung dịch này với tốc độ sao cho nhiệt độ bên trong được kiểm soát từ -20 đến 0°C. Việc bổ sung này kết thúc trong khoảng từ 30 phút đến 1 giờ. Hỗn hợp này được khuấy trong nửa giờ ở cùng nhiệt độ và bis[2-(N,N-dimethylamino)etyl]ete (61 g) được bổ sung chậm trong 5 phút ngắt quãng và một lượng lớn chất kết tủa được tạo thành. Hỗn hợp tạo thành được khuấy trong 20 phút nữa và hỗn hợp gồm 4-triflometylbenzoyl clorua (73 g) và THF (100 ml) được bổ sung trong 5 phút ngắt quãng. Hỗn hợp tạo thành được khuấy qua đêm. Nước (100 ml) được bổ sung chậm và độ pH được điều chỉnh đến 2 bằng dung dịch HCl 3 N. Lớp hữu cơ được thu gom bằng phễu tách, được rửa bằng 5% NaOH/nước và NaCl/nước, được làm khô và được cô. Bổ sung metanol (300 ml) vào dầu thu hồi và sản phẩm này được kết tinh. Sản phẩm này được thu gom bằng cách lọc. NMR thể hiện rằng các tinh thể màu trắng thu được (87 g) có cấu trúc phù hợp với 3,5-dibromo-4'-triflometylbenzophenon.

Bước 2

Hỗn hợp gồm 3,5-dibromo-4'-triflometylbenzophenon (75 g) từ Bước 1, dimetyl succinic este (32,2 g) và toluen (800 ml) được cho vào bình 5 L ba cổ được lắp cánh khuấy cơ học. Kali t-butoxit rắn (22,6 g) được bổ sung từng mẻ trong 30 phút ngắt quãng. Phản ứng tỏa nhiệt cùng với sự tạo thành một lượng lớn chất kết tủa được quan sát. Sau hai giờ, nước (500 ml) được bổ sung và thu được hỗn hợp dạng sữa. Độ pH của hỗn hợp này được điều chỉnh đến ~2 sử dụng 3 N HCl. Sau khi khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 10 phút, lớp hữu cơ được thu gom, được rửa bằng NaCl/HCl, được làm khô trên MgSO₄. Sau khi cô, hexan được bổ sung và các tinh thể màu trắng được tạo thành. Các tinh thể được thu gom bằng cách lọc, NMR thể hiện rằng sản phẩm thu được (62 gam) có cấu trúc phù hợp với axit (E)-4-(3,5-dibromophenyl)-3-(metoxycarbonyl)-4-(4-(triflometyl)phenyl)but-3-enoic.

Bước 3

Lanthanum (III) clorua khan rắn (100 g) được nghiền thành bột rất mịn và sau đó được trộn với lithi clorua (52 g) và THF khan (1 lít) trong bình ba cổ 5 lít được lắp

cánh khuấy cơ học và phễu nhỏ giọt. Hỗn hợp này được hồi lưu trong vài giờ cho đến khi chất rắn được hòa tan. Axit (E)-4-(3,5-dibromophenyl)-3-(metoxycarbonyl)-4-(4-(triflometyl)phenyl)but-3-enoic rắn (106 g) từ Bước 2 được hòa tan trong hỗn hợp này. Sau đó hỗn hợp này được làm mát đến nhiệt độ -15°C , Dung dịch 3 metyl magie clorua (238 ml) được đặt trong phễu nhỏ giọt. 30% đầu tiên của Grignard được bổ sung chậm vào hỗn hợp này. Sự tạo thành bọt khí được quan sát. Sau khi nhiệt độ trở lại -15°C , phần còn lại của Grignard được bổ sung vào hỗn hợp này trong 2 phút. Sau 30 phút, nước (1 L) được bổ sung chậm vào hỗn hợp này và độ pH được điều chỉnh đến độ axit sử dụng axit axetic. Hỗn hợp này trở nên trong và tạo thành hai lớp. Lớp nước được chất bỏ. Lớp hữu cơ được rửa bằng NaCl/nước bốn lần và sau đó được cô đến khô. Chất rắn màu vàng nhạt được thu hồi và được hòa tan trong toluen. Dung dịch này được lọc sử dụng cột nhồi silica gel và dung dịch trong thu hồi được cô đến khô. Thu được sản phẩm rắn màu trắng và được sử dụng trong Bước tiếp theo mà không cần tinh chế thêm. Một phần sản phẩm này được kết tinh lại từ metanol và phân tích NMR thể hiện rằng các tinh thể được tinh chế này có cấu trúc phù hợp với (E)-4-((3,5-dibromophenyl)(4-(triflometyl)phenyl)metylen)-5,5-dimetyldihydrofuran-2(3H)-on.

Bước 4

Bổ sung sản phẩm từ Bước 3, toluen (500 ml), bismut triflat (20 g) và axit axetic (0,24 g) vào bình phản ứng. Hỗn hợp tạo thành được khuấy ở hồi lưu trong 1 giờ. Sau khi làm mát đến nhiệt độ trong phòng, axetic anhydrua (100 ml) được bổ sung. Hỗn hợp này được gia nhiệt lại đến hồi lưu và sau một giờ, hỗn hợp này được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được lọc qua cột nhồi silica gel. Dung dịch trong thu hồi được cô đến khô. Axeton (50 ml) được bổ sung vào chất rắn thu được để tạo thành bột nhão và sau đó metanol (250 ml) được bổ sung. Hỗn hợp tạo thành được làm mát để tạo thành tinh thể. Các tinh thể màu trắng thu hồi (58 g) được phân tích bằng NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat.

Bước 5

Bổ sung metanol (20 mL) và tetrahydrofuran (10 ml) vào bình chứa 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]florein-5-yl axetat (2,42 g) từ Bước 4. Axit clohydric đậm đặc (1 mL) được bổ sung và dung dịch này được gia nhiệt đến hồi

lưu trong 4 giờ. Dung môi được loại bỏ trong chân không và cặn được tinh chế bằng cách lọc qua silica gel, sử dụng hỗn hợp 4:1 hexan/etyl axetat làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô để tạo thành chất rắn màu kem (1,63 g). Phân tích NMR của chất rắn màu kem thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-5-ol.

Bước 6

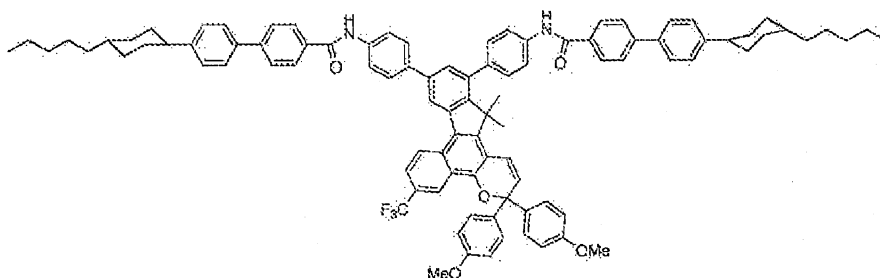
Bổ sung 1,1-bis(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol (1,08 g), triisopropylorthoformat (0,90 mL) và pyridin *p*-toluensulfonat (0,10 g) vào bình phản ứng chứa dung dịch sản phẩm từ Bước 6, 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-5-ol (1,63 g) trong cloroform (50 mL). Dung dịch này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để tạo thành cặn dạng dầu. Dietyl ete được bổ sung vào cặn để tạo thành chất kết tủa màu kem. Chất kết tủa màu kem này được thu gom bằng cách lọc trong chân không (2,30 g) và được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo, phân tích NMR của chất kết tủa màu kem này thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10,12-dibromo-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-*b*]pyran.

Bước 7

Bổ sung kali florua (1,81 g, 30,68 mmol) vào bình phản ứng chứa sản phẩm từ Bước 6 (2,30 g) và 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit (1,72 g) trong hỗn hợp gồm THF (40 ml) và nước (40 mL) tỷ lệ 1:1. Dung dịch này được khử khí bằng cách sục khí nitơ trong 10 phút. Bổ sung bis(triphenylphosphin) paladi(II) clorua (0,22 g, 0,31 mmol) vào dung dịch tạo thành. Dung dịch này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng etyl axetat. Hỗn hợp này được lọc qua nền bộ lọc CELITE® và dịch lọc được phân lớp bằng etyl axetat và nước. Dịch chiết etyl axetat được thu gom, được làm khô bằng natri sulfat khan và được cô để thu được cặn dạng dầu. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và etyl axetat tỷ lệ 4:1 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa sản phẩm mong muốn được nhóm lại và được cô trong chân không để thu được cặn dạng dầu. Dầu này được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và được bổ sung nhỏ giọt vào dung dịch metanol được khuấy mạnh. Chất kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để thu

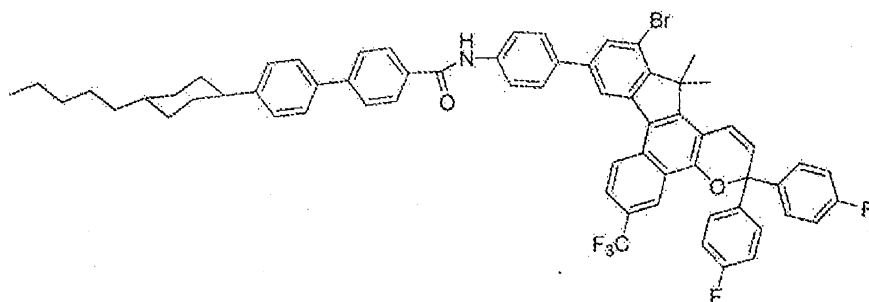
được chất rắn màu tím (0,90 g). Phân tích NMR của chất rắn màu tím thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 11



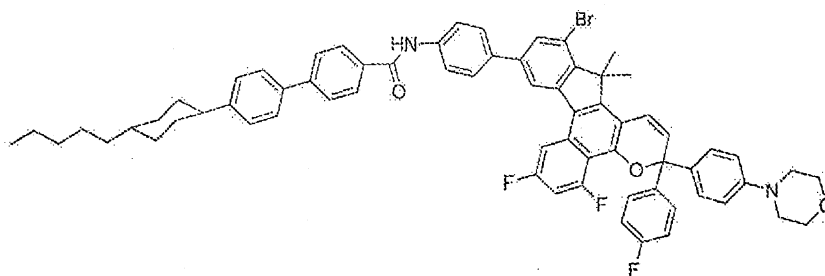
Sản phẩm của Ví dụ 10 được phân đoạn sử dụng sắc ký cột bằng cách gia tăng độ phân cực của dung dịch rửa giải hexan và etyl axetat (1:1) để thu được các phân đoạn phân cực. Các phân đoạn này được nhóm lại và được cô trong chân không để thu được cặn dạng dầu. Dầu này được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và được bổ sung nhỏ giọt vào dung dịch metanol được khuấy mạnh. Chất kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để thu được chất rắn màu xanh tím (0,30g). Phân tích NMR của chất rắn màu tím thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10,12-bis[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 12



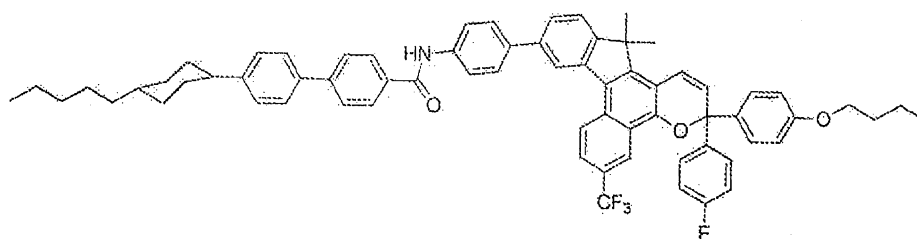
Các quy trình của Ví dụ 10 được tuân theo ngoại trừ là 1,1-bis(4-flophenyl)-prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1,1-bis(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol trong Bước 6, phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm cuối cùng có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-flophenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 13



Các quy trình của Ví dụ 10 được tuân theo ngoại trừ như sau: trong Bước 1, 3,5-diflobenzoyl clorua được sử dụng thay cho 4-triflometylbenzoyl clorua; trong Bước 4, sản phẩm được sử dụng mà không tinh chế trong bước tiếp theo; trong Bước 5, 8,10-dibromo-2,4-diflo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]floren-5-ol mong muốn được tái kết tinh sử dụng etyl axetat làm dung môi; trong Bước 6, 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1,1-bis(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol; trong Bước 7, hệ chất xúc tác khác là paladi axetat / triphenylphosphin / natri cacbonat / dimetoxymetan / etanol được sử dụng thay cho bis(triphenylphosphin)paladi (II) clorua / kali florua / THF / nước. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm cuối cùng có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-nmorpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-phenyl]-5,7-diflo-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3';3,4]naphto-[1,2-b]pyran.

Ví dụ 14



Bước 1 đến Bước 4

Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 4 của Ví dụ 10 được tuân theo.

