



(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

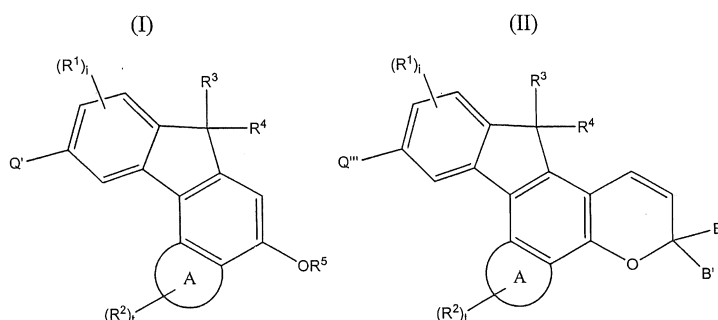
(11) 
1-0022888

(51)⁷ **C07D 311/94**, 405/10, 409/04, 451/02, (13) **B**
G02B 1/04, G03C 1/73

(21) 1-2013-01811 (22) 01.12.2011
(86) PCT/US2011/062765 01.12.2011 (87) WO2012/082381 21.06.2012
(30) 12/928,671 16.12.2010 US
(45) 27.01.2020 382 (43) 25.11.2013 308
(73) TRANSITIONS OPTICAL, INC. (US)
9251 Belcher Road, Pinellas Park, Florida 33782, United States of America
(72) HE, Meng (US), KUMAR, Anil (US), DABIDEEN, Darrin R. (US)
(74) Công ty Cổ phần Sở hữu công nghiệp INVESTIP (INVESTIP)

(54) **HỢP CHẤT VÒNG NGUNG TỰ INDENO CÓ ĐẶC TÍNH ĐỔI MÀU THEO ÁNH SÁNG**

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất được có các công thức (I) và (II) sau:



Vòng A của các hợp chất có công thức I và II có thể là, ví dụ, nhóm aryl, và mỗi nhóm Q' và Q''' có thể độc lập được chọn từ các nhóm, như, halogen, -OH, -CN, các nhóm amin, các nhóm amit, các nhóm este của axit carboxylic, các nhóm axit carboxylic, các nhóm alkenyl, các nhóm alkynyl, các nhóm cacbonat, các nhóm sulfua, và các nhóm este của axit sulfonic. Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm đổi màu theo ánh sáng và sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa một hoặc nhiều hợp chất đổi màu theo ánh sáng, như được thể hiện bằng hợp chất có công thức II.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến hợp chất vòng ngưng tụ indeno, bao gồm hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno, có thể đổi màu theo ánh sáng, và chế phẩm và sản phẩm chứa hợp chất đổi màu theo ánh sáng này.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Các hợp chất đổi màu theo ánh sáng 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 với phổ hấp thụ thứ nhất, và có khả năng chuyển đổi giữa hai trạng thái này khi phản ứng với ít nhất là bức xạ quang hóa. Hơn nữa, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thường có thể thuận nghịch bởi nhiệt. Tức là, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có khả năng chuyển đổi giữa trạng thái thứ nhất và trạng thái thứ hai khi phản ứng với ít nhất là bức xạ quang hóa và chuyển trở lại về trạng thái thứ nhất khi phản ứng với năng lượng nhiệt. Như được sử dụng ở đây “bức xạ quang hóa” có nghĩa là bức xạ điện từ, như nhưng không chỉ giới hạn ở bức xạ tử ngoại và bức xạ có thể nhìn thấy mà có thể gây ra phản ứng. Cụ thể hơn, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường có thể bị biến đổi khi phản ứng với bức xạ quang hóa từ một chất đồng phân này sang chất đồng phân khác, với mỗi chất đồng phân có phổ hấp thụ đặc trưng, và có thể chuyển lại thành chất đồng phân thứ nhất khi phản ứng với năng lượng nhiệt (tức là, có thể thuận nghịch bởi nhiệt). Ví dụ, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi nhiệt thông thường 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”, khi phản ứng với bức xạ quang hóa và chuyển trở lại về trạng thái “trong” tương 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 phẳng trực giao của bức xạ được truyền mạnh hơn thành phần kia. Vì vậy, các hợp chất lưỡng sắc có khả năng phân cực tuyến tính bức xạ được truyền. Như được sử dụng ở đây, “phân cực tuyến tính” có nghĩa là giữ các dao động của vector điện của sóng ánh sáng theo một hướng hoặc mặt phẳng. Tuy nhiên, mặc dù các nguyên liệu lưỡng sắc có khả năng hấp thụ ưu tiên một trong hai thành phần phân cực phẳng trực giao của bức xạ được truyền, nếu các phân tử của hợp chất lưỡng sắc không được định vị hoặc được sắp xếp một cách thích hợp, thì không đạt được phân cực tuyến tính thực của bức xạ

được truyền. Tức là, do sự định vị ngẫu nhiên của các phân tử của hợp chất lưỡng sắc, sự hấp thụ chọn lọc bởi các phân tử riêng biệt sẽ triệt tiêu nhau sao cho không đạt được hiệu quả phân cực tuyến tính thực hoặc tổng. Vì vậy, thường cần thiết phải định vị hoặc sắp xếp một cách thích hợp các phân tử của hợp chất lưỡng sắc 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 dùng cho kính chống nắng.

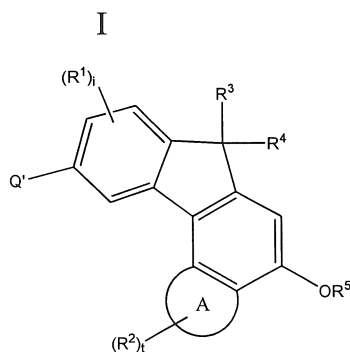
Ngược lại với các hợp chất đổi màu theo ánh sáng, thường không cần định vị hoặc sắp xếp các phân tử của các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường để tạo ra chi tiết đổi màu theo ánh sáng thông thường. Vì vậy, ví dụ, các chi tiết đổi màu theo ánh sáng thông thường, như các thấu kính dùng trong kính 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 xử lý thích hợp lớp phủ hoặc lớp tạo thành mà không bố trí hợp chất đổi màu theo ánh sáng trong 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 nêu trên so với các hợp chất đổi màu theo ánh sáng, vì các hợp chất đổi màu theo ánh sáng thông thường không thể hiện rõ tính lưỡng sắc, các chi tiết được làm từ chúng thường không phân cực tuyến tính mạnh.

Mong muốn phát triển được các hợp chất đổi màu theo ánh sáng mới 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 các ứng dụng khác nhau cần các đặc tính đổi màu theo ánh sáng và/hoặc lưỡng sắc.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Mục đích của sáng chế nhằm đáp ứng các nhu cầu nêu trên.

Theo đó, sáng chế đề xuất hợp chất, như hợp chất vòng ngưng tụ indeno, có công thức (I) sau:



Vòng A của hợp chất có công thức I, và các công thức liên quan khác được bộc lộ thêm ở đây, được chọn từ, ngoài nhóm $(R^1)_m$, aryl không được thế, aryl được thế, aryl vòng ngưng tụ không được thế, aryl vòng ngưng tụ được thế, heteroaryl không được thế, và heteroaryl được thế. Với một số phương án, vòng A được chọn từ aryl, aryl vòng ngưng tụ, và heteroaryl.

Nhóm Q' của hợp chất có công thức-I, và các công thức liên quan khác được bộc lộ thêm ở đây, được chọn từ halogen, -OH, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b, -C(O)NR^aR^a và nhóm kéo dài L (như được mô tả thêm ở đây). Mỗi R^a độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi ít nhất một trong số các nhóm -O-, -S-, -C(O)-, -C(O)O-, -S(O)-, -S(O₂)-, -N=N-, -N(R₁₁')- trong đó R₁₁' được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, -Si(OR₁₄)_u(R₁₄)_v-, trong đó mỗi u và v độc lập được chọn từ 0 đến 2, với điều kiện tổng của u và v là 2, và mỗi R₁₄ độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, và dạng kết hợp bao gồm hai hoặc nhiều nhóm này. Theo cách khác, hai nhóm R^a có thể cùng với -N và tùy ý một nguyên tử khác loại bổ sung được chọn từ N và O để tạo thành heteroxycloalkyl. Nhóm R^b được chọn từ perhalohydrocarbyl, và Q'' được chọn từ halo, -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a, và aryl tùy ý được thế, trong đó các phần tử thế này được chọn từ -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a.

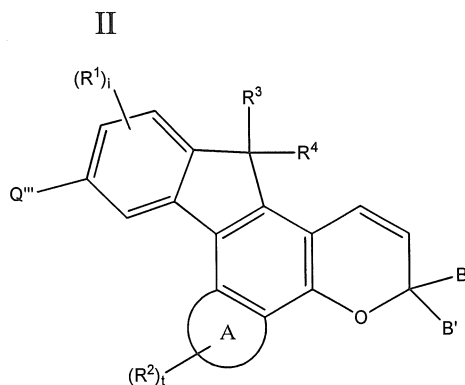
Chỉ số dưới i của hợp chất có công thức I được chọn từ 0 đến 3. Chỉ số dưới t của hợp chất có công thức I được chọn từ 0 đến tổng số các vị trí mà R² có thể được liên kết với vòng-A, như từ 0 đến 10, hoặc 0 đến 7, hoặc 0 đến 5, hoặc 0 đến 4, hoặc 0 đến 3. Các vị trí vòng mà nhóm R¹ không được liên kết, thay vào đó có thể có các nhóm hydro được liên kết vào đó. Tương tự, các vị trí vòng A mà nhóm R² không được liên kết, thay vào đó có thể có các nhóm hydro được liên kết vào đó. Đề cập hơn nữa đến hợp chất có công thức I, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm này độc lập được chọn từ, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi ít nhất một trong số các nhóm -O-, -S-, -C(O)-, -C(O)O-, -S(O)-, -S(O₂)-, -N=N-, -N(R₁₁')- trong đó R₁₁' được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, -Si(OR₁₄)_u(R₁₄)_v-, trong đó mỗi u và v độc lập được chọn từ 0 đến 2 (ví dụ, 0, 1 hoặc 2), với điều kiện tổng của u và v là 2, và mỗi R₁₄ độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, và dạng kết hợp bao gồm hai hoặc nhiều nhóm này; halogen; xyano; và -N(R₁₁')R₁₂'.

trong đó mỗi nhóm R_{11}' và R_{12}' độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, hoặc R_{11}' và R_{12}' cùng nhau tạo thành cấu trúc vòng tùy ý bao gồm ít nhất một nguyên tử khác loại.