Bước 5

8,10-Dibromo-7,7-dimetyl-3-triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat (53,88 g) từ Bước 4 và 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit (56,27 g) được bổ sung vào bình phản ứng và được hòa tan trong hỗn hợp tỷ lệ 1:1 gồm toluen (1000 ml) và etanol

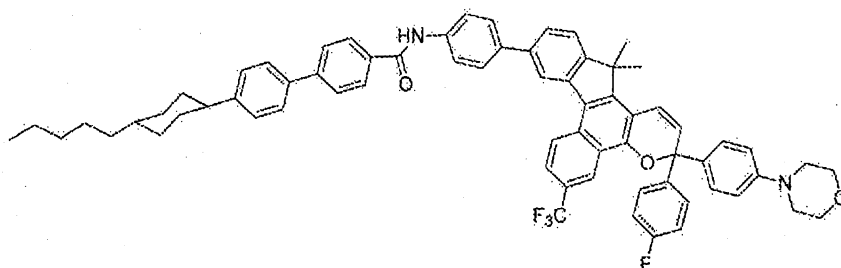
(1000 mL). Kali cacbonat (42,26 g) và triphenylphosphin (8,02 g) được bổ sung vào dung dịch này được khử khí bằng cách sục nitơ trong 20 phút. Bổ sung vào dung dịch tạo thành paladi axetat (2,29 g) và hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 3 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và huyền phù đã khử khí chứa bis(triphenylphosphin)paladi(II) clorua (7,15 g) trong toluen (100 mL) và etanol (100 ml) được bổ sung. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt đến hồi lưu trong 16 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng etyl axetat (500 ml). Hỗn hợp này được lọc qua XELIT[®] có lọc và dịch lọc được thu gom và được cô trong chân không để thu được cặn. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp toluen và etyl axetat tỷ lệ 19:1 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa sản phẩm mong muốn được nhóm lại và được cô trong chân không để thu được cặn màu kem. Toluene được bổ sung vào cặn để kết tủa sản phẩm này. Chất kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để thu được chất rắn màu kem (32 g). Phân tích NMR của chất rắn màu kem thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 7,7-dimetyl-3-triflometyl-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-phenyl]-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Bước 6

7,7-Dimetyl-3-triflometyl-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-7H-benzo[c]fluoren-5-yl từ Bước 5 (18,00 g) được bổ sung vào bình phản ứng và được hòa tan trong tetrahydrofuran (200 mL). Axit 4-dodecylbenzensulfonic (0,54 g) được bổ sung dưới dạng dung dịch trong toluen (20 mL). 1-(4-Butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol (14,52 g) được bổ sung thành 5 phần dưới dạng dung dịch trong toluen (20 mL) và hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 6 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và dung môi được loại bỏ trong chân không để thu được cặn. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và toluen tỷ lệ 1:1 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa sản phẩm mong muốn được nhóm lại và được cô trong chân không để thu được cặn dạng dầu. Dầu này được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và được bổ sung nhỏ giọt vào dung dịch được khuấy mạnh chứa metanol. Chất kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để thu được chất rắn màu tím (9,97 g). Phân tích NMR của chất rắn màu tím thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-

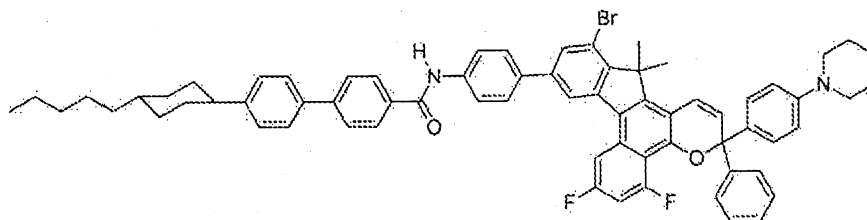
pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 15



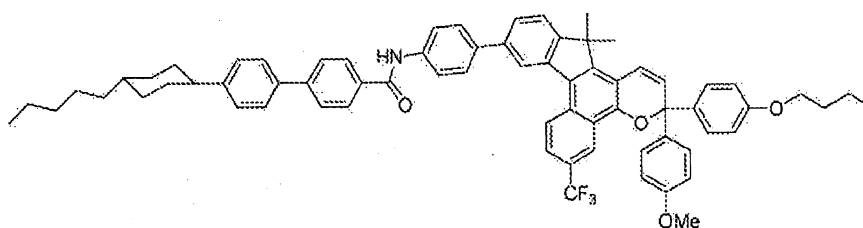
Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol trong Bước 6. Phân tích NMR thể hiện rằng cấu trúc này phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-(N-morpholino)phenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 16



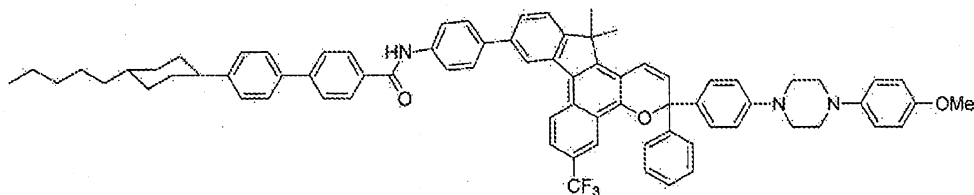
Các quy trình từ Ví dụ 13 được tuân theo ngoại trừ là 1-phenyl-1-(4-piperidinophenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-N-morpholinophenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol. Phân tích NMR thể hiện rằng cấu trúc này phù hợp với 3-phenyl-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 17



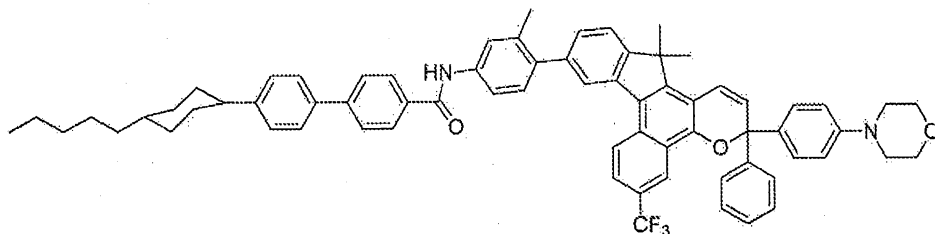
Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-metoxyphephenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 18



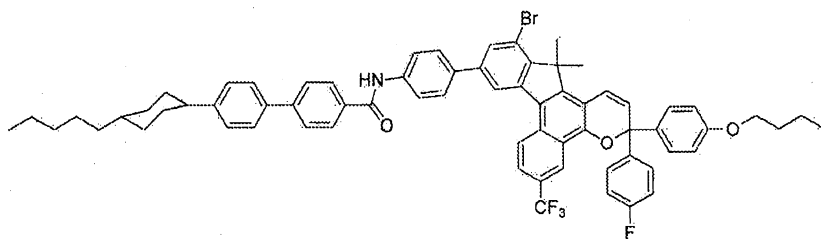
Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là 1-(4-(4-(4-metoxyphephenyl)piperazin-1-yl)phenyl)-1-phenylprop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-phenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 19



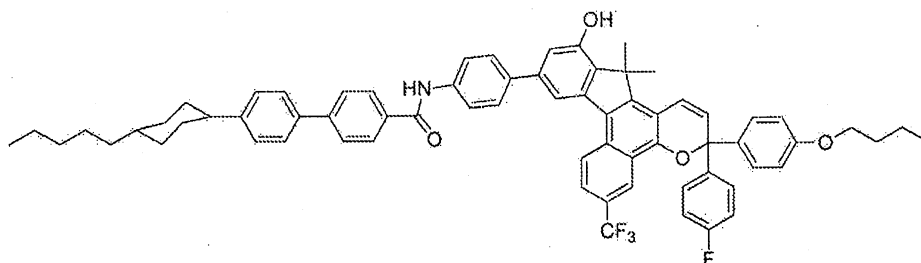
Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là 1-phenyl-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol và N-(3-metyl-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit được sử dụng thay cho 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit. Phân tích NMR thể hiện rằng cấu trúc này phù hợp với 3-phenyl-3-(4-(N-morpholino)phenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-2-metylphenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 20



Các quy trình của Ví dụ 10 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 6, 1-(4-flophenyl)-1-(4-butoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1,1-bis(4-metoxyphephenyl)prop-2-yn-1-ol. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm cuối cùng có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentyl)cyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

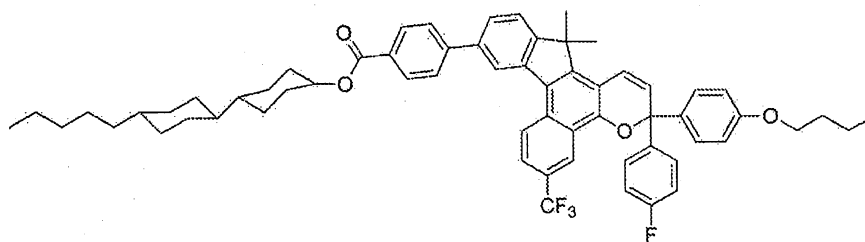
Ví dụ 21



Sản phẩm từ Ví dụ 20, 3-(4-flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentyl)cyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran (3,77 g), được bổ sung vào bình phản ứng và được hòa tan trong tetrahydrofuran (10 mL) và làm lạnh đến -78°C . n-Butyl lithi (6 mL, 2,5 M trong hexan) được bổ sung và được khuấy trong 30 phút. Nước muối được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng và được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng. Lớp nước được chiết bằng etyl axetat. Lớp hữu cơ thu hồi được làm khô bằng natri sulfat khan, được lọc và được cô để thu được cặn dạng dầu. Hai hợp chất đổi màu theo ánh sáng được tồn tại dưới dạng cặn dầu. Chúng được tách bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và etyl axetat tỷ lệ 9:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa hợp chất phân cực hơn được nhóm lại và được cô để thu được dầu. Dầu này được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và được bổ sung nhỏ giọt vào metanol được khuấy mạnh, Chất kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô đến chất rắn màu tím (0,3 g). Phân tích NMR của chất rắn màu tím thể hiện cấu trúc phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-12-hydroxyl-10-[4-(4-(4-(4-trán-

pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 22



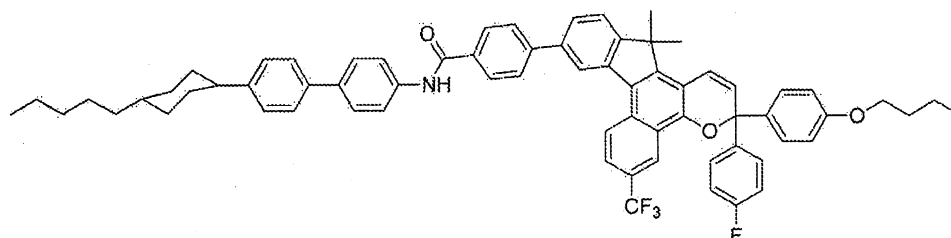
Bước 1

Quy trình từ Bước 2 của Ví dụ 3 được tuân theo ngoại trừ là 4'-pentyl-[(trans, trans)-1,1'-bi(xyclohexan)]-4-ol được sử dụng thay cho axit 4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzoic. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với (trans, trans)-4'-pentyl-[1,1'-bi(xyclohexan)]-4-yl 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoat.

Bước 2

Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 5 (trans, trans)-4'-pentyl-[1,1'-bi(xyclohexan)]-4-yl 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoat được sử dụng thay cho 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flo-phenyl)-10-[4-((trans,trans)-4'-pentyl-[1,1'-bi(xyclohexan)]-4-oxycacbonyl)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]-naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 23



Bước 1

Bổ sung $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (10,7 g) vào dung dịch khử khí chứa 1-brom-4-(4-pentylxyclohexyl)benzen (300 g) trong 1,4-dioxan (2 L) trong bình phản ứng. Sau khi khuấy trong 10 phút ở nhiệt độ trong phòng, dung dịch nước K_2CO_3 1 M (485 mL,

4,85 mmol) và 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anilin (274,5 g, 0,97 mol) được bổ sung. Hỗn hợp phản ứng được hồi lưu trong 36 giờ. Dung môi được làm bay hơi và cặn này được tái kết tinh sử dụng CH_2Cl_2 -MeOH (400 mL- 1500 mL). Thu được các tinh thể màu trắng (256 g) làm sản phẩm. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-amin.

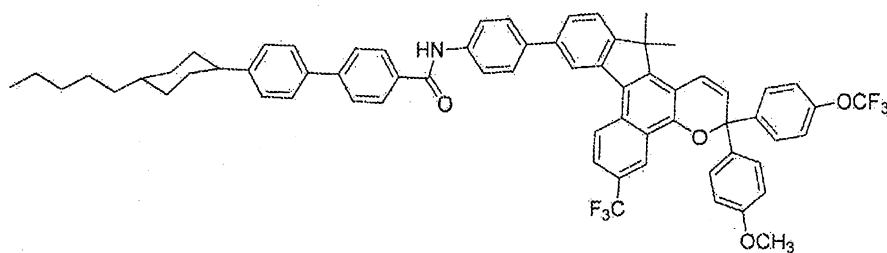
Bước 2

Hỗn hợp gồm axit 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic (82,6 g 0,35 mol), 1,1'-cacbonyldiimidazol (56,6 g, 0,35 mol) và 500 ml THF (500 ml) được khuấy trong bình phản ứng ở nhiệt độ trong phòng trong 5 giờ. Bổ sung sản phẩm của Bước 1, 4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-amin (102 g) vào hỗn hợp phản ứng. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 24 giờ. Dung môi được làm bay hơi và cặn này được tái kết tinh bằng CH_2Cl_2 -MeOH (150 mL- 400 mL). Thu được các tinh thể màu trắng (156 g) làm sản phẩm này. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với N-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzamidit,

Bước 3

Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 5, N-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzamidit được sử dụng thay cho 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamidit. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-metoxyphenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[4-((4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-yl)cacbamoyl)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 24



4-Triflometoxy benzoylclorua (1,00 g) và anisol (0,60 g) được hòa tan trong cloroform (20 mL) trong bình phản ứng và làm mát đến nhiệt độ từ 0 đến 5°C bằng bể nước đá. Bổ sung nhôm clorua (0,90 g) và khuấy trong 15 phút ở nhiệt độ từ 0 đến 5°C. Bể nước đá được loại bỏ và phản ứng được làm ấm đến nhiệt độ trong phòng và được khuấy trong 48 h và được rót vào nước (100 ml) và được khuấy trong 15 phút. Lóp nước được chiết bằng etyl axetat (300 mL). Lóp hữu cơ được thu hồi, được rửa bằng dung dịch natri bicacbonat bão hòa, nước muối, được làm khô bằng natri sulfat khan và được cô trong chân không để thu được cặn. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và etyl axetat với tỷ lệ 9:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô để thu được chất rắn. Hexan được bổ sung và các chất rắn được thu gom bằng cách lọc trong chân không (0,55 g). Phân tích NMR của chất rắn này thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với (4-metoxyphe-nyl)(4-(triflometoxy)phenyl)metanon.

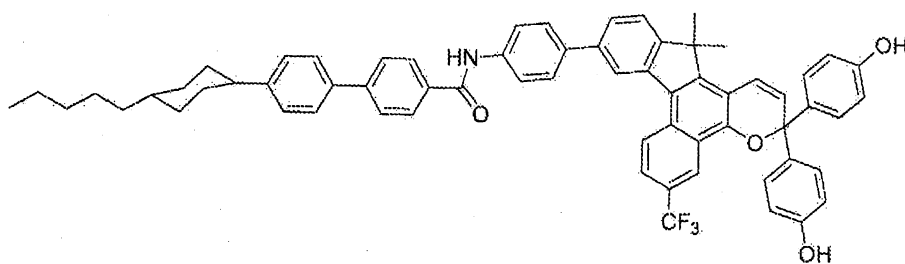
Bước 2

(4-Metoxyphe-nyl)(4-(triflometoxy)phenyl)metanon (0,55 g) được bổ sung vào bình phản ứng và được hòa tan trong dimetylformamit (10 mL) được làm bão hòa bằng axetylen. Natri axetylđide (0,1 g) được bổ sung và hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút. Hỗn hợp phản ứng được rót cẩn thận vào nước đá lạnh (100 mL) và được khuấy trong 15 phút. Lóp nước được chiết bằng etyl axetat. Lóp hữu được thu hồi và kết hợp, Sản phẩm tạo thành được làm khô bằng natri sulfat khan và được cô để thu được dầu (0,55 g). Phân tích NMR của dầu này thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 1-(4-metoxyphe-nyl)-1-(4-(triflometoxy)phenyl)prop-2-yn-1-ol.

Bước 3

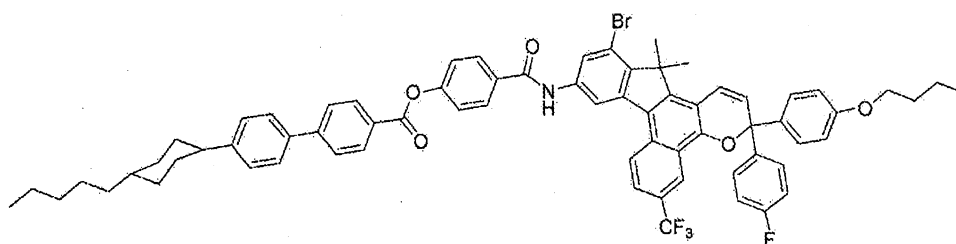
Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là 1-(4-metoxyphe-nyl)-1-(4-(triflometoxy)phenyl)prop-2-yn-1-ol từ Bước 2 ở trên được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphe-nyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol trong Bước 6 của Ví dụ 14. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-metoxyphe-nyl)-3-(4-triflometoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno-[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 25



Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là 1,1-bis(4-((tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol trong Bước 6. Cũng trong Bước 6 sau phản ứng và trước khi tách bằng cột, cặn này được đưa vào tetrahydrofuran và metanol có bổ sung axit p-toluensulfonic, được hồi lưu trong 1 h và được cô. Phân tích NMR của chất rắn thu được thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3-bis(4-hydroxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentyl)cyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 26



Bước 1

Bổ sung bis(dibenzylidenaxeton)platin(0) (0,55 g), 2-di-tert-butylphosphino-3,4,5,6-tetrametyl-2',4',6 triisopropyl-1,1'-biphenyl (1,14 g), kali phosphat tán nhỏ (8,72 g), 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat (5,00 g) từ Bước 4 của Ví dụ 10 và 4-hydroxybenzamid (2,15 g) vào bình đáy tròn ba cổ (100 mL). Bình này được làm bay hơi và được nạp nitơ. Tert-butanol được khử khí (30 mL) được bổ sung và hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 6 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng EtOAc. Dung dịch này được lọc qua Celite và dịch lọc được thu gom, được cô và cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp etyl axetat và hexan tỷ lệ 4:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô để thu được dầu. Dầu này được hòa tan trong lượng tối thiểu etyl axetat và hexan được bổ sung vào sản phẩm tinh thể này. Các tinh thể được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để thu được chất rắn màu trắng (4,27g), phân tích NMR của chất rắn

màu trắng này thể hiện cấu trúc phù hợp với N-(8-brom-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-10-yl)-4-hydroxybenzamid.

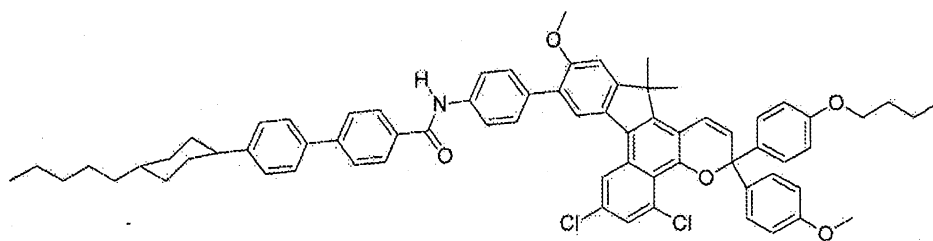
Bước 2

Bổ sung 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol (1,12 g) và axit 4-dodecylbenzensulfonic (0,10 g) vào dung dịch cloroform (20 mL) chứa sản phẩm từ Bước 5 (1,69 g) trong bình phản ứng. Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 18 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để thu được cặn dạng dầu. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và toluen với tỷ lệ 1:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa sản phẩm mong muốn được nhóm lại và được cô trong chân không để thu được cặn dạng dầu. Cặn dạng dầu này được tái kết tinh từ metanol. Chất rắn tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để thu được chất rắn màu kem (0,88 g). Phân tích NMR của chất rắn màu kem thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 12-brom-3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10-[4-hydroxybenzamido]-8-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4].naphto[1,2-*b*]pyran.

Bước 3

Sản phẩm từ Bước 2 (1,15 g) được hòa tan trong cloroform (20 mL) trong bình phản ứng. Bổ sung trietylamin (0,6 mL) sau đó là 4'-(4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-cacbonyl clorua từ Bước 4 của Ví dụ 2 (0,80 g). Hỗn hợp phản ứng được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 30 phút. Dung môi được loại bỏ trong chân không và cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và etyl axetat với tỷ lệ 9:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô. Cặn này được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và được bổ sung nhỏ giọt vào dung dịch metanol được khuấy mạnh. Chất kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô đến chất rắn màu tím (1,30 g). Phân tích NMR của chất rắn màu tím thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 12-brom-3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10-[4-(4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonoxy)benzamido]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-*b*]pyran.

Ví dụ 27



Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 4 của Ví dụ 10 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 1, 3,5-diclobromobenzen và 4-metoxybenzoyl clorua được sử dụng thay cho tribromobenzen và 4-triflometylbenzoyl clorua. Thu được chất rắn màu trắng đục làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 2,4-diclo-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat.

Bước 5

Hỗn hợp gồm 2,4-diclo-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat từ Bước 4 (5 g), NBS (2,7 g) và DMF (100 ml) được khuấy trong bình phản ứng và được gia nhiệt đến nhiệt độ 90°C. Hai giờ sau, hỗn hợp phản ứng tạo thành được rót vào nước (400 ml) và được chiết bằng etyl axetat/THF với tỷ lệ 1/1 (200 ml). Lớp hữu cơ được thu gom, được rửa bằng dung dịch nước natri bisulfit ba lần, được làm khô và được cô. Bổ sung metanol (100 ml) vào sản phẩm thu hồi. Sau khi lọc, thu được chất rắn màu trắng đục (4,4 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 10-brom-2,4-diclo-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat.

Bước 6

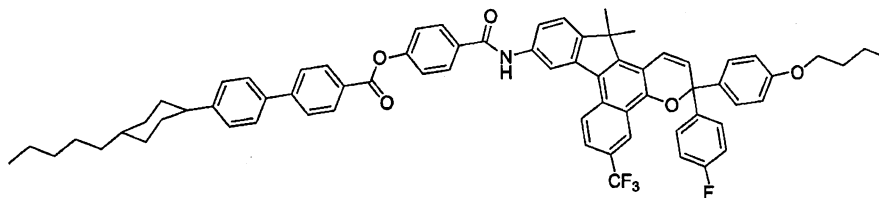
Hỗn hợp gồm 10-brom-2,4-diclo-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat từ Bước 5 (4,3 g), 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit (4,94 g), natri cacbonat (4 g), THF (200 ml), nước (20 ml) và tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) (1 g) được cho vào bình phản ứng và được khử khí bằng cách sục nitơ qua hỗn hợp này trong 10 phút. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 1 giờ và kali cacbonat (5 g) và etanol (50 ml) được bổ sung. Sau khi hồi lưu trong 8 giờ nữa, tiến hành chiết sử dụng THF và nước natri clorua bão hòa. Lớp hữu cơ tạo thành được thu gom, được rửa bằng 100 ml HCl 1 N ba lần, được rửa bằng 100 ml dung dịch nước natri sulfit 1 N một lần, được rửa bằng nước natri clorua bão hòa một lần, được làm khô trên magie sulfat và được cô. Cặn thu được được hòa tan trong toluen/THF với tỷ lệ 10/1 (200 ml) và sau đó chuyển qua cột được nhồi đầy silica gel. Dung dịch trong thu hồi được cô được bổ sung vào metanol và được khuấy trong nửa giờ. Chất rắn tạo thành được thu gom và

làm khô. Thu được chất rắn màu trắng đục (7,5 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với N-(4-(2,4-diclo-5-hydroxy-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)phenyl)-4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit.

Bước 7

N-(4-(2,4-diclo-5-hydroxy-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)phenyl)-4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit từ Bước 6 (3 g), 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-metoxiphenyl)prop-2-yn-1-ol (1,8 g), axit p-toluensulfonic (73 mg) và 1,2-dicloetan (50 ml) được bổ sung vào bình phản ứng. Hỗn hợp này được khuấy và được hồi lưu trong 4 giờ. Sau khi dung môi được loại bỏ, sản phẩm này được tinh chế bằng CombiFlash. Thu được chất rắn màu đen (2 g) làm sản phẩm. NMR thể hiện rằng cấu trúc này phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-metoxiphenyl)-10-[4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido]phenyl]-5,7-diclo-11-metoxi-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 28



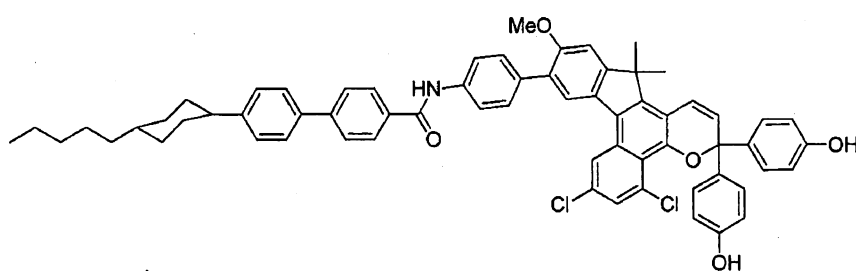
Bước 1

N-(8-brom-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)-4-hydroxybenzamid (5,00 g) từ Bước 1 của Ví dụ 26, kali cacbonat (5,10 g), 2-butanol (50 mL) và metanol (50 mL) được bổ sung vào bình đáy tròn và được khử khí trong 10 phút. Tetrakis(triphenyl)phosphin paladi (0) (0,55 g) được bổ sung và gia nhiệt đến hồi lưu trong môi trường khí nitơ trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được lọc qua bộ lọc XELIT®. Dịch lọc được cô và cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp etyl axetat và hexan với tỷ lệ 4:1 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô để thu được bột (4,00 g). Phân tích NMR của bột này thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 4-hydroxy-N-(5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)benzamid.

Bước 2

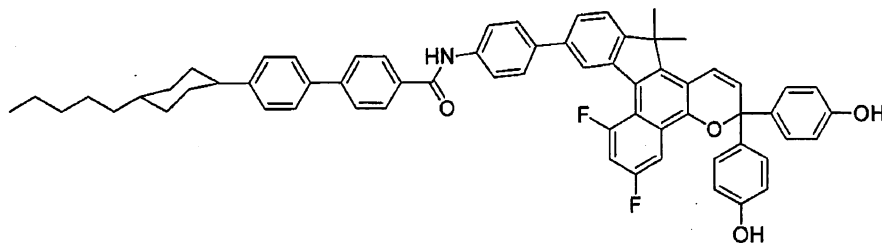
Quy trình của các Bước 2 và 3 của Ví dụ 26 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 2, sản phẩm của Bước 1 ở trên được sử dụng thay cho N-(8-brom-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-10-yl)-4-hydroxybenzamidit. NMR thể hiện rằng cấu trúc này phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10-[4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)oxy)benzamido]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-*b*]pyran.

Ví dụ 29



Các quy trình từ Ví dụ 27 được tuân theo ngoại trừ như sau trong Bước 7: 1,1-bis(4-((tetrahydro-2*H*-pyran-2-yl)oxy)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-metoxyphephenyl)prop-2-yn-1-ol và trước khi được đưa vào CombiFlash, sản phẩm này được hòa tan trong hỗn hợp dung môi gồm THF và metanol với pTSA (1 g) và được hồi lưu trong một giờ và được cô. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-bis(4-hydroxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diclo-11-metoxi-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-*b*]pyran.

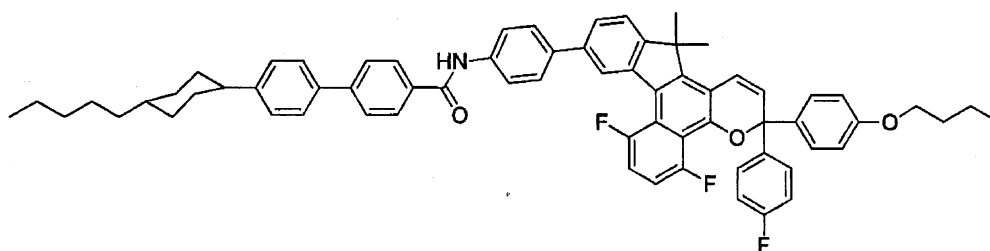
Ví dụ 30



Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 1, 2,4-diflobenzoyl clorua được sử dụng thay cho 4-triflometylbenzoyl clorua và trong Bước 6, 1,1-bis(4-((tetrahydro-2*H*-pyran-2-yl)oxy)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay

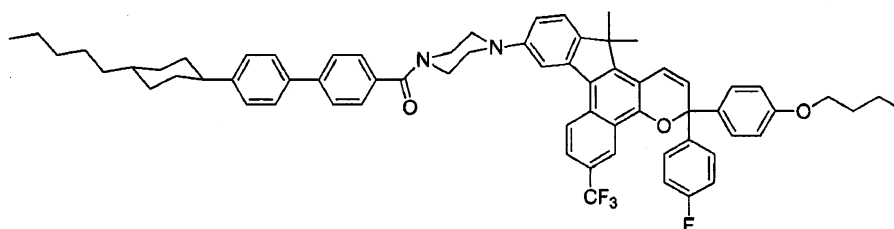
cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol và sau phản ứng và trước khi tách bằng cột, cặn này được hòa tan trong tetrahydrofuran và metanol có bổ sung axit p-toluensulfonic, được hồi lưu trong 1 giờ và được cô. Phân tích NMR của chất rắn màu xanh dương nhạt thu được thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3-bis(4-hydroxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-phenyl]-6,8-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 31



Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 1, 2,5-diflobenzoyl clorua được sử dụng thay cho 4-triflometylbenzoyl clorua. Phân tích NMR của chất rắn thu được thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-phenyl]-5,8-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 32



Bước 1

Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 5 của Ví dụ 10 được tuân theo.

Bước 2

Bổ sung 2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl (1,20 g), paladi (II) axetat (0,30 g) và 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat (5,10 g) từ Bước 5 của Ví dụ 10 vào dioxan (100 mL) và toluen (100 mL) được khử khí trong bình phản ứng, sau đó bổ sung 1-formylpiperazin (2,80 g) dưới dòng khí nito. Bổ sung natri *tert*-butoxit (2,80 g) và dung dịch này được gia nhiệt đến hồi lưu

trong 22 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng tetrahydrofuran. Dung dịch này được lọc qua bộ lọc XELIT® và dịch lọc được cô trong chân không. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp metylen clorua và etyl axetat với tỷ lệ 1:4 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô. Cặn này (1,25 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo. Phân tích NMR của cặn này thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 4-(8-brom-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)piperazin-1-cacbaldehyt.