Các nhóm R^3 và R^4 của hợp chất có công thức I mỗi nhóm độc lập được chọn từ, hydro; hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi ít nhất một trong số các nhóm -O-, -S-, -C(O)-, -C(O)O-, -S(O)-, -S(O₂)-, -N=N-, -N(R_{11}')- trong đó R_{11}' được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, -Si(OR₁₄)_u(R₁₄)_v-, trong đó mỗi u và v độc lập được chọn từ 0 đến 2 (ví dụ, 0, 1 hoặc 2), với điều kiện tổng của u và v là 2, và mỗi R₁₄ độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, và dạng kết hợp bao gồm hai hoặc nhiều nhóm này. Theo cách khác, R^3 và R^4 có thể cùng nhau tạo thành cấu trúc vòng tùy ý bao gồm ít nhất một nguyên tử khác loại.

Nhóm R^5 của hợp chất có công thức I được chọn từ hydro, -C(O)-R¹³ hoặc -S(O₂)R¹³ trong đó R¹³ là hydrocarbyl tùy ý được thế, hoặc halohydrocarbyl tùy ý được thế.

Theo sáng chế, sáng chế cũng đề xuất hợp chất, như hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno, được thể hiện bằng hợp chất có công thức II sau đây:



Các nhóm và chỉ số dưới khác nhau của hợp chất có công thức II, như R^1 , R^2 , R^3 , và R^4 , các chỉ số dưới i và t, và vòng-A, là như được mô tả ở trên và ở đây đối với hợp chất được thể hiện bằng công thức I. Nhóm Q''' của hợp chất có công thức II, được chọn từ halogen, -OH, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b và -C(O)NR^aR^a. Mỗi nhóm R^a độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi ít nhất một trong số các nhóm -O-, -S-, -C(O)-, -

$C(O)O-$, $-S(O)-$, $-S(O_2)-$, $-N=N-$, $-N(R_{11}')-$ trong đó R_{11}' được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, $-Si(OR_{14})_u(R_{14})_v-$, trong đó mỗi u và v độc lập được chọn từ 0 đến 2, với điều kiện tổng của u và v là 2, và mỗi R_{14} độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, và dạng kết hợp bao gồm hai hoặc nhiều nhóm này, hoặc hai nhóm R^a cùng với $-N$ và tùy ý một nguyên tử khác loại bổ sung được chọn từ N và O để tạo thành heteroxycloalkyl. Nhóm R^b được chọn từ perhalohydrocarbyl, và Q'' được chọn từ halo, $-OH$, $-NR^aR^a$, $-C(O)OR^a$, $-SR^a$, và aryl được thế.

Các nhóm B và B' của hợp chất có công thức II mỗi nhóm độc lập được chọn từ hydro, aryl không được thế, aryl được thế, heteroaryl không được thế, heteroaryl được thế, polyalkoxy, và polyalkoxy có nhóm có thể polyme hóa, hoặc B và B' cùng nhau tạo thành cấu trúc vòng được chọn từ fluoren-9-yliden không được thế, fluoren-9-yliden được thế, vòng hydrocacbon xoắn-một vòng no, vòng hydrocacbon xoắn-hai vòng no, và vòng hydrocacbon xoắn-ba vòng.

Sáng chế cũng đề xuất chế phẩm và sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa một hoặc nhiều hợp chất theo sáng chế, như các hợp chất được thể hiện bằng hợp chất có công thức II.

Mô tả vắn tắt hình vẽ

Fig. 1 là đồ thị biểu diễn hai phổ hấp thụ biệt hóa trung bình thu được đối với các 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 ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, thuật ngữ “bức xạ quang hóa” có nghĩa là bức xạ điện từ có khả năng chuyển đổi vật liệu đổi màu theo ánh sáng từ một dạng hoặc trạng thái sang dạng hoặc trạng thái khác.

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, thuật ngữ “đổi màu theo ánh sáng” có nghĩa là có phổ hấp thụ với ít nhất là bức xạ khả kiến thay đổi tương ứng với độ hấp thụ của ít nhất là bức xạ quang hóa. Hơn nữa, như được sử dụng ở đây thuật ngữ “vật liệu đổi màu theo ánh sáng” có nghĩa là chất bất kỳ được điều chỉnh để thể hiện các đặc tính đổi màu theo ánh sáng, tức là được điều chỉnh để có phổ hấp thụ với ít nhất

là bức xạ khả kiến thay đổi tương ứng với độ hấp thụ của ít nhất là bức xạ quang hóa, và bao gồm ít nhất một hợp chất đổi màu theo ánh sáng.

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, các giá trị trọng lượng phân tử của các polyme, như trọng lượng phân tử trung bình trọng lượng (M_w) và trọng lượng phân tử trung bình số (M_n), được xác định bởi sắc ký thẩm thấu gel sử dụng các chất chuẩn thích hợp, như chất chuẩn polystyren.

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, các giá trị chỉ số đa phân tán (PDI) biểu diễn tỷ lệ của trọng lượng phân tử trung bình trọng lượng (M_w) so với trọng lượng phân tử trung bình số (M_n) của polyme (tức là, M_w/M_n).

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, thuật ngữ “halo” và các thuật ngữ tương tự, như nhóm halo, halogen, và nhóm halogen có nghĩa là F, Cl, Br và/hoặc I, như flo, clo, brom và/hoặc iot.

Trừ khi có định nghĩa khác, tất cả các khoảng hoặc các tỷ lệ được bộc lộ ở đây được hiểu là bao gồm khoảng phụ hoặc tỷ lệ phụ bất kỳ hoặc tất cả các khoảng phụ hoặc tỷ lệ phụ được phân nhóm ở đây. Ví dụ, khoảng hoặc tỷ lệ được nêu là “từ 1 đến 10” được xem là bao gồm khoảng phụ bất kỳ hoặc tất cả các khoảng phụ giữa (và bao gồm cả) giá trị tối thiểu là 1 và giá trị tối đa là 10; tức là, tất cả các khoảng phụ hoặc tỷ lệ phụ bắt đầu từ giá trị tối thiểu là 1 hoặc cao hơn và kết thúc bằng giá trị tối đa là 10 hoặc thấp hơn, như nhưng không chỉ giới hạn ở, từ 1 đến 6,1, từ 3,5 đến 7,8, và từ 5,5 đến 10.

Ngoài các ví dụ thực hiện, hoặc trong đó có chỉ dẫn khác, tất cả các số thể hiện lượng của các thành phần, các điều kiện phản ứng, và tương tự được sử dụng trong bản mô tả và yêu cầu bảo hộ này được hiểu là có thể thay đổi trong tất cả các trường hợp bởi thuật ngữ “khoảng.”

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, thuật ngữ “tiền chất” và các thuật ngữ có liên quan, như “các tiền chất” dùng để chỉ các nhóm khác nhau, ví dụ, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , Q' , Q'' , B, B', và L, của các hợp chất và các chất trung gian được mô tả ở đây, ví dụ, các hợp chất vòng ngưng tụ indeno được thể hiện bằng hợp chất có công thức I, các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno được thể hiện bằng hợp chất có công thức II, có nghĩa là nhóm có thể được chuyển hóa trong một hoặc nhiều bước thành nhóm cuối cùng hoặc nhóm mong muốn. Với mục đích minh họa không nhằm giới hạn: tiền chất của nhóm hydroxyl (-OH) bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm este của axit carboxylic (-OC(O)R trong đó R là hydro hoặc hydrocarbyl tùy ý được thế); và tiền chất

của nhóm este của axit carboxylic ($-\text{OC}(\text{O})\text{R}$) bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm hydroxyl ($-\text{OH}$), có thể được phản ứng, ví dụ, với halogenua của axit carboxylic, như clorua axit axetic (hoặc axetyl clorua).

Các nhóm khác nhau của các hợp chất và các chất trung gian được mô tả từ trước và ở đây, như nhưng không chỉ giới hạn ở nhóm R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , Q' , Q'' , B , B' , và các nhóm nhóm kéo dài L của các hợp chất được thể hiện bởi các hợp chất có công thức I và II, và các công thức có liên quan, trong mỗi trường hợp có thể độc lập được chọn từ hydrocarbyl và hydrocarbyl được thể.

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ thuật ngữ “hydrocarbyl” và các thuật ngữ tương tự, như “phần tử thể hydrocarbyl” và “nhóm hydrocarbyl” có nghĩa là: $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkyl mạch thẳng hoặc phân nhánh (ví dụ, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkyl mạch thẳng hoặc phân nhánh); $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ alkenyl mạch thẳng hoặc phân nhánh (ví dụ, $\text{C}_2\text{-C}_{10}$ alkenyl mạch thẳng hoặc phân nhánh); $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ alkynyl mạch thẳng hoặc phân nhánh (ví dụ, $\text{C}_2\text{-C}_{10}$ alkynyl mạch thẳng hoặc phân nhánh); $\text{C}_3\text{-C}_{12}$ xycloalkyl (ví dụ, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkyl); $\text{C}_3\text{-C}_{12}$ heteroxycloalkyl (có ít nhất một nguyên tử khác loại trong vòng xyclic); $\text{C}_5\text{-C}_{18}$ aryl (bao gồm các nhóm aryl polyxyclic) (ví dụ, $\text{C}_5\text{-C}_{10}$ aryl); $\text{C}_5\text{-C}_{18}$ heteroaryl (có ít nhất một nguyên tử khác loại trong vòng thơm); và $\text{C}_6\text{-C}_{24}$ aralkyl (ví dụ, $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aralkyl).

Các nhóm alkyl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở methyl, ethyl, propyl, isopropyl, butyl, isobutyl, sec-butyl, tert-butyl, pentyl, neopentyl, hexyl, heptyl, octyl, nonyl và dextyl. Các nhóm alkenyl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở vinyl, allyl và propenyl. Các nhóm alkynyl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở etynyl, 1-propynyl, 2-propynyl, 1-butylnyl, và 2-butylnyl. Các nhóm xycloalkyl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở các phần tử thể xyclopropyl, xyclobutyl, xyclopentyl, xyclohexyl, và xyclooctyl. Các nhóm heteroxycloalkyl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở tetrahydrofuranyl, tetrahydropyranyl và piperidinyl. Các nhóm aryl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở phenyl và naphthyl. Các nhóm heteroaryl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở furanyl, pyranlyl và pyridinyl. Các nhóm aralkyl đại diện bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở benzyl, và phenetyl.