Bước 3

4-(8-brom-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)piperazin-1-cacbaldehyt từ Bước 2 (0,69 g) và 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol (0,60 g) được hòa tan trong 1,2-dicloetan (20 mL) trong bình phản ứng. Bổ sung axit p-toluensulfonic (0,1 g) và dung dịch này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 18 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và dung môi được loại bỏ trong chân không. Cặn được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và diclometan với tỷ lệ 1:1 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô. Cặn này (0,75 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

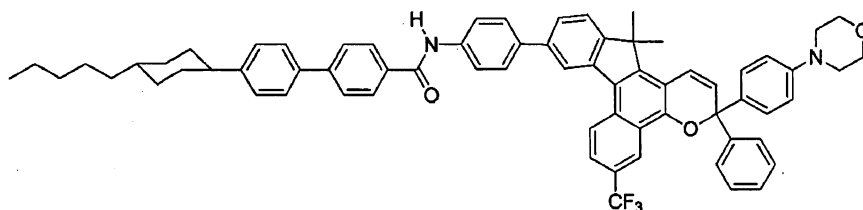
Bước 4

Sản phẩm của Bước 3, 4-(12-brom-3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-6-(triflometyl)-3,13-dihydrobenzo[h]indeno[2,1-f]chromen-10-yl)piperazin-1-cacbaldehyt (2,00 g) được hòa tan trong dioxan (30 mL) trong bình phản ứng. Bổ sung dung dịch nước HCl 10% (5 mL) và dung dịch này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được rót cẩn thận vào dung dịch nước natri bicacbonat bão hòa (300 mL). Lớp nước tạo thành được chiết bằng etyl axetat (300 mL). Dung dịch etyl axetat được làm khô bằng natri sulfat khan, được lọc và được cô để thu được cặn. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp etyl axetat và metanol với tỷ lệ 1:1 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô. Cặn này (1,00 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 5

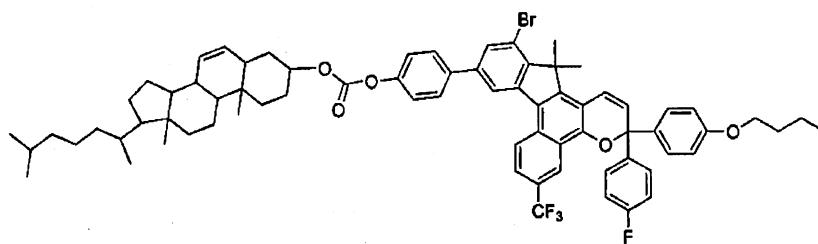
Quy trình từ Bước 3 của Ví dụ 26 được tuân theo sử dụng căn của Bước 4 ở trên thay cho 12-brom-3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10-[4-hydroxybenzamido]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran. NMR thể hiện rằng cấu trúc này phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[(4-(4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-yl)cacbonyl)piperazin-1-yl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 33



Các quy trình từ Ví dụ 14 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 6, 1-(4-N-morpholinophenyl)-1-(4-phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol. Phân tích NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-(N-morpholino)phenyl)-3-phenyl-10-[4-(4- (4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 34



Bước 1

Các quy trình từ Ví dụ 10 được tuân theo ngoại trừ là trong Bước 6, 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1,1-bis(4-metoxyphephenyl)prop-2-yn-1-ol và trong Bước 7, 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol được sử dụng thay cho 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacboxamit. Phân tích NMR của sản phẩm này thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10-(4-hydroxyphenyl)-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Bước 2

Bổ sung sản phẩm từ Bước 1, 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10-(4-hydroxyphenyl)-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran (1,00 g), vào bình phản ứng và được hòa tan trong diclometan (20 mL). Trietylamin (0,2 mL) được bổ sung sau đó bổ sung tiếp cholesteryl cloformat (0,90 g) và hỗn hợp phản ứng được khuấy trong 30 phút. Dung môi được loại bỏ trong chân không và cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và etyl axetat với tỷ lệ 19:1 làm dung dịch rửa giải. Các phân đoạn chứa vật liệu mong muốn được nhóm lại và được cô. Cặn này được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và được bổ sung nhỏ giọt vào metanol được khuấy mạnh. Chất kết tủa được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để thu được chất rắn màu tím. Phân tích NMR của chất rắn màu tím thể hiện rằng cấu trúc phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10-{4-[17-(1,5-dimetyl-hexyl)-10,13-dimetyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxyacbonxyloxy]phenyl}-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Phần 2 – Thử nghiệm đặc tính đổi màu theo ánh sáng

Phần 2A – Chuẩn bị trình tự thử nghiệm

Thử nghiệm được tiến hành với các hợp chất được mô tả trong các Ví dụ 1-3, 5, 7, và 10-34 theo cách dưới đây. Lượng hợp chất được tính toán để thu được dung dịch $1,5 \times 10^{-3}$ molal được bổ sung vào bình chứa 50 gam hỗn hợp monome gồm 4 phần bisphenol A dimetacrylat etoxyl hóa (BPA 2EO DMA), 1 phần poly(etylen glycol) 600 dimetacrylat, và 0,033 phần trăm trọng lượng 2,2'-azobis(2-metyl propionitril) (AIBN). Mỗi hợp chất được hòa tan vào hỗn hợp monome bằng cách khuấy và gia nhiệt nhẹ, nếu cần thiết. Sau khi thu được dung dịch trong, mẫu được khử khí trong lò chân không trong 5-10 phút ở 25 torr. Sử dụng ống tiêm, mẫu này được rót vào khuôn phẳng có kích thước bên trong là 2,2 mm $\pm$ 0,3 mm x 6 inch (15,24 cm) x 6 inch (15,24 cm). Khuôn được hàn kín và được đưa vào dòng khí thổi ngang, lò có thể được lập trình để điều chỉnh nhiệt độ từ 40°C đến 95°C ngắt quãng 5 giờ, giữ nhiệt độ ở 95°C, trong 3 giờ, điều chỉnh xuống 60°C ngắt quãng 2 giờ và sau đó giữ nhiệt độ ở 60°C, trong 16 giờ. Sau khi lưu hóa, khuôn được mở, và tấm polyme được cắt thành những mẫu thử nghiệm hình vuông 2 inch (5,1 cm) sử dụng lưỡi cưa kim cương.

Phần 2B – Thử nghiệm đáp ứng

Trước khi thử nghiệm đáp ứng trên ống đo lường quang học, các mẫu thử nghiệm trong Phần 2A được xử lý bằng cách bộc lộ chúng ra ánh sáng tử ngoại 365 nm trong 10 phút ở khoảng cách khoảng 14 cm so với nguồn sáng để hoạt hóa trước http://www.micropat.com/perl/di/psrecord.pl?ticket=025134169125&listid=1770020100719140056760&container_id=2079717&patnum=US7560124B2 các hợp chất đổi màu theo ánh sáng trong các mẫu thử. Chiếu tia UVA vào bề mặt mẫu được đo bằng phổ bức xạ kế Licor Model Li-1800 và được phát hiện là 22,2 Wat mỗi mét vuông. Sau đó các mẫu này được đặt dưới đèn halogen (500 W, 120V) trong khoảng 10 phút ở khoảng cách khoảng 36 cm so với đèn để tẩy trắng, hoặc làm bất hoạt các hợp chất đổi màu theo ánh sáng trong các mẫu này. Độ rọi ở mẫu này được đo bằng phổ bức xạ kế Licor và được phát hiện là 21,9 Klux. Sau đó các mẫu này được giữ trong môi trường bóng tối trong ít nhất là 1 giờ trước khi thử nghiệm để làm mát và tiếp tục phai màu về trạng thái nền.

Ống đo lường quang học được trang bị đèn hồ quang Newport Model #67005 300-watt Xenon, và bộ cấp điện Model 69911, khe được kiểm soát bằng máy tính tốc độ cao Vincent Associates (kiểu VS25S2ZM0R3 có bộ điều khiển VMM-D4), bộ lọc Schott 3 mm KG-2 band-pass, trong đó bức xạ bước sóng ngắn được loại bỏ, (các) bộ lọc mật độ trung bình để làm giảm ánh sáng từ đèn xenon, thấu kính ngưng tụ silic oxit nấu chảy để chuẩn trực chùm tia, và chất mang tế bào/mẫu nước oxit silic nấu chảy để duy trì nhiệt độ mẫu trong đó mẫu thử nghiệm để thử nghiệm được chèn vào. Nhiệt độ trong tế bào nước được kiểm soát bằng hệ thống tuần hoàn nước bơm trong đó nước đi qua cuộn dây đồng được đặt trong hồ chứa của chi tiết làm lạnh. Tế bào nước này được sử dụng để giữ các mẫu thử nghiệm chứa các tấm oxit silic nấu chảy ở mặt trước và quay mặt lại để loại bỏ sự thay đổi quang phổ khi hoạt hóa hoặc kiểm soát chùm ánh sáng. Nước được lọc chuyển qua tế bào nước này được duy trì ở nhiệt độ $72^{\circ}\text{F} \pm 2^{\circ}$ ($22^{\circ}\text{C} \pm 1^{\circ}$) để thử nghiệm đáp ứng đổi màu theo ánh sáng. Đồng hồ hẹn giờ Newport Model 689456 Digital Exposure được sử dụng để kiểm soát cường độ của đèn hồ quang xenon trong quá trình hoạt hóa mẫu.

Nguồn ánh sáng băng thông rộng để kiểm soát các kết quả đo đáp ứng được định vị theo cách vuông góc với bề mặt của tổ hợp tế bào. Các tín hiệu được gia tăng của các bước sóng khả kiến ngắn hơn thu được bằng cách thu gom và kết hợp ánh sáng

được lọc riêng rẽ từ đèn halogen tungsten 100-Wat (được kiểm soát bởi bộ cấp điện điện áp ổn định Lambda UP60-14) với sợi cáp quang đầu tách, 2 nhánh. Ánh sáng từ một phía của đèn halogen tungsten được lọc bằng bộ lọc Schott KG1 để hấp thụ nhiệt và bộ lọc Hoya B-440 để cho phép các bước sóng ngắn hơn đi qua. Phía bên kia của đèn được lọc bằng bộ lọc Schott KG1 hoặc không được lọc. Ánh sáng được thu gom bằng cách tập trung ánh sáng từ mỗi phía của đèn trên đầu riêng rẽ của sợi cáp quang đầu tách, 2 nhánh, và sau đó được kết hợp vào một nguồn sáng phát sinh từ đầu đơn của sợi cáp. Ống ánh sáng 4" được gắn vào đầu đơn của sợi cáp để đảm bảo hòa trộn thích hợp. Sau khi đi qua mẫu, ánh sáng được tập trung lại vào quả cầu tích hợp kích thước 2 inch (5,08cm) và nạp vào phổ bức xạ kế Ocean Optics S2000 bằng các sợi cáp quang. Phần mềm độc quyền Ocean Optics SpectraSuite và PPG được sử dụng để đo đáp ứng và kiểm soát hoạt động của ống đo lường quang học này.

Bức xạ cho thử nghiệm đáp ứng của các mẫu trong ống đo lường quang học được thiết lập ở bề mặt mẫu sử dụng thiết bị đo bức xạ International Light Research Radiometer, Model IL-1700 có hệ thống phát hiện chứa thiết bị Model SED033, bộ lọc B và thiết bị khuếch tán. Hiển thị đầu ra của thiết bị đo bức xạ được hiệu chỉnh (đặt các giá trị hệ số) dựa trên thiết bị định cỡ Licor 1800-02 Optical Calibration Calibrator để hiển thị các giá trị biểu diễn bằng Wat với mỗi mét vuông UVA. Bức xạ tại điểm mẫu cho thử nghiệm đáp ứng ban đầu được đặt ở 3,0 Wat với mỗi mét vuông UVA và xấp xỉ 8,6 Klux độ rọi. Trong quá trình thử nghiệm đáp ứng mẫu, nếu mẫu bị tối màu ngoài giới hạn khả năng phát hiện chấp nhận được, thì bức xạ được giảm xuống đến 1,0 Wat với mỗi mét vuông UVA hoặc mẫu được làm lại với nồng độ trong copolyme giảm còn một nửa.

Điều chỉnh đầu ra của đèn hồ quang xenon được lọc được thực hiện bằng cách gia tăng hoặc giảm dòng điện qua đèn bằng bộ điều khiển và/hoặc bằng cách bổ sung hoặc loại bỏ bộ lọc mật độ trung bình trong đường ánh sáng. Các mẫu thử nghiệm được bộc lộ ra ánh sáng hoạt hóa ở 31° bình thường tới bề mặt của nó trong khi vuông góc với ánh sáng kiểm tra.

Các mẫu được hoạt hóa trong trong tế bào nước được kiểm soát nhiệt độ 73°F (22,8°C) trong 30 phút, sau đó để phai màu trong điều kiện ánh sáng trong phòng cho đến khi sự thay đổi mật độ quang học của mẫu được hoạt hóa phai màu đến 1/4 của trạng thái tối màu nhất (bão hòa) hoặc trong tối đa 30 phút phai màu.

Sự thay đổi mật độ quang học (ÄOD) từ trạng thái trắng đến trạng thái tối màu được xác định bằng cách thiết lập độ truyền qua ban đầu, mở khe của đèn xeno để thu được bức xạ tử ngoại làm thay đổi các thấu kính thử nghiệm từ trạng thái trắng sang trạng thái được hoạt hóa (tức là tối màu). Dữ liệu được thu thập ở các quãng thời gian đã chọn, đo độ truyền qua ở trạng thái hoạt hóa, và tính toán sự thay đổi mật độ quang học theo công thức: $\Delta OD = \log(\% T_b / \% T_a)$, trong đó % T_b là phần trăm truyền qua ở trạng thái trắng, % T_a là phần trăm truyền qua ở trạng thái hoạt hóa và logarit là 10.

$A_{\max\text{-vis}}$ trong khoảng ánh sáng khả kiến là bước sóng trong phổ khả kiến mà tại đó độ hấp thụ tối đa của dạng được hoạt hóa của hợp chất đổi màu theo ánh sáng xuất hiện. $A_{\max\text{-vis}}$ được xác định bằng cách thử nghiệm diện tích thử nghiệm đổi màu theo ánh sáng trong phổ bức xạ kế Varian Cary 4000 UV-VISION hoặc thiết bị tương đương.

$\Delta OD/\text{Min}$, biểu diễn độ nhạy của đáp ứng của các hợp chất đổi màu theo ánh sáng với ánh sáng UV, được đo trong 5 giây đầu tiên bộc lộ ra UV, sau đó được thể hiện trên cơ sở mỗi phút. Mật độ quang học bão hòa (ΔOD ở điểm bão hòa) được thực hiện trong các điều kiện giống nhau ngoại trừ là bộc lộ ra UV được kéo dài liên tục trong tổng cộng 30 phút. Nửa thời gian phai màu là thời gian ngắt quãng tính bằng giây để ΔOD của dạng được hoạt hóa của hợp chất đổi màu theo ánh sáng trong diện tích thử nghiệm đạt được một nửa ΔOD được đo sau ba mươi phút, hoặc sau khi đạt được bão hòa hoặc gần bão hòa, ở nhiệt độ trong phòng sau khi loại bỏ nguồn sáng hoạt hóa, ví dụ, bằng cách đóng khe. Các kết quả được liệt kê trong Bảng I.

Bảng 1 – Kết quả thử nghiệm tiến hành đổi màu theo ánh sáng

Ví dụ #	$\lambda_{\max\text{-vis}}$ (nm)	Độ nhạy ($\Delta OD/\text{Min}$)	ΔOD ở bão hòa	T1/2 (giây)
1	592	0,56	0,71	122
2	629	0,45	0,34	44
3	556	0,65	0,62	62
5	602	0,45	0,35	47
7	456	0,48	0,85	168
10	568	0,30	0,13	19
11	577	0,35	0,16	23

12	538	0,49	0,36	46
13	576	0,44	0,37	51
14	572	0,53	0,41	49
15	610	0,42	0,30	43
16	607	0,46	0,43	65
17	573	0,41	0,25	33
18	616	0,47	0,45	62
19	610	0,48	0,44	60
20	558	0,40	0,21	27
21	564	0,52	0,45	54
22	560	0,50	0,36	42
23	563	0,45	0,34	45
24	562	0,52	0,53	74
25	584	0,46	0,20	18
26	552	0,44	0,21	22
27	580	0,77	0,70	82
28	564	0,52	0,39	45
29	587	1,06	0,77	61
30	588	0,48	0,22	22
31	547	0,75	0,85	96
32	577	0,55	0,44	53
33*	605	0,46	0,44	60
34	555	0,39	0,19	21

(*) Xác định rằng Ví dụ 33 được thử nghiệm sau khi bộc lộ ở mức 2,0 chứ không phải 6,7 W/m² để thu được kết quả đọc có thể đo được.

Phần 3 – Thử nghiệm đặc tính lưỡng sắc

Phần 3A – Chuẩn bị tế bào tinh thể lỏng

Tỷ lệ hấp thụ trung bình của mỗi hợp chất của Các ví dụ 1-8, 10-30, và 33 được xác định theo phương pháp CELL METHOD được mô tả như sau.

Tổ hợp tế bào có cấu hình dưới đây mua được từ Design Concepts, Inc. Mỗi tổ hợp tế bào được tạo thành từ hai nền thủy tinh đối diện cách nhau phần đệm hạt thủy tinh có đường kính 20 micron $\pm$ 1 micron. Bề mặt bên trong của mỗi nền thủy tinh có lớp phủ polyimide được định hướng trên đó để thu được liên kết của vật liệu tinh thể lỏng như được thảo luận dưới đây. Hai cạnh đối diện của nền thủy tinh được gắn bằng chất keo epoxy, hai cạnh còn lại để mở để nạp các chất.

Kẽ hở giữa hai nền thủy tinh của tổ hợp tế bào này được nạp dung dịch tinh thể lỏng chứa một trong số các hợp chất của các Ví dụ 1-33. Dung dịch tinh thể lỏng này được tạo thành bằng cách trộn các thành phần dưới đây với phần trăm trọng lượng được liệt kê dưới đây có gia nhiệt, nếu cần thiết, để hòa tan vật liệu thử nghiệm.

Vật liệu	Phần trăm trọng lượng
Licristal TM E7	97-99,5
Hợp chất ví dụ	0,5-3

Phần 3B – Thử nghiệm tế bào tinh thể lỏng

Sử dụng ống đo lường quang học để đo các đặc tính quang học của tế bào và xác định tỷ lệ hấp thụ cho mỗi vật liệu thử nghiệm. Tổ hợp tế bào được nạp được đặt trong ống đo lường quang học có nguồn sáng hoạt hóa (đèn hồ quang Oriel Model 66011 300-Watt Xenon phù hợp với Vincent Associates (kiểu VS25S2ZM0R3 với bộ điều khiển VMM-D4) lá chắn sáng được kiểm soát bằng máy tính tốc độ cao có thể đóng ngay tức khắc trong quá trình thu thập dữ liệu sao cho ánh sáng khác loại sẽ không cản trở quá trình thu thập dữ liệu, bộ lọc Schott 3 mm KG-1 band-pass, được loại bỏ bước sóng bức xạ ngắn, (các) bộ lọc mật độ trung bình để giảm cường độ và các thấu kính ngưng tụ để chuẩn trực chùm tia) được định vị ở góc 30° đến 35° tới bề mặt của tổ hợp tế bào.

Nguồn ánh sáng bằng thông rộng để kiểm soát các kết quả đo đáp ứng được định vị theo cách vuông góc với bề mặt của tổ hợp tế bào. Các tín hiệu được gia tăng của các bước sóng khả kiến ngắn hơn thu được bằng cách thu gom và kết hợp ánh sáng được lọc riêng rẽ từ đèn halogen tungsten 100-Watt (được kiểm soát bởi bộ cấp điện điện áp ổn định Lambda UP60-14) với sợi cáp quang đầu tách, 2 nhánh. Ánh sáng từ một phía của đèn halogen tungsten được lọc bằng bộ lọc Schott KG1 để hấp thụ nhiệt và bộ lọc Hoya B-440 để cho phép các bước sóng ngắn hơn đi qua. Phía bên kia của

đèn được lọc bằng bộ lọc Schott KG1 hoặc không được lọc. Ánh sáng được thu gom bằng cách tập trung ánh sáng từ mỗi phía của đèn trên đầu riêng rẽ của sợi cáp quang đầu tách, 2 nhánh, và sau đó được kết hợp vào một nguồn sáng phát sinh từ đầu đơn của sợi cáp. Ống ánh sáng 4" được gắn vào đầu đơn của sợi cáp để đảm bảo hòa trộn thích hợp.

Sự phân cực nguồn sáng thu được bằng cách đưa ánh sáng đi từ đầu đơn của cáp qua thiết bị phân cực Moxtek, Proflux Polarizer được đặt trong một máy tính điều khiển, bước quay động cơ (Model M-061-PD của Polytech, PI). Việc kiểm soát chùm tia được thiết lập sao cho một mặt phẳng phân cực (0°) vuông góc với mặt phẳng của ống đo lường quang học và mặt phẳng phân cực thứ hai (90°) song song với mặt phẳng của ống đo lường quang học. Các mẫu được chạy trong không khí, ở nhiệt độ trong phòng ($73^\circ \text{F} \pm 0,3^\circ \text{F}$ hoặc cao hơn ($22,8^\circ \text{C} \pm 0,1$)) được duy trì bởi hệ thống điều hòa không khí trong phòng hoặc tế bào không khí kiểm soát nhiệt độ.

Để tiến hành đo, tổ hợp tế bào và lớp phủ xếp chồng được bộc lộ ra tia UVA cường độ $6,7 \text{ W/m}^2$ của nguồn sáng hoạt hóa trong từ 5 đến 15 phút để hoạt hóa vật liệu thử nghiệm. Bước này được tiến hành với tất cả các Ví dụ ngoại trừ Ví dụ 33, nếu được thử nghiệm trong lớp phủ xếp chồng, lớp phủ này được bộc lộ ra tia UVA cường độ $2,0 \text{ W/m}^2$. Mức bộc lộ thấp hơn là cần thiết để thu được các kết quả có thể đo được. Bức xạ kế International Light Research Radiometer (Model IL-1700) có hệ thống phát hiện (thiết bị phát hiện Model SED033, bộ lọc B và thiết bị khuếch tán) được sử dụng để thay đổi bộc lộ trước mỗi thử nghiệm. Ánh sáng từ nguồn kiểm soát được phân cực đến mặt phẳng phân cực 0° sau đó được chuyển qua mẫu được phủ và tập trung vào quả cầu tích hợp kích thước 1 inch (2,54cm) và được liên kết với phổ bức xạ kế Ocean Optics S2000 sử dụng sợi cáp quang đơn chức năng. Thông tin về quang phổ sau khi đi qua mẫu thử được thu gom sử dụng Phần mềm độc quyền Ocean Optics SpectraSuite và PPG. Trong khi vật liệu đổi màu theo ánh sáng-lượng sắc được hoạt hóa, vị trí của thiết bị phân cực được quay đi quay lại để phân cực ánh sáng từ nguồn sáng kiểm soát đến mặt phẳng phân cực 90° và quay lại. Dữ liệu được thu gom trong khoảng từ 10 đến 300 giây ngắt quãng mỗi 5 giây trong quá trình hoạt hóa. Với mỗi thử nghiệm, việc quay thiết bị phân cực được điều chỉnh để thu thập dữ liệu theo thứ tự sau mặt phẳng phân cực: 0° , 90° , 90° , 0° và các góc tương tự.

Phổ hấp thụ thu được và được phân tích cho mỗi tổ hợp tế bào sử dụng phần mềm Igor Pro (của WaveMetrics). Sự thay đổi độ hấp thụ trong mỗi hướng phân cực cho mỗi tổ hợp tế bào được tính toán bằng cách trừ kết quả đo độ hấp thụ thời gian 0 (tức là, không được hoạt hóa) cho tổ hợp tế bào ở mỗi bước sóng được thử nghiệm. Các giá trị độ hấp thụ trung bình thu được trong vùng hoạt hóa trong đó đáp ứng của các Ví dụ 1-33 được bão hòa hoặc gần như bão hòa (tức là, các vùng trong đó độ hấp thụ không tăng hoặc tăng koong đáng kể qua thời gian) cho mỗi tổ hợp tế bào bằng cách chia độ hấp thụ trung bình tại mỗi thời điểm trong vùng này. Các giá trị độ hấp thụ trung bình trong khoảng bước sóng xác định trước tương ứng với $A_{\text{max-vis}} \pm 5$ nm được tách ra với phân cực 0° và 90° , và tỷ lệ hấp thụ cho mỗi bước sóng trong khoảng này được tính toán bằng cách chia độ hấp thụ trung bình lớn hơn cho độ hấp thụ trung bình nhỏ hơn. Với mỗi bước sóng được tách, các điểm dữ liệu từ 5 đến 100 được lấy trung bình. Sau đó tỷ lệ hấp thụ trung bình cho vật liệu thử nghiệm được tính toán bằng cách chia trung bình các tỷ lệ hấp thụ riêng rẽ này.

Đối với các Ví dụ được liệt kê trong Bảng 2, quy trình được mô tả ở trên được thực hiện ít nhất hai lần. Các giá trị trong Bảng cho tỷ lệ hấp thụ trung bình biểu diễn trung bình của các kết quả thu được từ các bước thực hiện được đo ở bước sóng đã nêu. Các kết quả của các thử nghiệm này có mặt trong Bảng 2 dưới đây.

Bảng 2 – Dữ liệu thử nghiệm tỷ lệ hấp thụ (AR)

Ví dụ # (nm)	Bước sóng	Tỷ lệ hấp thụ
1	592	6,56
2	629	8,04
3	555	6,86
4	556	4,75
5	601	6,96
6	601	5,98
7	456	8,68
8	600	7,51
10	565	6,15
11	572	3,80
12	536	6,85
13	579	6,84
14	565	6,89
15	605	7,36
16	606	5,49
17	571	6,23

18	610	8,71
19	605	7,11
20	555	6,60
21	562	5,03
22	560	5,58
23	560	6,84
24	561	7,25
25	579	8,16
26	557	5,71
27	584	7,06
28	567	5,07
29	587	8,49
30	587	7,24
33*	606	7,80

(*) Xác định rằng Ví dụ 33 (của Bảng 2) được thử nghiệm sau khi bọc lộn ở mức 2,0 chứ không phải 6,7 W/m² để thu được kết quả đọc có thể đo được.

Phần 3C – Chuẩn bị các lớp phủ cho các nền được phủ tinh thể lỏng được liên kết

Phần 3C-1 – Chuẩn bị Lớp lót

Bổ sung các vật liệu dưới đây vào chai thủy tinh màu hổ phách 250 mL được lắp thanh khuấy từ theo thứ tự và lượng thể hiện dưới đây:

Polyacrylat polyol (15,2334 g) (Chế phẩm D của Ví dụ 1 trong Patent Mỹ số 6,187,444);

Polyalkylencacbonat diol (40,0000 g) T-5652 của Asahi Kasei Chemicals;

DESMODUR[®] PL 340 (33,7615 g) của Bayer Material Science;

TRIXENE[®] B1 7960 (24,0734 g) của Baxenden);

Polyete được cải biến polydimetylsiloxan (0,0658 g) BYK[®]-333 của BYK-Chemie GmbH);

Chất xúc tác uretan (0,8777 g) KKAT[®] 348 của King Industries;

γ -Glycidoxypropyltrimetoxysilan (3,5109 g) A-187 của Momentive Performance Materials;

Chất ổn định ánh sáng (7,8994 g) TINUVIN[®] 928 của Ciba Specialty Chemicals; và

1-Metyl-2-pyrrolidinon (74,8250 g) của Sigma-Aldrich).

Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ để thu được dung dịch có 50 % trọng lượng chất rắn cuối cùng tính theo tổng trọng lượng của dung dịch này.

Phần 3C-2 – Chuẩn bị Thành phần lớp phủ liên kết quang học

Staralign 2200CP10 mua được của Ventico được pha loãng thành dung dịch 2% bằng dung môi xyclopentanon.

Phần 3C-3 – Thành phần và chế phẩm lớp phủ tinh thể lỏng

Các monome tinh thể lỏng (LCM) được sử dụng trong dung dịch monome bao gồm:

LCM-1 là 1-(6-(6-(6-(6-(6-(6-(6-(8-(4-(4-(4-(8-acryloyloxyhexyloxy)-benzoyloxy)phenyloxycarbonyl)phenoxy)octyloxy)-6-oxohexyloxy)-6-oxohexyloxy)-6-oxohexyloxy)-6-oxohexyloxy)-6-oxohexyloxy)-6-oxohexyloxy)-6-oxohexan-1-ol được điều chế theo các quy trình được mô tả trong Ví dụ 17 của Công bố Patent Mỹ số 2009/0323011.

LCM-2 là RM257 có bán trên thị trường được ghi nhận là 2-metyl-1,4-phenylen este của axit 4-(3-acryloyloxypropyloxy)-benzoic, mua được của EMD Chemicals, Inc., có công thức phân tử là $C_{33}H_{32}O_{10}$.

LCM-3 là RM105 có bán trên thị trường được ghi nhận là 4-metoxi-3-metylphenyl 4-(6-(acryloyloxy)hexyloxy)benzoat, mua được của EMD Chemicals, Inc., có công thức phân tử là $C_{23}H_{26}O_6$.

LCM-4 là RM82 có bán trên thị trường được ghi nhận là 2-metyl-1,4-phenylen bis(4-(6-(acryloyloxy)hexyloxy)benzoat), mua được của EMD Chemicals, Inc., có công thức phân tử là $C_{39}H_{44}O_{10}$.

Chế phẩm lớp phủ tinh thể lỏng (LCCF) được sản xuất như sau: bổ sung LCM-1 (1,3 g), LCM-2 (1,3 g), LCM-3 (1,3 g), LCM-4 (1,3 g), 4-metoxi-phenol (0,0078 g), và IRGACURE® 819 (0,078 g, chất khơi mào quang hóa của Ciba-Geigy Corporation) và các hợp chất Ví dụ được liệt kê trong Bảng 3 với nồng độ 6,3 mmol với mỗi 100 g LCCF vào bình thích hợp chứa hỗn hợp gồm anisol (3,4667 g) và chất phụ gia BYK®-346 (0,0347 g, được ghi nhận là polyete được cải biến poly-dimethylsiloxan của BYK Chemie, USA). Hỗn hợp tạo thành được khuấy trong 2 giờ ở nhiệt độ 80°C và làm mát đến khoảng 26°C.