Thuật ngữ “hydrocarbyl được thể” như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ có nghĩa là nhóm hydrocarbyl trong đó ít nhất một hydro của nó được thể bằng nhóm không phải là hydro, như, nhưng không chỉ giới hạn ở, các nhóm halo, các nhóm hydroxyl, các nhóm ete, các nhóm thiol, các nhóm thio ete, các nhóm axit carboxylic, các

nhóm este của axit carboxylic, các nhóm axit phosphoric, các nhóm este của axit phosphoric, các nhóm axit sulfonic, các nhóm este của axit sulfonic, các nhóm nitro, các nhóm xyano, các nhóm hydrocarbyl (ví dụ, các nhóm alkyl, alkenyl, alkynyl, xycloalkyl, heteroxycloalkyl, aryl, heteroaryl, và aralkyl), và các nhóm amin, như $-N(R_{11}')(R_{12}')$ trong đó mỗi nhóm R_{11}' và R_{12}' độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, hoặc R_{11}' và R_{12}' cùng nhau tạo thành vòng xyclic tùy ý bao gồm ít nhất một nguyên tử khác loại (ví dụ, $-O-$, $-Si-$ và/hoặc $-S-$).

Thuật ngữ “hydrocarbyl được thế” bao gồm các phần tử thế halohydrocarbyl (hoặc halo hydrocarbyl được thế). Thuật ngữ “halohydrocarbyl” như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, và các thuật ngữ tương tự, như halo hydrocarbyl được thế, có nghĩa là ít nhất một nguyên tử hydro của hydrocarbyl (ví dụ, của các nhóm alkyl, alkenyl, alkynyl, xycloalkyl, heteroxycloalkyl, aryl, heteroaryl, và aralkyl) được thay bằng nguyên tử halogen được chọn từ clo, brom, flo và iot. Mức halogen hóa có thể nằm trong khoảng từ ít nhất một nguyên tử hydro được thế bằng nguyên tử halogen (ví dụ, nhóm flometyl) đến halogen hóa toàn bộ (perhalogen hóa) trong đó tất cả các nguyên tử hydro có thể thay thế trên nhóm hydrocarbyl được thay bằng nguyên tử halogen (ví dụ, triflometyl hoặc perflometyl). Do đó, thuật ngữ “nhóm perhalohydrocarbyl” như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ có nghĩa là nhóm hydrocarbyl trong đó tất cả các hydro có thể thay thế được thay bằng halogen. Các ví dụ về các nhóm perhalohydrocarbyl bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các nhóm phenyl perhalogen hóa và các nhóm alkyl perhalogen hóa.

Các nhóm hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế từ các nhóm và các phần tử thế khác nhau, như mỗi R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , Q' , Q''' và L , có thể được chọn từ, trong mỗi trường hợp có thể độc lập và tùy ý được ngắt quãng bằng ít nhất một trong số các nhóm $-O-$, $-S-$, $-C(O)-$, $-C(O)O-$, $-S(O)-$, $-S(O_2)-$, $-N=N-$, $-N(R_{11}')$, và $-Si(OR_{14})_u(R_{14})_v-$. Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, bằng cách ngắt quãng bằng ít nhất một trong số các nhóm $-O-$, $-S-$, $-C(O)-$, $-C(O)O-$, $-S(O)-$, $-S(O_2)-$, $-N=N-$, $-N(R_{11}')$, và $-Si(OR_{14})_u(R_{14})_v-$, có nghĩa là ít nhất một cacbon của, nhưng ít hơn toàn bộ cacbon của, nhóm hydrocarbyl hoặc nhóm hydrocarbyl được thế, trong mỗi trường hợp được thay thế bằng một trong số các nhóm liên kết hóa trị hai nêu trên. Các nhóm hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế có thể được ngắt quãng bằng hai hoặc nhiều nhóm liên kết nêu trên, có thể liên kế với nhau hoặc được tách bởi một hoặc nhiều cacbon.

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, trừ khi có định nghĩa khác, từ trái sang phải biểu diễn các nhóm liên kết, như các nhóm liên kết hóa trị hai, bao gồm các định hướng thích hợp khác, như, các định hướng từ phải sang trái. Với mục đích minh họa không nhằm giới hạn, cách biểu diễn từ trái sang phải của nhóm liên kết hóa trị hai $-C(O)O-$, bao gồm cả cách biểu diễn từ phải sang trái của nó, $-O(O)C-$.

Như được sử dụng ở đây và trong phần yêu cầu bảo hộ, phần liệt kê các nhóm “mạch thẳng hoặc phân nhánh” hoặc “mạch thẳng, phân nhánh hoặc vòng”, như alkyl mạch thẳng hoặc phân nhánh, hoặc alkyl mạch thẳng, phân nhánh hoặc vòng, ở đây được hiểu là bao gồm: nhóm metylen hoặc nhóm metyl; các nhóm mạch thẳng, như các nhóm C_2-C_{25} alkyl mạch thẳng; các nhóm được phân nhánh một cách thích hợp, như các nhóm C_3-C_{25} alkyl mạch nhánh; và các nhóm vòng thích hợp, như các nhóm C_3-C_{25} xycloalkyl (hoặc C_3-C_{25} alkyl vòng).

Với một số phương án theo sáng chế đề xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi nhiệt có nhóm Q' hoặc Q'' ở vị trí được mô tả từ trước và ở đây, và tùy ý một hoặc nhiều nhóm kéo dài L , như được mô tả thêm dưới đây. Các phương án không giới hạn khác đề xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng được điều chỉnh để có ít nhất là trạng thái thứ nhất và trạng thái thứ hai, trong đó hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi nhiệt có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 2,3 trong 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 có thể thuận nghịch bởi nhiệt có tỷ lệ hấp thụ trung bình lớn hơn 2,3 ở trạng thái được hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “hợp chất đổi màu theo ánh sáng” (PC) dùng để chỉ một hoặc nhiều hợp chất đổi màu theo ánh sáng, bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở các hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế, như được thể hiện bằng hợp chất có công thức II. Như được sử dụng ở đây đối với các hợp chất đổi màu theo ánh sáng, thuật ngữ “trạng thái được hoạt hóa” dùng để chỉ hợp chất đổi màu theo ánh sáng khi tiếp xúc với bức xạ quang hóa thích hợp sản xuất gây ra ít nhất là một phần của hợp chất đổi màu theo ánh sáng chuyển trạng thái. Hơn nữa, như được sử dụng ở đây thuật ngữ “hợp chất” có nghĩa là chất được tạo thành bởi sự đồng nhất của hai hoặc nhiều chi tiết, thành phần, các thành phần, hoặc các phần và bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các phân tử và các đại

phân tử (ví dụ các polyme hoặc các oligome) được tạo thành bởi sự đồng nhất của hai hoặc nhiều chi tiết, thành phần, các thành phần, hoặc các phân.

Nói chung, phương pháp CELL METHOD đo tỷ lệ hấp thụ trung bình của hợp chất đổi màu theo ánh sáng bao gồm bước thu phổ hấp thụ của hợp chất đổi màu theo ánh sáng, ở trạng thái hoạt hóa hoặc không hoạt hóa, theo mỗi hướng trong số hai hướng phân cực trực giao trong khi hợp chất đổi màu theo ánh sáng ít nhất là được sắp thẳng hàng ít nhất một phần trong môi trường tinh thể lỏng được sắp thẳng hàng chứa trong tổ hợp tế bào. Cụ thể hơn, tổ hợp tế bào này bao gồm hai chất nền thủy tinh đối xứng nhau cách nhau khoảng 20 micron $\pm$ 1 micron. Các chất nền được gắn dọc hai cạnh đối diện để tạo thành tế bào. Bề mặt bên trong của mỗi chất 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. Sự sắp xếp thẳng hàng 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 sắp xếp thẳng hàng với bề mặt polyimide được đánh bóng. Vì hợp chất đổi màu theo ánh sáng có trong môi trường tinh thể lỏng, sự sắp xếp thẳng hàng của môi trường tinh thể lỏng làm cho hợp chất đổi màu theo ánh sáng được sắp thẳng hàng. 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 gồm các hợp chất tinh thể lỏng xyanobiphenyl và xyanoterphenyl).

Khi môi trường tinh thể lỏng và hợp chất đổi màu theo ánh sáng được sắp thẳng hàng, 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° v.v.. 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.

Với mục đích minh họa không nhằm giới hạn và 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 đối với hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo một phương án không 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 trong 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 trong 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, $AR_{\lambda i}$ 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 trên đây, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi nhiệt thông thường có thể chuyển đổi từ trạng thái thứ nhất sang trạng thái thứ hai khi phản ứng với bức xạ quang hóa, và quay trở lại trạng thái thứ nhất khi phản ứng với năng lượng nhiệt. Cụ thể hơn, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi 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) khi phản 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, thường các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi nhiệt thông thường không thể hiện một cách rõ ràng tính lưỡng sắc.

Như được mô tả ở trên, các phương án không giới hạn được bộc lộ ở đây đề xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi 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 có thể thuận nghịch bởi 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 có thể thuận nghịch bởi nhiệt theo phương án không 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 có thể thuận nghịch bởi nhiệt có thể là hợp chất có thể đổi màu theo ánh sáng và/hoặc đổi màu theo ánh sáng-lưỡng sắc thuận nghịch bởi 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 giới hạn khác, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi 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 có thể thuận nghịch bởi nhiệt có thể có tỷ lệ hấp thụ trung bình bất kỳ cần thiết để đạt được mức phân cực tuyến tính mong muốn.

Phương án không giới hạn khác đề xuất hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể thuận nghịch bởi nhiệt không chứa oxazin và được điều chỉnh để có ít nhất là trạng thái thứ nhất và trạng thái thứ hai, trong đó hợp chất đổi màu theo ánh sáng có tỷ lệ hấp thụ trung bình ít nhất là 1,5 trong ít nhất một trạng thái như được xác định theo CELL METHOD. Hơn nữa, theo phương án không giới hạn này, tỷ lệ hấp thụ trung bình có thể nằm trong khoảng từ 1,5 đến 50 ở ít nhất một trạng thái như được xác định theo CELL METHOD.

Các nhóm và các phần tử thế của các hợp chất theo sáng chế, như được thể hiện bởi các hợp chất có công thức I và II, và các hợp chất có liên quan như được mô tả chi tiết hơn ở đây, và các hợp chất và các chất trung gian được sử dụng trong chế phẩm chứa chúng, như được mô tả chi tiết hơn dưới đây.

Vòng A của các hợp chất theo sáng chế, như các hợp chất được thể hiện bằng hợp chất có công thức I và hợp chất có công thức II, trong mỗi trường hợp có thể độc lập được chọn từ aryl không được thế, aryl được thế, aryl vòng ngưng tụ không được thế, aryl vòng ngưng tụ được thế, heteroaryl không được thế, và heteroaryl được thế. Thông thường, vòng-A, ngoài nhóm $(R^1)_i$ -, được chọn từ aryl không được thế, aryl vòng ngưng tụ không được thế, và heteroaryl không được thế (hoặc aryl, aryl vòng ngưng tụ, và heteroaryl). Các ví dụ về các nhóm aryl mà từ đó vòng A có thể được chọn bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, phenyl và biphenyl. Các ví dụ về các nhóm aryl vòng ngưng tụ mà từ đó vòng A có thể được chọn bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các hydrocarbon thơm polycyclic, như naphthyl và anthracenyl. Các ví dụ về các nhóm

heteroaryl mà từ đó vòng A có thể được chọn bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, furanyl, pyranlyl và pyridinyl.

Theo một số phương án, mỗi nhóm Q' và Q''' của các hợp chất theo sáng chế có thể độc lập được chọn từ, -N₃, -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b và -C(O)NR^aR^a, trong đó mỗi R^a độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi các nhóm hóa trị hai như được mô tả từ trước ở đây. Với một số phương án, với Q' và Q''', mỗi nhóm R^a độc lập được chọn từ hydro, 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, trong đó các phần tử thế này được chọn từ halo và hydroxyl, và R^b được chọn từ nhóm alkyl được perflo hóa có từ 1 đến 18 nguyên tử cacbon. Các ví dụ về các nhóm alkyl được perflo hóa bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, perflometyl (-CF₃), perfloetyl (-CF₂CF₃), perflopropyl, bao gồm perflo-n-propyl, perflo-iso-propyl, perflobutyl bao gồm các chất đồng phân của nó, như perflo-n-butyl và perflo-t-butyl, và perflooctyl, bao gồm các chất đồng phân của nó.

Theo một số phương án khác nữa của sáng chế, đối với Q' và Q''', mỗi nhóm R^a độc lập được chọn từ hydro và nhóm alkyl có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, và R^b được chọn từ nhóm alkyl được perflo hóa có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon.

Các nhóm Q' và Q''', theo một số phương án, mỗi nhóm có thể độc lập được chọn từ bromo, flo, clo, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b, -C(O)NR^aR^a. Q' cũng có thể là nhóm kéo dài L (như được mô tả thêm ở đây). Mỗi nhóm R^a có thể độc lập được chọn từ hydro, 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, trong đó các phần tử thế này được chọn từ halo và hydroxyl. Theo cách khác hai nhóm R^a có thể cùng với -N và một nguyên tử khác loại bổ sung được chọn từ N và O để tạo thành heteroxycloalkyl. Nhóm R^b có thể được chọn từ nhóm alkyl được perflo hóa có từ 1 đến 18 nguyên tử cacbon. Nhóm Q'' có thể được chọn từ -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a, và aryl tùy ý được thế, trong đó các phần tử thế này được chọn từ -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a.

Theo các phương án khác nữa, mỗi nhóm Q' và Q''' độc lập được chọn từ bromo, clo, -NR^aR^a, và -C(O)OR^a. Q' cũng có thể là nhóm kéo dài L. Mỗi R^a độc lập được chọn từ hydro và nhóm alkyl có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon. Theo cách khác, hai nhóm R^a cùng với -N và nguyên tử N bổ sung để tạo thành heteroxycloalkyl. Nhóm R^b được chọn từ nhóm alkyl được perflo hóa có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon.

Theo một số phương án theo sáng chế, Q''' không được chọn từ nhóm kéo dài L.

Nhóm R⁵ của các hợp chất vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, như được thể hiện bằng hợp chất có công thức I ở trên, và hợp chất có công thức Ia (như sẽ được mô tả ở đây), có thể được chọn từ hydro, -C(O)-R¹³ hoặc -S(O₂)R¹³, trong đó R¹³ là hydrocarbyl, hoặc halohydrocarbyl. Với một số phương án, R⁵ được chọn từ hydro và -C(O)-R¹³. Thông thường, R¹³ có thể được chọn từ các nhóm C₁-C₁₂ hoặc C₁-C₆ alkyl hoặc các nhóm perhaloalkyl, như các nhóm perfloalkyl.

Với các hợp chất vòng ngưng tụ indeno, như được thể hiện bằng hợp chất có công thức I, và các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno, như được thể hiện bằng hợp chất có công thức II, theo sáng chế, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ: (a) -C(O)X₂₄; (b) -OX₇ và -N(X₇)₂; (c) -SX₁₁; (d) vòng chứa nitơ được thể hiện bằng hợp chất có công thức i, như được mô tả chi tiết hơn ở đây; (e) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii và iii, như được mô tả chi tiết hơn ở đây; (f) hoặc các nhóm R¹ liền kề trực tiếp, và các nhóm R² liền kề trực tiếp, trong mỗi trường hợp độc lập cùng nhau tạo thành nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức vii, viii, hoặc ix, như được mô tả chi tiết hơn ở đây; (g) nhóm kéo dài L được thể hiện bằng hợp chất có công thức iii, như được mô tả chi tiết hơn ở đây; và (h) nhóm B, như được mô tả chi tiết hơn ở đây.

Theo một số phương án, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (a) -C(O)X₂₄, trong đó X₂₄ được chọn từ nhóm kéo dài L (như sẽ được mô tả ở đây), hydroxy, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, phenyl không được thế hoặc được thế một lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng ít nhất một trong số C₁-C₁₈ alkyl, phenyl, benzyl, và naphtyl.

Theo một số phương án khác nữa, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (a) -C(O)X₂₄, trong đó X₂₄ được chọn từ nhóm kéo dài L (như sẽ được mô tả ở đây), hydroxy, C₁-C₁₂ alkyl, C₁-C₁₂ alkoxy, phenyl không được thế hoặc được thế

một lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng ít nhất một trong số C₁-C₆ alkyl, phenyl, benzyl, và naphthyl.

Theo các phương án khác nữa, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (a) -C(O)X₂₄, trong đó X₂₄ được chọn từ hydroxy, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, phenyl không được thế hoặc được thế một lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng ít nhất một trong số C₁-C₆ alkyl, phenyl, benzyl, và naphthyl.

Theo một số phương án, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (b) -OX₇ và -N(X₇)₂, trong đó mỗi X₇ độc lập được chọn từ bốn loại nhóm (i), (ii), (iii), và (iv). Với một số phương án, X₇ được chọn từ, (i) hydro, nhóm kéo dài L (như sẽ được mô tả ở đây), C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ axyl, phenyl(C₁-C₁₈)alkyl, mono(C₁-C₁₈)alkyl được thế phenyl(C₁-C₁₈)alkyl, mono(C₁-C₁₈)alkoxy được thế phenyl(C₁-C₁₈)alkyl; C₁-C₁₈ alkoxy(C₁-C₁₈)alkyl; C₃-C₁₀ xycloalkyl; mono(C₁-C₁₈)alkyl được thế C₃-C₁₀ xycloalkyl, C₁-C₁₈ haloalkyl, alyl, benzoyl, benzoyl được thế một lần, naphthoyl hoặc naphthoyl được thế một lần, trong đó mỗi trong số các phần tử thế benzoyl và naphthoyl này độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl, và C₁-C₁₈ alkoxy. Mỗi X₇ có thể độc lập được chọn từ, (ii) -CH(X₈)X₉, trong đó X₈ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₁₈ alkyl, và X₉ được chọn từ nhóm kéo dài L, -CN, -CF₃, hoặc -COOX₁₀, trong đó X₁₀ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L (như sẽ được mô tả ở đây), hoặc C₁-C₁₈ alkyl. Mỗi X₇ có thể độc lập được chọn từ, (iii) -C(O)X₆, trong đó X₆ được chọn từ ít nhất một trong số các, hydro, nhóm kéo dài L (như sẽ được mô tả ở đây), C₁-C₁₈ alkoxy, phenoxy không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, nhóm amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl, và nhóm phenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy. Ngoài ra, mỗi X₇ có thể độc lập được chọn từ, (iv) tri(C₁-C₁₈)alkylsilyl, tri(C₁-C₁₈)alkylsilyloxy, tri(C₁-C₁₈)alkoxysilyl, tri(C₁-C₁₈)alkoxysilyloxy, di(C₁-C₁₈)alkyl(C₁-C₁₈ alkoxy)silyl, di(C₁-C₁₈)alkyl(C₁-C₁₈ alkoxy)silyloxy, di(C₁-C₁₈)alkoxy(C₁-C₁₈ alkyl)silyl hoặc di(C₁-C₁₈)alkoxy(C₁-C₁₈ alkyl)silyloxy.

Theo các phương án khác nữa theo sáng chế, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (b) -OX₇ và -N(X₇)₂, trong đó mỗi X₇ độc lập được chọn từ, (i) hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₂ alkyl, C₁-C₁₂ axyl, phenyl(C₁-C₁₂)alkyl, mono(C₁-C₁₂

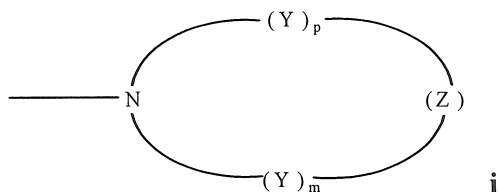
)alkyl được thế phenyl(C₁-C₁₂)alkyl, mono(C₁-C₁₂)alkoxy được thế phenyl(C₁-C₁₂)alkyl; C₁-C₁₂ alkoxy(C₁-C₁₂)alkyl; C₃-C₇ xycloalkyl; mono(C₁-C₁₂)alkyl được thế C₃-C₇ xycloalkyl, C₁-C₁₂ haloalkyl, alyl, benzoyl, benzoyl được thế một lần, naphtoyl hoặc naphtoyl được thế một lần, trong đó mỗi trong số các phần tử thế benzoyl và naphtoyl này độc lập được chọn từ C₁-C₆ alkyl, và C₁-C₆ alkoxy. Mỗi X₇ cũng có thể độc lập được chọn từ, (ii) -CH(X₈)X₉, trong đó X₈ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₁₂ alkyl; và X₉ được chọn từ nhóm kéo dài L, -CN, -CF₃, hoặc -COOX₁₀, trong đó X₁₀ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₁₂ alkyl. Mỗi X₇ có thể được chọn thêm từ, (iii) -C(O)X₆, trong đó X₆ được chọn từ ít nhất một trong số các, hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₂ alkoxy, phenoxy không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₂ alkyl hoặc C₁-C₁₂ alkoxy, nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, nhóm amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl, và nhóm phenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy.