Phần 3C-4: Chế phẩm lớp phủ chuyển tiếp (TLCF)

TLCF được điều chế như sau:

Các vật liệu sau đây được bổ sung vào chai thủy tinh màu hổ phách 50 mL được lắp thanh khuấy từ:

Hydroxy metacrylat (1,242 g) của Sigma-Aldrich;

Neopentyl glycol diacrylat (13,7175 g) SR247 của Sartomer;

Trimethylolpropan trimetacrylat (2,5825 g) SR350 của Sartomer;

DESMODUR[®] PL 340 (5,02 g) của Bayer Material Science;

IRGACURE[®]-819 (0,0628 g) của Ciba Speciality Chemicals;

DAROCUR[®] TPO (0,0628 g; của Ciba Speciality Chemicals,

Polybutyl acrylat (0,125 g),

3-Aminopropylpropyltrimetoxysilan (1,4570 g) A-1100 của Momentive Performance Materials; và

Etanol khan hoàn toàn 200 proof (1,4570 g) của Pharmaco-Aaper.

Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ.

Phần 3C-5: Chế phẩm lớp phủ bảo vệ (PCF)

PCF (lớp phủ cứng) được điều chế như sau: bổ sung Phần nạp 1 vào cốc sạch khô và được đặt trong bể nước đá ở nhiệt độ 5°C có khuấy. Bổ sung Phần nạp 2 và phản ứng tỏa nhiệt làm tăng nhiệt độ của hỗn hợp phản ứng đến 50°C. Nhiệt độ của hỗn hợp phản ứng tạo thành được làm mát đến nhiệt độ 20-25°C và Phần nạp 3 được bổ sung có khuấy. Bổ sung Phần nạp 4 để điều chỉnh độ pH từ khoảng 3 đến khoảng 5,5. Bổ sung Phần nạp 5 và dung dịch này được trộn trong nửa giờ. Dung dịch tạo thành được lọc qua bộ lọc nang 0,45 micron và được bảo quản ở nhiệt độ 4°C cho đến khi sử dụng.

Phần nạp 1

glycidoxypropyltrimetoxysilan	32,4 gam
-------------------------------	----------

metyltrimetoxysilan	345,5 gam
---------------------	-----------

Phần nạp 2

Dung dịch nước khử ion (DI) với axit nitric (axit nitric 1g/7000g)	292 gam
--	---------

Phần nạp 3

Dung môi DOWANOL® PM	228 gam
----------------------	---------

Phần nạp 4

TMAOH (tetrametylamoni hydroxit 25% trong metanol)	0,45 gam
--	----------

Phần nạp 5

Chất hoạt động bề mặt BYK®-306	2,0 gam
--------------------------------	---------

Phần 3C-6 -Các quy trình được sử dụng để điều chế Lớp phủ Stacks được ghi trong Bảng 3

Phần 3C-6A - Điều chế nền

Các nền hình vuông kích thước 5,08 cm x 5,08 cm x 0,318 cm (2 inch (in.) x 2 in. x 0,125 in.) được điều chế từ monome CR-39® mua được của Homalite, Inc. Mỗi nền được điều chế từ monome CR-39® được làm sạch bằng cách lau bằng vải thấm axeton và làm khô bằng dòng không khí.

Mỗi nền trong số các nền nêu trên được xử lý hào quang bằng cách cho qua băng tải trong thiết bị xử lý hào quang seri Tantec EST Systems Serial No. 020270 Power Generator HV 2000 với máy biến thế điện áp cao. Các nền này được bộc lộ ra hào quang được tạo thành bởi 53,99 KV, 500 Wat trong khi di chuyển trên băng tải với tốc độ 3 ft/phút (0,9144m/phút).

Phần 3C-6B - Quy trình phủ lớp lót

Dung dịch lớp lót được phủ lên các nền được thử nghiệm bằng cách phủ quay trên một phần bề mặt của nền được thử nghiệm bằng cách phân tán khoảng 1,5 ml dung dịch và quay các nền ở tốc độ 500 vòng mỗi phút (rpm) trong 3 giây, sau đó 1,500 rpm trong 7 giây, sau đó 2,500 rpm trong 4 giây. Thiết bị quay của Laurell Technologies Corp. (WS-400B-6NPP/LITE) được sử dụng để quay lớp phủ. Sau đó, các nền được phủ được đặt trong lò duy trì ở nhiệt độ 125°C trong 60 phút. Các nền được phủ được để nguội đến nhiệt độ khoảng 26°C. Nền này được xử lý hào quang bằng cách cho qua băng tải trong thiết bị xử lý hào quang seri Tantec EST Systems Serial No. 020270 Power Generator HV 2000 với máy biến thế điện áp cao. Lớp lót được làm khô được bộc lộ ra hào quang được tạo thành bởi 53,00 KV, 500 Wat trong khi di chuyển trên băng tải với tốc độ 3 ft/phút (0,9144m/phút).

Phần 3C-6C - Quy trình phủ các vật liệu liên kết quang học

Dung dịch Staralign 2200 nồng độ 2wt% được điều chế trong Phần 3C-2 được phủ lên các nền thử nghiệm bằng cách phủ quay trên một phần của bề mặt nền thử nghiệm bằng cách phân tán khoảng 1,0 ml dung dịch và quay các nền ở tốc độ 800 vòng mỗi phút (rpm) trong 3 giây, sau đó 1,000 rpm trong 7 giây, sau đó 4,000 rpm trong 4 giây. Thiết bị quay của Laurell Technologies Corp. (WS-400B-6NPP/LITE) được sử dụng để quay lớp phủ. Sau đó, các nền được phủ được đặt trong lò duy trì ở nhiệt độ 120°C trong 30 phút. Các nền được phủ được để nguội đến khoảng 26°C.

Lớp liên kết quang học được làm khô trên mỗi nền được sắp xếp trật tự ít nhất một phần bằng cách bộc lộ ra bức xạ tử ngoại phân cực tuyến tính sử dụng hệ Dymax® UVC-6 UV/ băng tải của Dymax® Corp. có công suất cung cấp là 400 Wat. Nguồn sáng được định hướng sao cho bức xạ được phân cực tuyến tính vuông góc với bề mặt của nền. Lượng bức xạ tử ngoại mà mỗi lớp liên kết quang học được bộc lộ được đo sử dụng thiết bị đo bức xạ năng lượng cao UV Power Puck™ của EIT Inc (Số seri 2066) và như sau: UVA 0,121 W/cm² và 5,857 J/cm²; UVB 0,013 W/cm² và 0,072 J/cm²; UVC 0 W/cm² và 0 J/cm²; và UW 0,041 W/cm² và 1,978 J/cm². Sau khi sắp xếp trật tự ít nhất một phần mạng polyme có khả năng định hướng quang học, các nền được để nguội đến nhiệt độ khoảng 26° C và được phủ kín.

Phần 3C-6D - Quy trình phủ cho chế phẩm phủ tinh thể lỏng

Mỗi chế phẩm phủ tinh thể lỏng ("LCCF") được mô tả trong Phần 3C-3 được phủ quay với tốc độ 300 vòng mỗi phút (rpm) trong 6 giây, sau đó 800rpm trong 6 giây trên vật liệu liên kết quang học được sắp xếp trật tự ít nhất một phần của Phần 6C trên các nền thử nghiệm. Mỗi nền hình vuông được phủ được đặt trong lò ở nhiệt độ 50°C trong 20 phút và mỗi thấu kính được phủ được đặt trong lò ở nhiệt độ 50°C trong 30 phút. Sau đó các nền được xử lý dưới đèn tử ngoại trong Buồng bức xạ BS-03 của Dr. Grubel UV-Elektronik GmbH trong môi trường khí nitơ trong 30 phút ở cường độ đỉnh UVA là 11-16 Wat/m². Sau khi xử lý các nền được phủ được hoàn thiện ở nhiệt độ 105°C trong 3 giờ.

Phần 3C-6E - Quy trình phủ lớp phủ chuyển tiếp

Dung dịch lớp phủ chuyển tiếp được điều chế trong Phần 3C-4 được phủ quay với tốc độ 1,400 vòng mỗi phút (rpm) trong 7 giây trên các nền được phủ LCCF đã xử

lý. Sau đó, các thấu kính này được xử lý dưới đèn tử ngoại trong Buồng bức xạ BS-03 của Dr. Dr. Grubel UV-Elektronik GmbH trong môi trường khí nitơ trong 30 phút ở cường độ đỉnh UVA là 11-16 Wat/m². Sau khi xử lý các nền được phủ này được hoàn thiện ở nhiệt độ 105°C trong 3 giờ.

Phần 3C-6F – Quy trình phủ lớp phủ bảo vệ (lớp phủ cứng)

Dung dịch lớp phủ cứng được điều chế trong Phần 3C-5 được phủ quay với tốc độ 2,000 vòng mỗi phút (rpm) trong 10 giây trên các nền được phủ keo đã được xử lý. Sau khi xử lý các nền được phủ này được hoàn thiện ở nhiệt độ 105°C trong 3 giờ.

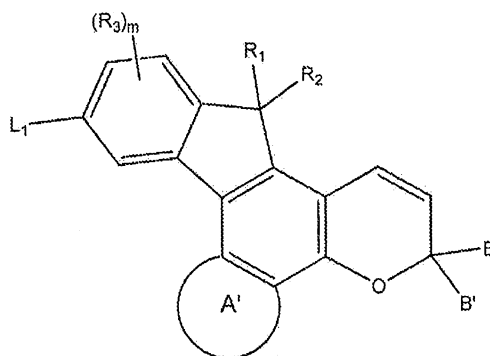
Bảng 3 – Các kết quả tỷ lệ hấp thụ với các lớp phủ Stack khác nhau

Ví dụ #	Lớp lót	Lớp liên kết	LCCF	Lớp keo	Lớp phủ cứng	AR
8		X	X			6,18
13		X	X			6,61
12		X	X			5,38
17		X	X			5,49
18		X	X			7,14
8		X	X	X		5,96
17		X	X	X		5,32
18		X	X	X		7,05
13		X	X		X	6,53
33	X	X	X	X		7,12
12	X	X	X	X		5,24
17	X	X	X	X		5,13
33	X	X	X			7,62
33	X	X	X	X	X	7,13
12	X	X	X	X	X	4,77

Sáng chế đã được mô tả có tham khảo các chi tiết của các phương án cụ thể của nó. Không dự định rằng các chi tiết này làm giới hạn phạm vi của sáng chế ngoại trừ được bao gồm trong Yêu cầu bảo hộ.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức I dưới đây:



Công thức 1

trong đó:

A' được chọn từ nhóm bao gồm heteroaryl tùy ý được thế và aryl tùy ý được thế trong đó A' tùy ý được thế bởi L₂;

Mỗi R₁ và R₂ độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, hydroxy và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm heteroalkyl tùy ý được thế, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, halogen, amino tùy ý được thế, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkoxy tùy ý được thế, và aminocacbonyl, hoặc R₁ và R₂ có thể cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm oxo, xycloalkyl tùy ý được thế, và heteroxycloalkyl tùy ý được thế; và

R₃ mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm formyl, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, arylcacbonyl, aryloxycacbonyl, aminocacbonyloxy, alkoxycacbonylamino, aryloxycacbonylamino, axit boronic, các este của axit boronic, xycloalkoxycacbonylamino, heteroxycloalkyloxycacbonylamino, heteroaryloxycacbonylamino, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, halogen, xycloalkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, và amino tùy ý được thế;

m là số nguyên được chọn từ 0 đến 3;

mỗi B và B' độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L₃, hydro, halogen, và các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm metallocenyl, alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, alkynyl tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế, và xycloalkyl tùy ý được thế, hoặc trong đó B và B' cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế; và

L₁, L₂, và L₃ mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm kéo dài đối ảnh hoặc không đối ảnh có công thức:

$-[S_1]_c-[Q_1-[S_2]_d]_d'-[Q_2-[S_3]_e]_e'-[Q_3-[S_4]_f]_f-S_5-P$ trong đó:

(a) Q₁, Q₂, và Q₃ mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

trong đó các phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm P, các mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly(C₁-C₁₈ alkoxy), C₁-C₁₈ alkoxyacetyl, C₁-C₁₈ alkylacetyl, C₁-C₁₈ alkoxyacetyloxy, aryloxyacetyloxy, perflu(C₁-C₁₈)alkoxy, perflu(C₁-C₁₈)alkoxyacetyl, perflu(C₁-C₁₈)alkylacetyl, perflu(C₁-C₁₈)alkylamino, di-(perflu(C₁-C₁₈)alkyl)amino, perflu(C₁-C₁₈)alkylthio, C₁-C₁₈ alkylthio, C₁-C₁₈ axetyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl, C₃-C₁₀ xycloalkoxy, C₁-C₁₈ alkyl mạch thẳng, và C₁-C₁₈ alkyl mạch nhánh;

trong đó C₁-C₁₈ alkyl mạch thẳng và C₁-C₁₈ alkyl mạch nhánh này được thế một lần bằng nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xyano, halogen, và C₁-C₁₈ alkoxy; hoặc

trong đó C₁-C₁₈ alkyl mạch thẳng và C₁-C₁₈ alkyl mạch nhánh này được thế nhiều lần bằng ít nhất hai nhóm độc lập được chọn từ nhóm bao gồm halogen, -M(T)_(t-1) và -M(OT)_(t-1), trong đó M được chọn từ nhóm bao gồm nhôm, antimon, tantali, titan, zirconi và silicon, T được chọn từ các gốc chức hữu cơ, các gốc hydrocarbon chức hữu cơ, các gốc hydrocarbon béo và các gốc hydrocarbon thơm, và t là hóa trị của M;

(b) mỗi c, d, e, và f độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 20; và mỗi S₁, S₂, S₃, S₄, và S₅ độc lập được chọn mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm được chọn từ nhóm bao gồm:

(i) alkylen tùy ý được thế, haloalkylen tùy ý được thế, $-\text{Si}(\text{CH}_2)_g-$, và $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$, trong đó g mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 20; h mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 16; và các phần tử thế cho alkylen và haloalkylen độc lập được chọn từ nhóm bao gồm $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkyl và aryl;

(ii) $-\text{N}(\text{Z})-$, $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$, $-\text{C}(\text{Z})=\text{N}-$, $-\text{C}(\text{Z}')_2-\text{C}(\text{Z}')_2-$, và liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkyl và aryl, và Z' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkyl và aryl; và

(iii) $-\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})-$, $-\text{N}=\text{N}-$, $-\text{S}-$, $-\text{S}(=\text{O})-$, $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O})-$, $-(\text{O}=\text{S}(=\text{O})\text{O})\text{O}-$ và gốc $\text{C}_1\text{-C}_{24}$ alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh, gốc $\text{C}_1\text{-C}_{24}$ alkylen này không được thế, được thế một lần bằng xyano hoặc halogen, hoặc được thế nhiều lần bằng halogen,