Với các phương án bổ sung theo sáng chế, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (b) -OX₇ và -N(X₇)₂, trong đó mỗi X₇ độc lập được chọn từ, (i) hydro, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ axyl, phenyl(C₁-C₆)alkyl, mono(C₁-C₆)alkyl được thế phenyl(C₁-C₆)alkyl, mono(C₁-C₆)alkoxy được thế phenyl(C₁-C₆)alkyl; C₁-C₆ alkoxy(C₁-C₆)alkyl; C₃-C₅ xycloalkyl; mono(C₁-C₆)alkyl được thế C₃-C₅ xycloalkyl, C₁-C₆ haloalkyl, alyl, benzoyl, benzoyl được thế một lần, naphtoyl hoặc naphtoyl được thế một lần, trong đó mỗi trong số các phần tử thế benzoyl và naphtoyl này độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl, và C₁-C₃ alkoxy. Mỗi X₇ cũng có thể được chọn từ, (ii) -CH(X₈)X₉, trong đó X₈ được chọn từ hydro hoặc C₁-C₆ alkyl; và X₉ được chọn từ -CN, -CF₃, hoặc -COOX₁₀, trong đó X₁₀ được chọn từ hydro hoặc C₁-C₆ alkyl. Mỗi X₇ cũng có thể được chọn thêm từ, (iii) -C(O)X₆, trong đó X₆ được chọn từ hydro, C₁-C₁₂ alkoxy, phenoxy không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy, nhóm amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl, và nhóm phenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy.

Theo một số phương án, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (c) -SX₁₁, trong đó X₁₁ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ haloalkyl, nhóm aryl không được thế, hoặc được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl,

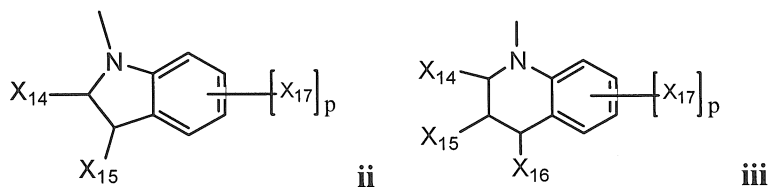
C₁-C₁₈ alkoxy, hoặc halogen. Nhóm X₁₁ của -SX₁₁ cũng có thể được chọn từ C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ haloalkyl, nhóm aryl (như nhóm phenyl) không được thế, hoặc được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, hoặc halogen, như clo, brom hoặc flo.

Theo một số phương án, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (d) vòng chứa nito được thể hiện bằng hợp chất có công thức i sau:



Đề cập đến hợp chất có công thức i, mỗi -Y- mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -CH₂-, -CH(R₁₃')-, -C(R₁₃')₂-, -CH(aryl)-, -C(aryl)₂-, và -C(R₁₃')(aryl)-, và Z là -Y-, -O-, -S-, -S(O)-, -SO₂-, -NH-, -N(R₁₃')-, hoặc -N(aryl)-, trong đó mỗi R₁₃' độc lập là nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₂₀ alkyl (ví dụ, C₁-C₁₂ alkyl hoặc C₁-C₆ alkyl), mỗi aryl độc lập là phenyl hoặc naphtyl, m là số nguyên 1, 2 hoặc 3, và p là số nguyên 0, 1, 2, hoặc 3, với điều kiện nếu p là 0, thì Z là -Y-.

Theo các phương án khác nữa, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, (e) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc hợp chất có công thức iii sau đây:



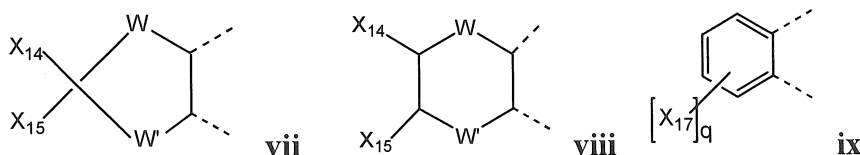
Đề cập đến các hợp chất có công thức ii và iii, X₁₄, X₁₅, và X₁₆ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, phenyl hoặc naphtyl, hoặc X₁₄ và X₁₅ cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 8 nguyên tử cacbon, p là số nguyên được chọn từ 0, 1, hoặc 2, và X₁₇ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, hoặc halogen.

Theo các phương án bổ sung, R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc hợp chất có công thức iii, như được thể hiện ở trên, trong đó X₁₄, X₁₅, và X₁₆ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₂ alkyl, phenyl hoặc naphtyl, hoặc X₁₄ và X₁₅ cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; p là số nguyên được chọn từ

0, 1, hoặc 2, và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, hoặc halogen.

Theo các phương án khác nữa, R^1 cho mỗi i, và R^2 cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc hợp chất có công thức iii, như được thể hiện ở trên, trong đó X_{14} , X_{15} , và X_{16} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, C_1 - C_6 alkyl, hoặc phenyl hoặc X_{14} và X_{15} cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; p là số nguyên được chọn từ 0, 1, hoặc 2, và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, hoặc halogen.

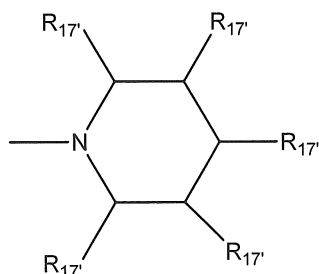
Theo một số phương án, các nhóm R^1 liên kế trực tiếp, và các nhóm R^2 liên kế trực tiếp, trong mỗi trường hợp độc lập cùng nhau tạo thành nhóm được thể hiện bởi các hợp chất có công thức vii, viii, hoặc ix sau đây:



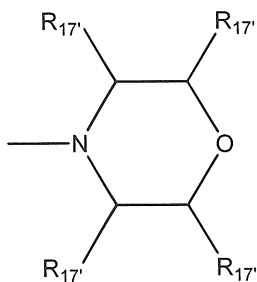
Đề cập đến các hợp chất có công thức vii và viii, W và W' W và W' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -O-, -N(X_7)-, -C(X_{14})-, và -C(X_{17})-. Các tham khảo thêm về các hợp chất có công thức vii, viii, và ix, X_{14} và X_{15} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, phenyl hoặc naphtyl, hoặc X_{14} và X_{15} cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 8 nguyên tử cacbon; và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, hoặc halogen. Đề cập đến hợp chất có công thức ix, q là số nguyên được chọn từ 0, 1, 2, 3, và 4.

Trong một số phương án theo sáng chế, vòng chứa nitơ được thể hiện bằng hợp chất có công thức i, có thể được thể hiện theo cách khác bằng các hợp chất có công thức - (XI) và -(XII) sau đây:

Công thức-(XI)



Công thức-(XII)



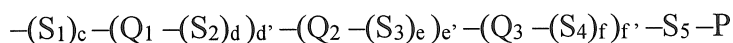
Trong trường hợp của các hợp chất có công thức-(XI) và -(XII), $R_{17'}$ trong mỗi ví dụ độc lập được chọn từ hydro hoặc alkyl, như C_1 - C_6 alkyl, hoặc aryl tùy ý được thế, như phenyl tùy ý được thế, và do đó, vòng chứa nitơ được chọn từ piperidenyl được thế hoặc không được thế (ví dụ, hợp chất có công thức-XI), và/hoặc morpholinyl được thế hoặc không được thế (ví dụ, hợp chất có công thức-XII).

Theo các phương án khác nữa của sáng chế, các nhóm R^1 liền kề trực tiếp, và các nhóm R^2 liền kề trực tiếp, trong mỗi trường hợp độc lập cùng nhau tạo thành nhóm được thể hiện bởi các hợp chất có công thức vii, viii, hoặc ix, như được thể hiện ở trên, trong đó W và W' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -O-, -N(X_7)-, -C(X_{14})-, và -C(X_{17})-. Mỗi nhóm X_{14} và X_{15} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl, phenyl hoặc naphthyl, hoặc X_{14} và X_{15} cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, hoặc halogen. Ngoài ra, q là số nguyên được chọn từ 0 đến 3.

Theo các phương án bổ sung khác nữa của sáng chế, các nhóm R^1 liền kề trực tiếp, và các nhóm R^2 liền kề trực tiếp, trong mỗi trường hợp độc lập cùng nhau tạo thành nhóm được thể hiện bởi các hợp chất có công thức vii, viii, hoặc ix, như được thể hiện ở trên, trong đó W và W' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -O-, -N(X_7)-, -C(X_{14})-, và -C(X_{17})-. Các nhóm X_{14} và X_{15} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, C_1 - C_6 alkyl, phenyl hoặc naphthyl, hoặc X_{14} và X_{15} cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C_1 - C_6 alkyl, C_1 - C_6 alkoxy, hoặc halogen. Ngoài ra, q là số nguyên được chọn từ 0 đến 3.

Các nhóm khác nhau của các hợp chất vòng ngưng tụ indeno và các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, R^1 cho mỗi i, R^2 cho mỗi t, mỗi Q' , và Q''' , có thể độc lập bao gồm hoặc được chọn từ, nhóm kéo dài L được thể hiện bằng hợp chất có công thức III sau đây:

III



Như được sử dụng ở đây và yêu cầu bảo hộ thuật ngữ “nhóm kéo dài L” và các thuật ngữ tương tự, như chất kéo dài và nhóm kéo dài, có nghĩa là trong mỗi trường hợp, nhóm độc lập được chọn từ nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức III như được thể hiện ở trên, và như được mô tả chi tiết hơn dưới đây.

Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “gắn” có nghĩa là được liên kết trực tiếp với hoặc được liên kết không trực tiếp với qua nhóm khác. Vì vậy, ví dụ, theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây, L có thể được liên kết trực tiếp với các hợp chất theo sáng chế làm phân tử thể trên hợp chất này, hoặc L có thể là phân tử thể trên nhóm khác (như nhóm được thể hiện bởi R¹) được liên kết trực tiếp với hợp chất này (tức là, L được liên kết không trực tiếp với hợp chất này). mặc dù không giới hạn ở đây, theo các phương án không giới hạn khác nhau, L có thể được gắn vào hợp chất này sao cho mở rộng hoặc kéo dài hợp chất ở trạng thái được hoạt hóa sao cho tỷ lệ hấp thụ của hợp chất được mở rộng (ví dụ, hợp chất đổi màu theo ánh sáng) được gia tăng như được so sánh với hợp chất không có chất kéo dài. Mặc dù không giới hạn ở đây, theo các phương án không giới hạn khác nhau, vị trí gắn L trên hợp chất có thể được chọn sao cho L kéo dài hợp chất trong ít nhất một hướng song song với hoặc hướng vuông góc với momen lưỡng cực chuyển tiếp lý thuyết của dạng hoạt hóa của hợp chất này. Xem xét vị trí của L, sau đó nó có thể được gắn vào hợp chất tại vị trí của nhóm Q' hoặc Q'''. Các hợp chất theo sáng chế có thể có ít nhất một nhóm Q' hoặc Q''' ở các vị trí được xác định, và tùy ý một hoặc nhiều nhóm L. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ “momen lưỡng cực chuyển tiếp lý thuyết” dùng để chỉ sự phân cực lưỡng cực chuyển tiếp được tạo ra bởi tương tác của bức xạ điện từ với phân tử này. Xem, ví dụ, IUPAC Compendium of Chemical Technology, 2nd Ed., International Union of Pure and Applied Chemistry (1997).

Với một số phương án, mỗi Q₁, Q₂, và Q₃ của hợp chất có công thức III mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ, nhóm hóa trị hai được chọn từ, nhóm thiom không được thể hoặc được thể, nhóm vòng béo không được thể hoặc được thể, nhóm dị vòng không được thể hoặc được thể, và hỗn hợp gồm chúng. Các phân tử thể Q₁, Q₂, và Q₃ có thể được chọn từ, nhóm được thể hiện bởi P, mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly(C₁-C₁₈ alkoxy), C₁-C₁₈ alkoxycarbonyl, C₁-C₁₈ alkylcarbonyl, C₁-C₁₈ alkoxycarbonyloxy, aryloxy carbonyloxy, perflo(C₁-C₁₈)alkoxy, perflo(C₁-C₁₈)alkoxycarbonyl, perflo(C₁-

C₁₈)alkylcarbonyl, perflo(C₁-C₁₈)alkylamino, di-(perflo(C₁-C₁₈)alkyl)amino, perflo(C₁-C₁₈)alkylthio, C₁-C₁₈ alkylthio, C₁-C₁₈ axetyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl, C₃-C₁₀ xycloalkoxy, nhóm C₁-C₁₈ alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được thế một lần bằng xyano, halo, hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, hoặc được thế nhiều lần bằng halo, và nhóm bao gồm một trong số các hợp chất có công thức sau: -M(T)_(t-1) và -M(OT)_(t-1), trong đó M được chọn từ nhôm, antimon, tantali, titan, ziricon và silicon, T được chọn từ các gốc chức hữu cơ, các gốc hydrocacbon chức hữu cơ, các gốc hydrocacbon béo và các gốc hydrocacbon thơm, và t là hóa trị của M.

Mỗi chỉ số dưới c, d, e, và f của hợp chất có công thức-III độc lập là số nguyên được chọn từ 0 đến 20, bao gồm các giá trị nêu trên. Mỗi nhóm S₁, S₂, S₃, S₄, và S₅ của hợp chất có công thức-III mỗi lần xuất hiện độc lập là đơn vị đệm được chọn từ các loại (1), (2) và (3) dưới đây. Các đơn vị đệm loại (1) bao gồm, -(CH₂)_g-, -(CF₂)_h-, -Si(Z')₂(CH₂)_g-, -(Si(CH₃)₂O)_h-, trong đó mỗi Z' độc lập được chọn từ hydro, C₁-C₁₈ alkyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl và aryl; g mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ 1 đến 20; h là số nguyên bao gồm từ 1 đến 16. Các đơn vị đệm loại (2) bao gồm, -N(Z)-, -C(Z)=C(Z)-, -C(Z)=N-, -C(Z')-C(Z')- hoặc liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, C₁-C₁₈ alkyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl và aryl, và Z' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl và aryl. Các đơn vị đệm loại (3) bao gồm, -O-, -C(O)-, -C≡C-, -N=N-, -S-, -S(O)-, -S(O)(O)-, -(O)S(O)-, -(O)S(O)O-, -O(O)S(O)O-, hoặc gốc C₁-C₂₄ alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh, gốc C₁-C₂₄ alkylen này là không được thế, được thế một lần bởi xyano hoặc halo, hoặc được thế nhiều lần bởi halo. Liên quan đến các đơn vị đệm mà từ đó S₁, S₂, S₃, S₄, và S₅ có thể được chọn, với điều kiện là nếu hai đơn vị đệm bao gồm 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 không liên kết trực tiếp với nhau. Liên quan đến các đơn vị đệm mà từ đó S₁, S₂, S₃, S₄, và S₅ có thể được chọn, với điều kiện nữa là nếu S₁ được liên kết với hợp chất theo sáng chế, như hợp chất có công thức I, và S₅ được liên kết với P, thì S₁ và S₅ trong mỗi trường hợp được liên kết sao cho hai nguyên tử khác loại không liên kết trực tiếp với nhau.

Đề cập hơn nữa đến hợp chất có công thức-III, P được chọn từ: hydroxy, amino, C₂-C₁₈ alkenyl, C₂-C₁₈ alkynyl, azido, silyl, siloxy, silylhydrua, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, thio, isoxyanato, thioisoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, 2-(acryloyloxy)ethylcarbamyl, 2-(metacryloyloxy)ethylcarbamyl, aziridinyl,

alyloxyacacbonxyloxy, epoxy, axit carboxylic, este carboxylic, acryloylamino, metacryloylamino, aminocacbonyl, C₁-C₁₈ alkylaminocacbonyl, aminocacbonyl(C₁-C₁₈)alkyl, C₁-C₁₈ alkyloxyacacbonxyloxy, halocacbonyl, hydro, aryl, hydroxy(C₁-C₁₈)alkyl, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, amino(C₁-C₁₈)alkyl, C₁-C₁₈ alkylamino, di-(C₁-C₁₈)alkylamino, C₁-C₁₈ alkyl(C₁-C₁₈)alkoxy, C₁-C₁₈ alkoxy(C₁-C₁₈)alkoxy, nitro, poly(C₁-C₁₈)alkyl ete, (C₁-C₁₈)alkyl(C₁-C₁₈)alkoxy(C₁-C₁₈)alkyl, polyetylenoxy, polypropyleneoxy, etylenyl, acryloyl, acryloyloxy(C₁-C₁₈)alkyl, metacryloyl, acryloyloxy(C₁-C₁₈)alkyl, 2-cloacryloyl, 2-phenylacryloyl, acryloyloxyphenyl, 2-cloacryloylamino, 2-phenylacryloylamino, oxetanyl, glycidil, xyano, isoxyanato(C₁-C₁₈)alkyl, este axit itaconic, vinyl ete, vinyl este, dẫn xuất styren, các polyme tinh thể lỏng mạch thẳng và mạch nhánh, các dẫn xuất siloxan, các dẫn xuất etylenimin, các dẫn xuất axit maleic, các dẫn xuất axit fumaric, các dẫn xuất axit xinamic không được thể, các dẫn xuất axit xinamic được thể bằng ít nhất một trong số metyl, metoxy, xyano và halogen, hoặc các nhóm hóa trị một hoặc hóa trị hai đối ảnh hoặc không-đối ảnh được thể hoặc không được thể được chọn từ các gốc steroid, các gốc terpenoit, các gốc alkaloit và hỗn hợp gồm chúng, trong đó các phần tử thể này độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, amino, C₃-C₁₀ xycloalkyl, C₁-C₁₈ alkyl(C₁-C₁₈)alkoxy, flo(C₁-C₁₈)alkyl, xyano, xyano(C₁-C₁₈)alkyl, xyano(C₁-C₁₈)alkoxy hoặc hỗn hợp gồm 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 thể hoặc được thể, hoặc P là hợp chất đổi màu theo ánh sáng được thể hoặc không được thể.

Mỗi chỉ số dưới d', e' và f' của hợp chất có công thức-III có thể độc lập được chọn từ 0, 1, 2, 3, và 4, với điều kiện tổng của d' + e' + f' ít nhất là một trong một số phương án, hoặc ít nhất là 2 trong một số phương án khác, hoặc ít nhất là 3 trong một số phương án bổ sung.

Theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây, nếu p là nhóm có thể polyme hóa, thì nhóm có thể polyme hóa này có thể là nhóm chức bất kỳ thích hợp để tham gia vào phản ứng polyme hóa. Các ví dụ không giới hạn về các phản ứng polyme hóa bao gồm các phản ứng được mô tả trong định nghĩa về "polyme hóa" trong Hawley's Condensed Chemical Dictionary Thirteenth Edition, 1997, John Wiley & Sons, các trang 901-902, được kết hợp ở đây để tham khảo. Ví dụ, mặc dù không làm giới hạn trong bản mô tả này, các phản ứng polyme hóa bao gồm: "polyme hóa cộng," trong đó các gốc tự

do là các chất ban đầu phản ứng với liên kết đôi của một monome bằng cách bổ sung vào nó ở một phía đồng thời tạo thành điện tử tự do mới bên phía còn lại; “polyme hóa ngưng tụ,” trong đó hai phân tử phản ứng kết hợp để tạo thành phân tử lớn hơn có loại bỏ phân tử nhỏ, như phân tử nước; và “polyme hóa ghép đôi oxy hóa.” Hơn nữa, các ví dụ không giới hạn về các nhóm có khả năng polyme hóa bao gồm hydroxy, acryloxy, metacryloxy, 2-(acryloxy)ethylcarbamyl, 2-(metacryloxy)ethylcarbamyl, isoxyanat, aziridin, alylcacbonat, và epoxy, ví dụ, oxiranylmetyl.