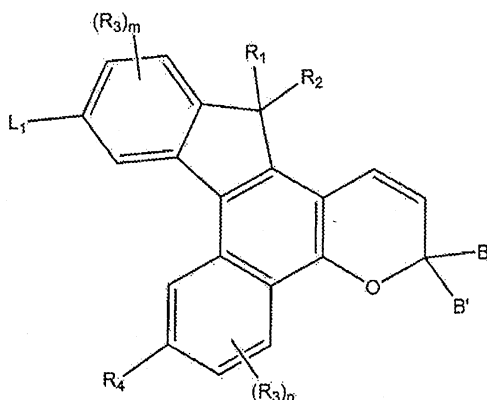
với điều kiện là nếu hai đơn vị đậm chứa các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau thì các đơn vị đậm được liên kết sao cho các nguyên tử khác loại không được liên kết trực tiếp với nhau, mỗi liên kết giữa S_1 và hợp chất có công thức I không có hai các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau, và liên kết giữa S_5 và P không có hai các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau;

(c) Mỗi lần xuất hiện P độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydroxy, amino, $\text{C}_2\text{-C}_{18}$ alkenyl, $\text{C}_2\text{-C}_{18}$ alkynyl, azido, silyl, siloxy, silylhydrua, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, thio, isoxyanato, thiolsoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, 2-(acryloyloxy)ethylcacbamyl, 2-(metacryloyloxy)ethylcacbamyl, aziridinyl, allyloxycacbonyloxy, epoxy, axit cacboxylic, este cacboxylic, acryloylamino, metacryloylamino, aminocacbonyl, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl aminocacbonyl, aminocacbonyl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyloxycacbonyloxy, halocacbonyl; hydro, aryl, hydroxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkoxy, amino($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkylamino, di-($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkylamino, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkoxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy, nitro, poly($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl ete, ($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, polyetylenoxy, polypropylenoxy, etylen, acryloyl, acryloyloxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, metacryloyl, metacryloyloxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, 2-cloacryloyl, 2-phenylacryloyl, acryloyloxyphenyl, 2-cloacryloylamino, 2-phenylacryloylaminocacbonyl, oxetanyl, glycidyl, xyano, isoxyanato($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, este của axit itaconic, vinyl ete, vinyl este, dẫn xuất styren,

polyme tinh thể lỏng mạch chính và mạch bên, dẫn xuất siloxan, dẫn xuất etylenimin, dẫn xuất axit maleic, dẫn xuất maleimit, dẫn xuất axit fumaric, dẫn xuất axit xinamic không được thế, dẫn xuất axit xinamic được thế bởi ít nhất một trong số các nhóm methyl, metoxy, xyano và halogen, và các nhóm hóa trị một hoặc hóa trị hai đối ảnh hoặc không đối ảnh được thế hoặc không được thế được chọn từ nhóm bao gồm gốc steroid, gốc terpenoit, gốc alkaloit và hỗn hợp của chúng, trong đó các phần tử thế này độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1-C_{18} alkyl, C_1-C_{18} alkoxy, amino, C_3-C_{10} xycloalkyl, C_1-C_{18} alkyl(C_1-C_{18})alkoxy, flo(C_1-C_{18})alkyl, xyano, xyano(C_1-C_{18})alkyl, xyano(C_1-C_{18})alkoxy hoặc hỗn hợp của chúng, hoặc P là cấu trúc có từ 2 đến 4 nhóm phản ứng hoặc P là tiền chất polyme hóa hoán vị mở vòng không được thế hoặc được thế hoặc P là hợp chất đổi màu theo ánh sáng được thế hoặc không được thế; và

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

2. Hợp chất theo điểm 1 có công thức IA:



Công thức IA

trong đó:

R_4 được chọn từ nhóm bao gồm hydro, R_3 và L_2 ; và

n là số nguyên được chọn từ 0 đến 3

tốt hơn là trong đó:

mỗi R_1 và R_2 độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, hydroxy, và các nhóm đối ảnh và không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm heteroalkyl tùy ý được thế, alkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, halogen, amino tùy ý được thế, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkoxy tùy ý được thế, và aminocacbonyl hoặc R_1 và R_2 có thể cùng với các nguyên tử

ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm oxo, xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

R_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm bao gồm formyl, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, arylcacbonyl, aryloxcacbonyl, alkyl tùy ý được thế, este của axit boronic, halogen, xycloalkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế và amino tùy ý được thế;

mỗi m và n độc lập là số nguyên được chọn từ 0 đến 2;

mỗi B và B' độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L_3 hydro, halogen, các nhóm đối ảnh hoặc không đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, heteroalkyl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, và xycloalkyl tùy ý được thế, hoặc trong đó B và B' cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế; và

L_1 , L_2 , và L_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm kéo dài đối ảnh hoặc không đối ảnh có công thức:

$-[S_1]_c-[Q_1-[S_2]_d]_a-[Q_2-[S_3]_e]-[Q_3-[S_4]_f]_r-S_5-P$ trong đó:

(a) Q_1 , Q_2 , và Q_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế và heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

trong đó các nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm P, các mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly(C_1-C_{12} alkoxy), C_1-C_{12} alkoxycacbonyl, C_1-C_{12} alkylcacbonyl, perflo(C_1-C_{12})alkoxy, perflo(C_1-C_{12})alkoxycacbonyl, perflo(C_1-C_{12})alkylcacbonyl, C_1-C_{18} axetyl, C_3-C_7 xycloalkyl, C_3-C_7 xycloalkoxy, C_1-C_{12} alkyl mạch thẳng, và C_1-C_{12} alkyl mạch nhánh,

trong đó C_1-C_{12} alkyl mạch thẳng và C_1-C_{12} alkyl mạch nhánh này được thế một lần bằng nhóm được chọn từ nhóm bao gồm halogen, C_1-C_{12} alkoxy, hoặc

trong đó C_1-C_{12} alkyl mạch thẳng và C_1-C_{12} alkyl mạch nhánh này được thế nhiều lần bằng ít nhất hai nhóm độc lập được chọn từ halogen;

(b) mỗi c, d, e, và f độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 10; và mỗi S_1 , S_2 , S_3 , S_4 , và S_5 độc lập được chọn mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm được chọn từ:

(i) alkylen được thế hoặc không được thế, haloalkylen được thế hoặc không được thế, $-\text{Si}(\text{CH}_2)_9-$, và $-(\text{Si}[(\text{CH}_3)_2]\text{O})_h-$, trong đó g mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 10; h mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 8; và các nhóm thế cho alkylen và haloalkylen độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl và phenyl;

(ii) $-\text{N}(\text{Z})-$, $-\text{C}(\text{Z})=\text{C}(\text{Z})-$, và liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl và phenyl; và

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

với điều kiện là nếu hai đơn vị đậm chứa các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau thì các đơn vị đậm được liên kết sao cho các nguyên tử khác loại không được liên kết trực tiếp với nhau, mỗi liên kết giữa S_1 và hợp chất có công thức IA không có hai các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau, và liên kết giữa S_5 và P không có hai các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau;

(c) P mỗi lần xuất hiện, được chọn từ nhóm bao gồm hydroxy, amino, C_2 - C_{12} alkenyl, C_2 - C_{12} alkenyl, silyl, siloxy, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, isoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, epoxy, axit cacboxylic, este cacboxylic, C_1 - C_{12} alkyloxycacbonloxy, halocacbonyl, hydro, aryl, hydroxy(C_1 - C_{12})alkyl, C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, etylen, acryloyl, acryloyloxy(C_1 - C_{12})alkyl, metacryloyl, metacryloyloxy(C_1 - C_{12})alkyl, oxetanyl, glycidyl, vinyl ete, các dẫn xuất siloxan, không được thế các dẫn xuất axit xinamic, các dẫn xuất axit xinamic được thế bởi ít nhất một trong số metyl, metoxy, xyano và halogen, và các nhóm hóa trị một hoặc hóa trị hai đối ảnh hoặc không đối ảnh được thế hoặc không được thế được chọn từ các gốc steroid, trong đó mỗi nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, amino, C_3 - C_7 xycloalkyl, C_1 - C_{12} alkyl(C_1 - C_{12})alkoxy, hoặc flo(C_1 - C_{12})alkyl, hoặc P là cấu trúc có từ 2 đến 4 nhóm phản ứng; và

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

tốt hơn là trong đó:

mỗi R_1 và R_2 độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydro, hydroxy, và các nhóm đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm heteroalkyl tùy ý được thế, alkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế, halogen, cacboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkoxy tùy ý được thế, và aminocacbonyl hoặc R_1 và R_2 có thể cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm oxo và xycloalkyl tùy ý được thế; và R_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm bao gồm alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, alkyl tùy ý được thế, este của axit boronic, halogen, xycloalkyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, alkoxy tùy ý được thế, heteroxycloalkyl tùy ý được thế và amino tùy ý được thế;

mỗi m và n độc lập là số nguyên được chọn từ 0 đến 2;

mỗi B và B' độc lập được chọn từ nhóm bao gồm L_3 , hydro, các nhóm đối ảnh được chọn từ nhóm bao gồm alkyl tùy ý được thế, alkenyl tùy ý được thế, aryl tùy ý được thế, heteroaryl tùy ý được thế, và xycloalkyl tùy ý được thế, hoặc trong đó B và B' cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ nhóm bao gồm xycloalkyl tùy ý được thế;

L_1 , L_2 , và L_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm kéo dài đối ảnh hoặc không đối ảnh có công thức:

$[S_1]-[Q_1-[S_2]_n]_d-[Q_2-[S_3]_e]_e-[Q_3-[S_4]_f]_f-S_5-P$ trong đó:

(a) Q_1 , Q_2 , và Q_3 mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm bao gồm aryl tùy ý được thế và heteroaryl tùy ý được thế, xycloalkyl tùy ý được thế và heteroxycloalkyl tùy ý được thế;

trong đó các nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm P , C_1 - C_6 alkoxycacbonyl, perflo(C_1 - C_6)alkoxy, C_3 - C_7 xycloalkyl, C_3 - C_7 xycloalkoxy, C_1 - C_6 alkyl mạch thẳng, và C_1 - C_6 alkyl mạch nhánh,

trong đó C_1 - C_6 alkyl mạch thẳng và C_1 - C_6 alkyl mạch nhánh này được thế một lần bằng nhóm được chọn từ nhóm bao gồm halogen và C_1 - C_{12} alkoxy, hoặc

trong đó C_1 - C_6 alkyl mạch thẳng và C_1 - C_6 alkyl mạch nhánh này được thế nhiều lần bằng ít nhất hai nhóm độc lập được chọn từ halogen;

(b) mỗi c , d , e , và f độc lập được chọn từ số nguyên từ 1 đến 10; và mỗi S_1 , S_2 , S_3 , S_4 , và S_5 độc lập được chọn mỗi lần xuất hiện từ đơn vị đệm được chọn từ nhóm bao gồm:

(i) alkylen được thế hoặc không được thế;

(ii) $-N(Z)-$, $-C(Z)=C(Z)-$, và liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro và C_1-C_6 alkyl; và

(iii) $-O-$, $-C(=O)-$, $-C\equiv C-$, và $-N=N-$, $-S-$;

với điều kiện là nếu hai đơn vị đậm chứa các nguyên tử khác loại được liên kết với nhau thì các đơn vị đậm được liên kết sao cho các nguyên tử khác loại của đơn vị đậm thứ nhất không được liên kết trực tiếp với các nguyên tử khác loại của đơn vị đậm thứ hai, và

với điều kiện là nếu S_1 và S_5 được liên kết lần lượt với công thức I và P, thì chúng được liên kết sao cho hai các nguyên tử khác loại không được liên kết trực tiếp với nhau;

(c) P mỗi lần xuất hiện, độc lập được chọn từ nhóm bao gồm hydroxy, amino, C_2-C_6 alkenyl, siloxy, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, isoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, epoxy, axit cacboxylic, este cacboxylic, C_1-C_6 alkyloxycacboniloxy, hydro, aryl, hydroxy(C_1-C_6)alkyl, C_1-C_6 alkyl, etylen, acryloyl, acryloyloxy(C_1-C_{12})alkyl, oxetanyl, glycidyl, vinyl ete, các dẫn xuất siloxan, và các nhóm hóa trị một hoặc hóa trị hai đối ảnh hoặc không đối ảnh được thế hoặc không được thế được chọn từ nhóm bao gồm các gốc steroid, trong đó mỗi nhóm thế độc lập được chọn từ nhóm bao gồm C_1-C_6 alkyl, C_1-C_6 alkoxy, amino, C_3-C_7 xycloalkyl.

và thậm chí tốt hơn nữa là mỗi R_1 và R_2 độc lập được chọn từ nhóm bao gồm metyl, etyl, propyl và butyl; R_3 và R_4 mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm bao gồm metyl, etyl, bromo, clo, flo, metoxy, etoxy và CF_3 , mỗi B và B' độc lập được chọn từ nhóm bao gồm phenyl được thế bằng một hoặc nhiều nhóm độc lập được chọn từ nhóm bao gồm aryl, heteroaryl, heteroxycycloalkyl, alkyl, alkenyl, alkynyl, alkoxy, halogen, amino, alkylcarbonyl, cacboxy, và alkyloxycarbonyl; và với L_1 : Q_1 là aryl không được thế; e' là 1 hoặc 2; e mỗi lần xuất hiện là 1; S_3 mỗi lần xuất hiện là liên kết đơn; Q_2 mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ aryl tùy ý được thế; f là 1; f là 1; S_4 là liên kết đơn; và Q_3 là xycloalkyl tùy ý được thế; S_5 là $-(CH_2)_g-$, trong đó g là số nguyên từ 1 đến 20; và P là hydro.