Theo phương án không giới hạn khác nữa, P có thể được chọn từ polyme tinh thể lỏng mạch chín hoặc mạch bên và mesogen tinh thể lỏng. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ “mesogen” tinh thể lỏng có nghĩa là các phân tử tinh thể lỏng giống như que cứng hoặc giống hình đĩa. Hơn nữa, như được sử dụng ở đây thuật ngữ “polyme tinh thể lỏng mạch thẳng” dùng để chỉ polyme có mesogen tinh thể lỏng trong cấu trúc khung chính (tức là, mạch thẳng) của polyme. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ “polyme tinh thể lỏng mạch bên” dùng để chỉ polyme có mesogen tinh thể lỏng gắn vào polyme ở các mạch nhánh. Mặc dù không làm giới hạn trong bản mô tả này, nói chung, các mesogen được tạo thành từ hai hoặc nhiều vòng thơm làm hạn chế sự chuyển động của polyme tinh thể lỏng. Các ví dụ về mesogen tinh thể lỏng hình que thích hợp bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở: các este thơm được thế hoặc không được thế, các hợp chất thơm tuyến tính được thế hoặc không được thế, và terphenyl được thế hoặc không được thế.

Theo phương án không giới hạn khác, P có thể được chọn từ gốc steroid, ví dụ nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất cholesteolic.

Theo một số phương án của sáng chế, R^1 cho mỗi i, và R^2 cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ nhóm B. Với một số phương án, nhóm B có thể được chọn từ (i) hydro, C_1 - C_{18} alkyl, C_2 - C_{18} alkyliden, C_2 - C_{18} alkylidyn, vinyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl, C_1 - C_{18} haloalkyl, alyl, halogen, và benzyl không được thế hoặc được thế một lần bằng ít nhất một trong số C_1 - C_{18} alkyl và C_1 - C_{18} alkoxy. Theo các phương án khác nữa, nhóm B có thể được chọn từ (i) C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl, C_1 - C_{12} haloalkyl và benzyl không được thế hoặc được thế một lần bằng ít nhất một trong số C_1 - C_6 alkyl và C_1 - C_6 alkoxy. Theo các phương án khác nữa, nhóm B có thể được chọn từ (i) C_1 - C_6 alkyl, C_3 - C_5 xycloalkyl, C_1 - C_6 haloalkyl và benzyl không được thế hoặc được thế một lần bằng ít nhất một trong số C_1 - C_3 alkyl và C_1 - C_3 alkoxy.

Theo các phương án theo sáng chế, nhóm B có thể được chọn từ (ii) phenyl được thế một lần ở vị trí *para* với ít nhất một phần tử thế được chọn từ: C₁-C₁₈ alkoxy, C₁-C₂₀ alkylen mạch thẳng hoặc phân nhánh, C₁-C₄ polyoxyalkylen mạch thẳng hoặc phân nhánh, C₃-C₂₀ alkylen vòng, phenylen, naphtylen, C₁-C₁₈ alkyl được thế phenylen, mono- hoặc poly-uretan(C₁-C₂₀)alkylen, mono- hoặc poly-este(C₁-C₂₀)alkylen, mono- hoặc poly-cacbonat(C₁-C₂₀)alkylen, polysilanylen, polysiloxanylen và hỗn hợp gồm chúng, trong đó ít nhất một phần tử thế được liên kết với nhóm aryl của vật liệu đổi màu theo ánh sáng.

Theo một số phương án khác nữa, nhóm B có thể được chọn từ (iii) -CH(CN)₂ và -CH(COOX₁)₂, trong đó X₁ được chọn từ ít nhất một trong số hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng phenyl, phenyl(C₁-C₁₈)alkyl được thế một lần bằng C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ haloalkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl và C₁-C₁₈ alkoxy, và nhóm kéo dài L. Với một số phương án bổ sung, nhóm B có thể được chọn từ -CH(CN)₂ và -CH(COOX₁)₂, trong đó X₁ được chọn từ ít nhất một trong số hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₂ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng phenyl, phenyl(C₁-C₆)alkyl được thế một lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₆ alkyl và C₁-C₆ alkoxy; và nhóm kéo dài L. Theo các phương án khác, nhóm B có thể được chọn từ -CH(CN)₂ và -CH(COOX₁)₂, trong đó X₁ được chọn từ hydro, C₁-C₆ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng phenyl, phenyl(C₁-C₃)alkyl được thế một lần bằng C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl và C₁-C₃ alkoxy; và nhóm kéo dài L.

Theo một số phương án, nhóm B có thể được chọn từ (iv) -CH(X₂)(X₃). Nhóm X₂ có thể được chọn từ ít nhất một trong số hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl và C₁-C₁₈ alkoxy. Nhóm X₃ có thể được chọn từ ít nhất một trong số -COOX₁, -COX₁, -COX₄, và -CH₂OX₅, trong đó, X₄ được chọn từ ít nhất một trong số morpholino, piperidino, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl, và nhóm được chọn từ phenylamino và diphenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl

hoặc C₁-C₁₈ alkoxy; và X₅ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, -C(O)X₂, C₁-C₁₈ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng (C₁-C₁₈)alkoxy hoặc phenyl, phenyl(C₁-C₁₈)alkyl được thế một lần bằng (C₁-C₁₈)alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl và C₁-C₁₈ alkoxy.

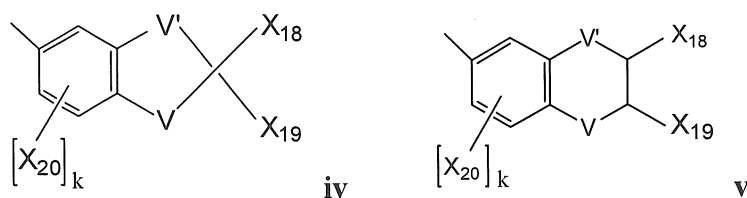
Theo một số phương án khác nữa, nhóm B có thể được chọn từ -CH(X₂)(X₃). Nhóm X₂ có thể được chọn từ ít nhất một trong số nhóm kéo dài L, C₁-C₁₂ alkyl, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₆ alkyl và C₁-C₆ alkoxy. Nhóm X₃ có thể được chọn từ ít nhất một trong số -COOX₁, -COX₁, -COX₄, và -CH₂OX₅, trong đó: X₄ được chọn từ ít nhất một trong số morpholino, piperidino, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl, và nhóm được chọn từ phenylamino và diphenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy; và X₅ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, -C(O)X₂, C₁-C₁₂ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng (C₁-C₁₂)alkoxy hoặc phenyl, phenyl(C₁-C₁₂)alkyl được thế một lần bằng (C₁-C₁₂)alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₆ alkyl và C₁-C₆ alkoxy.

Theo một số phương án bổ sung khác nữa, nhóm B có thể được chọn từ -CH(X₂)(X₃). Nhóm X₂ có thể được chọn từ ít nhất một trong số nhóm kéo dài L, C₁-C₆ alkyl, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl và C₁-C₃ alkoxy. Nhóm X₃ được chọn từ ít nhất một trong số -COOX₁, -COX₁, -COX₄, và -CH₂OX₅, trong đó: nhóm X₄ có thể được chọn từ ít nhất một trong số morpholino, piperidino, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl, và nhóm được chọn từ phenylamino và diphenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy; và X₅ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, -C(O)X₂, C₁-C₆ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng (C₁-C₆)alkoxy hoặc phenyl, phenyl(C₁-C₁₂)alkyl được thế một lần bằng (C₁-C₆)alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl và C₁-C₃ alkoxy.

Theo một số phương án, nhóm B có thể được chọn từ (v) nhóm aryl không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần; 9-julolidinyl; hoặc nhóm dị vòng thơm không được

thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ pyridyl, furanyl, benzofuran-2-yl, benzofuran-3-yl, thienyl, benzothien-2-yl, benzothien-3-yl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazoyl, benzopyridyl, indoliny, hoặc fluorenyl. Mỗi phần tử thế aryl và vòng thơm dị vòng có thể mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ: (1) nhóm kéo dài L; (2) $-\text{COOX}_1$ hoặc $-\text{C(O)X}_6$; (3) aryl, halogen, haloaryl, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkylaryl, và nhóm aryl được thế một hoặc hai lần bằng $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl hoặc $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkoxy; (4) $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkyl, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkyloxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, aryl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, aryloxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkylaryl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxyaryl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ haloalkyl, và mono($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl; (5) $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkoxy, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkoxy, xycloalkyloxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy, aryl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy, aryloxy($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy, mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkylaryl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy, và mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxyaryl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkoxy; (6) aminocacbonyl, aminocacbonyl($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkylen, amino, mono- hoặc di-alkylamino, diarylamino, piperazino, N-($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkyl-piperazino, N-aryl piperazino, aziridino, indolino, piperidino, morpholino, thiomorpholino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pyrrolidyl, hydroxy, acryloxy, metacryloxy, và halogen; (7) $-\text{OX}_7$ hoặc $-\text{N(X}_7)_2$; (8) $-\text{SX}_{11}$; (9) vòng chứa nito được thể hiện bằng hợp chất có công thức i; (10) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc iii; và (11) nhóm không được thế hoặc được thế một lần được chọn từ pyrazolyl, imidazolyl, pyrazolinyl, imidazolinyl, pyrrolidinyl, phenothiazinyl, phenoxazinyl, phenazinyl, hoặc acridinyl, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkoxy, phenyl, hydroxy, amino hoặc halogen.

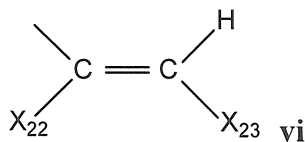
Mỗi phần tử thế aryl và vòng thơm dị vòng có thể được chọn bổ sung và độc lập mỗi lần xuất hiện từ, (12) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức iv hoặc công thức v,



Đối với các công thức iv và v: (I) V' độc lập được chọn đối với mỗi công thức này từ $-\text{O}-$, $-\text{CH}-$, $\text{C}_1\text{-C}_6$ alkylen, và $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ xycloalkylen; (II) V độc lập được chọn đối với mỗi công thức này từ $-\text{O}-$ hoặc $-\text{N(X}_{21})-$, trong đó X_{21} là hydro, nhóm kéo dài L, $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ alkyl, và $\text{C}_2\text{-C}_{18}$ axyl, với điều kiện nếu V là $-\text{N(X}_{21})-$, thì V' là $-\text{CH}_2-$; (III) mỗi X_{18} và

X₁₉ độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, và C₁-C₁₈ alkyl; và (IV) k được chọn từ 0, 1, và 2, và mỗi X₂₀ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, hydroxy và halogen.