3. Hợp chất theo điểm 1, trong đó L_1 được chọn từ nhóm bao gồm:

4-[4-(4-butyl-xyclohexyl)-phenyl]-xyclohexyloxy;

4"-butyl-[1,1',4',1'']terxyclohexan-4-yloxy;
 4-[4-(4-butyl-phenyl)-xyclohexyloxycacbonyl]-phenoxy;
 4'-(4-butyl-benzoyloxy)-biphenyl-4-cacbonoxyloxy;
 4-(4-pentyl-phenylazo)-phenylcacbamoyl;
 4-(4-dimethylamino-phenylazo)-phenylcacbamoyl;
 4-[5-(4-propyl-benzoyloxy)-pyrimidin-2-yl]-phenyl;
 4-[2-(4'-metyl-biphenyl-4-cacbonoxyloxy)-1,2-diphenyl-etoxyacacbonyl]-phen-yl;
 4-(1,2-diphenyl-2-{3-[4-(4-propyl-benzoyloxy)-phenyl]-acryloyloxy}-etoxyacacbonyl)-phenyl;
 4-[4-(4-(4-[3-(6-(4-[4-(4-nonyl-benzoyloxy)-phenoxyacacbonyl]-phenoxy})-hexyloxycacbonyl)propionyloxy]-benzoyloxy}-benzoyloxy)phenyl]-piperazin-1-yl;
 4-[4-(4-{4-[4-(4-nonyl-benzoyloxy)-benzoyloxy]-benzoyloxy}-benzoyloxy)-phenyl]-piperazin-1-yl;
 4-(4'-propyl-biphenyl-4-yletynyl)-phenyl;
 4-(4-flo-phenoxyacacbonoxyloxy)-piperidin-1-yl;
 2-[17-(1,5-dimetyl-hexyl)-10,13-dimetyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxy]-indan-5-yl;
 4-[17-(1,5-dimetyl-hexyl)-10,13-dimetyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxycacbonoxyloxy]-piperidin-1-yl;
 4-(biphenyl-4-cacbonoxyloxy)-piperidin-1-yl;
 4-(naphtalen-2-cacbonoxyloxy)-piperidin-1-yl;
 4-(4-phenylcacbamoyl-phenylcacbamoyl)-piperidin-1-yl;
 4-(4-(4-phenylpiperidin-1-yl)-benzoyloxy)-piperidin-1-yl;
 4-butyl-[1,1';4',1'']terphenyl-4-yl;
 4-(4-pentadecafloheptyloxy-phenylcacbamoyl)-benzyloxy;
 4-(3-piperidin-4-yl-propyl)-piperidin-1-yl;
 4-(4-{4-[17-(1,5-dimetyl-hexyl)-10,13-dimetyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenantren-3-yloxycacbonoxyloxy]-benzoyloxy}-phenoxyacacbonyl)phenoxymetyl;

4-[4-(4-xyclohexyl-phenylcacbamoyl)-benzyloxy]-piperidin-1-yl;
 4-[4-(4-xyclohexyl-phenylcacbamoyl)-benzoyloxy]-piperidin-1-yl;
 N-{4-[(4-pentyl-benzyliden)amino]-phenyl}-axetamidyl;
 4-(3-piperidin-4-yl-propyl)piperidin-1-yl;
 4-(4-hexyloxy-benzoyloxy)-piperidin-1-yl;
 4-(4'-hexyloxy-biphenyl-4-cacbonyloxy)-piperidin-1-yl;
 4-(4-butyl-phenylcacbamoyl)-piperidin-1-yl;
 4-[4-[4-[4-piperidinyl-4-oxy]-phenyl]phenoxy)piperidin-4-yl;
 4-(4-(9-(4-butylphenyl)-2,4,8,10-tetraoxaspiro[5.5]undec-3-yl)phenyl)piperazin-1-yl;
 4-(6-(4-butylphenyl)cacbonyloxy-(4,8-dioxabixyclo[3.3.0]oct-2-yl))oxycacbonylphenyl;
 1-{4-[5-(4-butyl-phenyl)-[1,3]dioxan-2-yl]-phenyl}-4-metyl-piperazin-1-yl;
 4-(7-(4-propylphenylcacbonyloxy)bixyclo[3.3.0]oct-2-yl)oxycacbonylphenyl;
 4-[17-(1,5-dimetyl-hexyl)-10,13-dimetyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]phenanthren-3-yloxycacbonyloxy;
 (4-trans-(4-pentylxyclohexyl)benzamido)phenyl;
 (4-(4-trans-(4-pentylxyclohexyl)phenoxy)cacbonyl)phenyl;
 4-(4-(4-trans-(4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl;
 4-(((trans-(4'-pentyl-[1,1'-bi(xyclohexan)]-4-yl)oxy)cacbonyl)phenyl;
 4-(4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl;
 4-(((4(4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)oxy)benzamido;
 4-(4'-(4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)piperazin-1-yl;
 4-(4-(4-(4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-2-(triflometyl)phenyl;
 2-metyl-4-trans-(4-((4'-trans-(4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-yloxy)-cacbonyl)xyclohexancacboxamido)phenyl;
 4'-((1R,1'S,4R,4'R)-4'-pentylbi(xyclohexan-4-)cacbonyloxy)biphenyl-cacbonyloxy;

4-(((3S,8S,9S,10R,13R,14S,17R)-10,13-dimethyl-17-((R)-6-methylheptan-2-yl)-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]-phenanthren-3-yloxy)cacbonyl)piperazin-1-yl; và

4-((S)-2-metylbutoxy)phenyl)-10-(4-(((3R,3aS,6S,6aS)-6-(4'-trans-(4-pentylxyclohexyl)biphenylcacbonyloxy)hexahydrofuro[3,2-b]furan-3-yloxy)cacbonyl)-phenyl.

4. Hợp chất theo điểm 1 được chọn từ nhóm bao gồm:

3,3-Bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzamido)-phenyl]-13,13-dimetyl-12-brom-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypheyl)-10-[4-((4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenoxy)-cacbonyl)phenyl]-6,13,13-trimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-11,13,13-trimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypheyl)-10-[4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzamido)-phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxypheyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxypheyl)-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-((4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenoxy)cacbonyl)phenyl]-12-brom-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenoxy)cacbonyl)phenyl]-12-brom-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-piperidinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-12-brom-6,7-dimetoxy-11,13,13-trimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypyphenyl)-10,12-bis[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naptho[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxypyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5,7-diflo-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-metoxypyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-Phenyl-3-(4-morpholinophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)-phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-flophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-6-triflometyl-12-brom-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-flophenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]-naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxyphenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-13,13-dimetyl-3-(4-morpholinophenyl)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-(4-(4-Metoxyphenyl)piperazin-1-yl)phenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3-phenyl-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(((trans,trans-4'-pentyl-[1,1'-bi(xyclohexan)]-4-yl)oxy)cacbonyl)phenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Flophenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxyphenyl)-13,13-dimetyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3-(4-(triflometoxy)phenyl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-hydroxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)phenyl]-6-triflometyl-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]-naphto[1,2-b]pyran;

12-brom-3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimethyl-10-(4-((4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)oxy)benzamido)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-5,7-diclo-11-metoxo-3-(4-metoxyphehyl)-13,13-dimethyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)-phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimethyl-10-(4-((4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)oxy)benzamido)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

5,7-diclo-3,3-bis(4-hydroxyphenyl)-11-metoxo-13,13-dimethyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

6,8-diclo-3,3-bis(4-hydroxyphenyl)-11-metoxo-13,13-dimethyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-5,8-diflo-3-(4-flophenyl)-13,13-dimethyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-ylcacboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-13,13-dimethyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)-[1,1'-biphenyl]-4-cacbonyl)piperazin-1-yl)-6-(triflometyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Morpholinophenyl)-3-(4-metoxyphehyl)-10,7-bis[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-5-flo-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Morpholinophenyl)-3-(4-metoxyphehyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-2-(triflometyl)phenyl]-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)-benzamido)-2-(triflometyl)phenyl]-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]-naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Morpholinophenyl)-3-(4-metoxyphenyl)-10-[4-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)-2-(triflometyl)phenyl]-13,13-dimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3,3-Bis(4-metoxyphenyl)-13,13-dimethyl-10-(2-methyl-4-(trans-4-((4'-((trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-yloxy)cacbonyl)xyclohexanecarboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-(4-(4-Butylphenyl)piperazin-1-yl)phenyl)-3-(4-metoxyphenyl)-13,13-dimethyl-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcarboxamido)-2-(triflometyl)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-(4-(4-Butylphenyl)piperazin-1-yl)phenyl)-3-(4-metoxyphenyl)-13,13-dimethyl-10-(2-methyl-4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcarboxamido)phenyl)-7-(4-(4-(trans-4-pentylxyclohexyl)benzamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-(4-Metoxyphenyl)-13,13-dimethyl-7,10-bis(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcarboxamido)phenyl)-3-phenyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

3-p-Tolyl-3-(4-metoxyphenyl)-6-methoxy-13,13-dimethyl-7-(4'-(trans,trans-4'-pentylbi(xyclohexan-4-)carbonyloxy)biphenylcarbonyloxy)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcarboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

10-(4-(((3S,8S,9S,10R,13R,14S,17R)-10,13-Dimethyl-17-((R)-6-methylheptan-2-yl)-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-xyclopenta[a]-phenanthren-3-yloxy)carbonyl)piperazin-1-yl)-3-(4-metoxyphenyl)-13,13-dimethyl-3-(4-morpholinophenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

6-Methoxy-3-(4-metoxyphenyl)-13,13-dimethyl-3-(4-((S)-2-methylbutoxy)-phenyl)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcarboxamido)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran;

6-Metoxi-3-(4-metoxiphenyl)-13,13-dimetyl-3-(4-((S)-2-metylbutoxy)-phenyl)-7-(4'-(trans,trans-4'-pentylobi(xyclohexan-4-)cacbonyloxy)biphenyl-cacbonyloxy)-10-(4-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-4-ylcacboxamido)-phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran; và

6-Metoxi-3-(4-metoxiphenyl)-13,13-dimetyl-3-(4-((S)-2-metylbutoxy)-phenyl)-10-(4-(((3R,3aS,6S,6aS)-6-(4'-(trans-4-pentylxyclohexyl)biphenyl-cacbonyloxy)hexahydrofuro[3,2-b]furan-3-yloxy)cacbonyl)phenyl)-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

5. Chế phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa hợp chất đổi màu ánh sáng theo điểm 1 và tùy ý ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng khác, trong đó chế phẩm này chứa:

- (a) hợp chất đổi màu theo ánh sáng đơn;
- (b) hỗn hợp gồm các hợp chất đổi màu theo ánh sáng;
- (c) vật liệu chứa ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng;
- (d) vật liệu mà ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng được liên kết hóa học với nó;
- (e) vật liệu (c) hoặc (d) còn chứa thêm lớp phủ ngăn chặn hoàn toàn sự tiếp xúc của ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng với các vật liệu bên ngoài;
- (f) polyme đổi màu theo ánh sáng; hoặc
- (g) hỗn hợp của chúng.

6. Chế phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo điểm 1 được kết hợp vào ít nhất một phần của vật liệu hữu cơ, vật liệu hữu cơ này là vật liệu polyme, vật liệu oligome, vật liệu monome hoặc hỗn hợp hoặc tổ hợp của chúng.

7. Chế phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 6, trong đó vật liệu polyme này bao gồm các vật liệu tinh thể lỏng, các vật liệu tự tổ hợp, polycacbonat, polyamit, polyimit, poly(met)acrylat, alken đa nhân, polyuretan, poly(ure)uretan, polythiouretan, polythio(ure)uretan, polyol(allyl cacbonat), xenluloza axetat, xenluloza diaxetat, xenluloza triaxetat, xenluloza axetat propionat, xenluloza axetat butyrat, polyalken, polyalkylen-vinyl axetat, poly(vinylaxetat), poly(rượu vinyl), poly(vinyl clorua), poly(vinylformal), poly(vinylaxetal), poly(vinyliden clorua), polyetylen terephthalat), polyeste, polysulfon, polyolefin, các copolyme của chúng, và/hoặc hỗn hợp của chúng,

hoặc trong đó chế phẩm đổi màu theo ánh sáng này còn chứa thêm ít nhất một chất phụ gia được chọn từ nhóm bao gồm thuốc nhuộm, chất kích thích tạo liên kết, chất chống oxy hóa, chất phụ gia cải thiện động học, chất khơi mào quang hóa, chất khơi mào nhiệt, chất ức chế polyme hóa, dung môi, chất ổn định ánh sáng, chất ổn định nhiệt, chất giải phóng khuôn, chất kiểm soát độ lưu biến, chất tạo mức, chất tẩy tạp gốc tự do, chất gel hóa và chất kích thích độ dính.

8. Chế phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 6 chứa chế phẩm phủ được chọn từ nhóm bao gồm vật liệu tinh thể lỏng, vật liệu tự tổ hợp và vật liệu tạo màng.

9. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa nền và hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo điểm 1 liên kết với ít nhất một phần của nền.

10. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 9 chứa chi tiết quang học, chi tiết quang học này là ít nhất một trong số các chi tiết liên quan đến mắt, chi tiết hiển thị, cửa sổ, gương, vật liệu bao gói và chi tiết tế bào tinh thể lỏng có hoạt tính hoặc thụ động, trong đó chi tiết liên quan đến mắt bao gồm thấu kính hiệu chỉnh, thấu kính không-hiệu chỉnh, thấu kính áp tròng, thấu kính trong mắt, thấu kính khuếch đại, thấu kính bảo vệ, hoặc tấm che mặt bảo vệ.

11. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 9, trong đó nền chứa vật liệu polyme và vật liệu đổi màu theo ánh sáng được kết hợp vào ít nhất một phần của vật liệu polymer, trong đó vật liệu đổi màu theo ánh sáng tốt hơn là được trộn với ít nhất một phần của vật liệu polyme này, liên kết với ít nhất một phần của vật liệu polyme, và/hoặc được tẩm vào ít nhất một phần của vật liệu polyme này.

12. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 9, trong đó sản phẩm đổi màu theo ánh sáng này bao gồm lớp phủ hoặc màng liên kết với ít nhất một phần của nền, lớp phủ hoặc màng này chứa vật liệu đổi màu theo ánh sáng này, trong đó nền này tốt hơn là được tạo thành từ vật liệu hữu cơ, vật liệu vô cơ, hoặc tổ hợp của chúng.

13. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 9 còn chứa thêm ít nhất một lớp phủ ít nhất một phần bổ sung được chọn từ nhóm bao gồm lớp phủ đổi màu theo ánh sáng, lớp phủ chống phản xạ, lớp phủ phân cực tuyến tính, lớp phủ chuyển tiếp, lớp phủ lót, lớp phủ kết dính, lớp phủ phản xạ, lớp phủ chống đọng sương, lớp phủ ngăn oxy, lớp phủ hấp thụ ánh sáng tử ngoại, và lớp phủ bảo vệ.

14. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa:

nền;

ít nhất lớp phủ một phần của một vật liệu định hướng;

ít nhất một lớp phủ ít nhất một phần bổ sung của vật liệu tinh thể lỏng; và

ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo điểm 1.

15. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 14, trong đó sản phẩm này còn chứa thêm ít nhất một chất phụ gia được chọn từ nhóm bao gồm thuốc nhuộm lưỡng sắc, thuốc nhuộm không lưỡng sắc, chất kích thích định hướng, chất chống oxy hóa, chất phụ gia cải thiện động học, chất khơi mào quang hóa, chất khơi mào nhiệt, chất ức chế polyme hóa, dung môi, chất ổn định ánh sáng, chất ổn định nhiệt, chất giải phóng khuôn, chất kiểm soát độ lưu biến, chất tạo mức, chất tẩy tạp gốc tự do, chất gel hóa và chất cải thiện độ dính.

16. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 14, trong đó:

- nền được chọn từ nhóm bao gồm thủy tinh, thạch anh, và các vật liệu hữu cơ polyme.
- ít nhất một vật liệu định hướng bao gồm mạng polyme có thể định hướng bằng cách tiếp xúc với ít nhất một: từ trường, điện trường, bức xạ hồng ngoại phân cực tuyến tính, bức xạ tử ngoại phân cực tuyến tính, bức xạ khả kiến phân cực tuyến tính và lực cắt, hoặc
- vật liệu tinh thể lỏng này là polyme tinh thể lỏng.

17. Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo điểm 14, trong đó sản phẩm này còn chứa thêm ít nhất một lớp phủ lót, lớp phủ chuyển tiếp, lớp phủ bảo vệ hoặc tổ hợp của chúng, tốt hơn là trong đó:

- lớp phủ chuyển tiếp chứa polyme acrylate,
- lớp phủ bảo vệ chứa ít nhất một dẫn xuất siloxan.
- ít nhất một lớp phủ lót chứa polyuretan.

Fig.1