Mỗi phần tử thế aryl và vòng thơm dị vòng có thể được chọn bổ sung và độc lập mỗi lần xuất hiện từ, (13) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức vi,



Đối với hợp chất có công thức vi: (I) X₂₂ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, và C₁-C₁₈ alkyl; và (II) X₂₃ được chọn từ nhóm kéo dài L và nhóm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ naphthyl, phenyl, furanyl và thienyl, trong đó mỗi phần tử thế mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, và halogen.

Theo một số phương án khác nữa, nhóm B có thể được chọn từ nhóm aryl không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần; 9-julolidinyl; hoặc nhóm dị vòng thơm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ pyridyl, furanyl, benzofuran-2-yl, benzofuran-3-yl, thienyl, benzothien-2-yl, benzothien-3-yl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazoyl, benzopyridyl, indolinyl, hoặc fluorenyl. Mỗi phần tử thế aryl và vòng thơm dị vòng mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ: (1) nhóm kéo dài L; (2) -COOX₁ hoặc -C(O)X₆; (3) aryl, haloaryl, C₃-C₇ xycloalkylaryl, và nhóm aryl được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₂ alkyl hoặc C₁-C₁₂ alkoxy; (4) C₁-C₁₂ alkyl, C₃-C₇ xycloalkyl, C₃-C₇ xycloalkyloxy(C₁-C₁₂)alkyl, aryl(C₁-C₁₂)alkyl, aryloxy(C₁-C₁₂)alkyl, mono- hoặc di- (C₁-C₁₂)alkyl-aryl(C₁-C₁₂)alkyl, mono- hoặc di- (C₁-C₁₂)alkoxyaryl(C₁-C₁₂)alkyl, haloalkyl, và mono(C₁-C₁₂)alkoxy(C₁-C₁₂)alkyl; (5) C₁-C₁₂ alkoxy, C₃-C₇ xycloalkoxy, xycloalkyloxy(C₁-C₁₂)alkoxy, aryl(C₁-C₁₂)alkoxy, aryloxy(C₁-C₁₂)alkoxy, mono- hoặc di- (C₁-C₁₂)alkylaryl(C₁-C₁₂)alkoxy, và mono- hoặc di- (C₁-C₁₂)alkoxyaryl(C₁-C₁₂)alkoxy; (6) amido, amino, mono- hoặc di-alkylamino, diarylamino, piperazino, N-(C₁-C₁₈)alkylpiperazino, N-arylpiperazino, aziridino, indolino, piperidino, morpholino, thiomorpholino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pyrrolidyl, hydroxy, acryloxy, metacryloxy, và halogen; (7) -OX₇ hoặc -N(X₇)₂; (8) nhóm không được thế hoặc được thế một lần được chọn từ pyrazolyl, imidazolyl, pyrazolinyl, imidazolinyl, pyrrolidinyl, phenothiazinyl, phenoxazinyl,

phenazinyl, hoặc acridinyl, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, phenyl, hydroxy, amino hoặc halogen.

Theo một số phương án khác nữa, nhóm B có thể được chọn từ nhóm aryl không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần; 9-julolidinyl; hoặc nhóm dị vòng thơm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ pyridyl, furanyl, benzofuran-2-yl, benzofuran-3-yl, thienyl, benzothien-2-yl, benzothien-3-yl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazoyl, benzopyridyl, indolinyl, hoặc fluorenyl.

Mỗi phần tử thế có thể mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ: (1) nhóm kéo dài L; (2) -C(O)X₆; (3) aryl, haloaryl, C₃-C₇ xycloalkylaryl, và nhóm aryl được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₂ alkyl hoặc C₁-C₁₂ alkoxy; (4) C₁-C₆ alkyl, C₃-C₅ xycloalkyl, C₃-C₅ xycloalkyloxy(C₁-C₆)alkyl, aryl(C₁-C₆)alkyl, aryloxy(C₁-C₆)alkyl, mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkylaryl(C₁-C₆)alkyl, mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkoxyaryl(C₁-C₆)alkyl, haloalkyl, và mono(C₁-C₆)alkoxy(C₁-C₆)alkyl; (5) C₁-C₆ alkoxy, C₃-C₅ xycloalkoxy, xycloalkyloxy(C₁-C₆)alkoxy, aryl(C₁-C₆)alkoxy, aryloxy(C₁-C₆)alkoxy, mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkylaryl(C₁-C₆)alkoxy, và mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkoxyaryl(C₁-C₆)alkoxy; (6) aminocarbonyl, aminocarbonyl(C₁-C₁₈)alkylen, amino, mono- hoặc di-alkylamino, diarylamino, piperazino, N-(C₁-C₁₈)alkylpiperazino, N-arylpiperazino, aziridino, indolino, piperidino, morpholino, thiomorpholino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pyrrolidyl, hydroxy, acryloxy, metacryloxy, và halogen; (7) -OX₇ hoặc -N(X₇)₂; và (8) nhóm không được thế hoặc được thế một lần được chọn từ pyrazolyl, imidazolyl, pyrazolinyl, imidazoliny, pyrrolidinyl, phenothiazinyl, phenoxazinyl, phenazinyl, hoặc acridinyl, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃ alkoxy, phenyl, hydroxy, amino hoặc halogen.

Nhóm R³ và R⁴ của các hợp chất vòng ngưng tụ indeno, ví dụ được thể hiện bằng hợp chất có công thức I, và các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno, ví dụ được thể hiện bằng hợp chất có công thức II, theo sáng chế mỗi nhóm có thể độc lập được chọn từ: (i) hydro, C₁-C₂₀ alkyl, C₁-C₂₀ haloalkyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl, alyl, benzyl, hoặc benzyl được thế một lần, các phần tử thế benzyl này được chọn từ halogen, C₁-C₂₀ alkyl hoặc C₁-C₂₀ alkoxy; (ii) nhóm không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần được chọn từ phenyl, naphthyl, phenantryl, pyrenyl, quinolyl, isoquinolyl, benzofuranyl, thienyl, benzothienyl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazolyl, hoặc indolyl, các phần tử thế này trong mỗi trường hợp độc lập được chọn từ halogen, C₁-C₂₀ alkyl hoặc C₁-C₂₀ alkoxy; (iii) phenyl

được thế một lần, phần tử thế này nằm ở vị trí *para* là $-(CH_2)_t-$ hoặc $-O-(CH_2)_t-$, trong đó t là số nguyên 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, phần tử thế này được liên kết với nhóm aryl là thành viên của chất liệu đổi màu theo ánh sáng; (iv) nhóm $-CH(R^{10})G$, trong đó R^{10} là hydro, C_1 - C_{20} alkyl hoặc các nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, phenyl hoặc naphthyl, và G là $-CH_2OR^{11}$, trong đó R^{11} là hydro, $-C(O)R^{10}$, C_1 - C_{20} alkyl, C_1 - C_{20} alkoxy(C_1 - C_{20})alkyl, phenyl(C_1 - C_{20})alkyl, mono(C_1 - C_{20})alkoxy được thế phenyl(C_1 - C_{20})alkyl, hoặc các nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, phenyl hoặc naphthyl, mỗi trong số các phần tử thế phenyl và naphthyl này là C_1 - C_{20} alkyl hoặc C_1 - C_{20} alkoxy.

Theo các phương án khác, (v) R^3 và R^4 có thể cùng nhau tạo ra phần tử thế spiro được chọn từ vòng spiro-carboxylic được thế hoặc không được thế chứa từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon, vòng spiro-heteroxylic được thế hoặc không được thế chứa 1 hoặc 2 nguyên tử oxy và từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon bao gồm nguyên tử spirocacbon. Mỗi vòng spiro-carboxylic và spiro-heteroxylic được phân cách bằng 0, 1 hoặc 2 vòng benzen. Các phần tử thế của vòng spiro có thể được chọn từ hydro hoặc C_1 - C_{20} alkyl (ví dụ, C_1 - C_6 alkyl).

Theo các phương án khác nữa theo sáng chế, mỗi nhóm R^3 và R^4 độc lập được chọn từ hydro, C_1 - C_8 alkyl, C_1 - C_8 haloalkyl, và C_3 - C_7 xycloalkyl. Theo cách khác, R^3 và R^4 có thể cùng nhau tạo thành phần tử thế spiro được chọn từ vòng spiro-carboxylic được thế hoặc không được thế chứa từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon.

Các nhóm B và B' của các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, ví dụ được thể hiện bằng hợp chất có công thức II, mỗi nhóm này có thể độc lập được chọn từ các lớp, các nhóm và các ví dụ như được mô tả từ trước ở đây dùng để chỉ nhóm B.

Theo cách khác, với một số phương án B và B' có thể cùng nhau tạo thành fluoren-9-yliden, fluoren-9-yliden được thế một hoặc hai lần, hoặc vòng hydrocacbon xoắn-một vòng C_3 - C_{12} no, vòng hydrocacbon xoắn-hai vòng C_7 - C_{12} no, vòng hydrocacbon xoắn-ba vòng C_7 - C_{12} no; và các phần tử thế fluoren-9-yliden này được chọn từ nhóm bao gồm C_1 - C_4 alkyl, C_1 - C_4 alkoxy, brom, flo và clo.

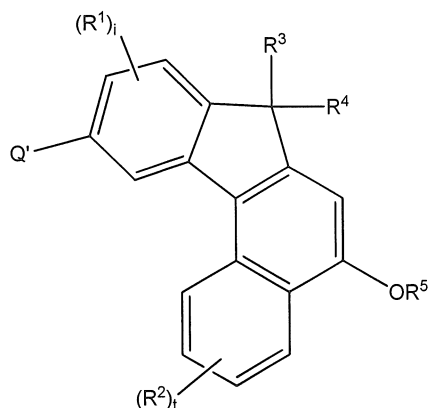
Theo cách khác nữa, với một số phương án B và B' có thể cùng nhau tạo thành fluoren-9-yliden, fluoren-9-yliden được thế một hoặc hai lần, hoặc vòng hydrocacbon xoắn-một vòng C_3 - C_8 no, các vòng hydrocacbon spiro-vòng đôi C_7 - C_{10} no, các vòng

hydrocacbon xoắn-ba vòng C₇-C₁₀ no, các phần tử thể fluoren-9-yliden này được chọn từ nhóm bao gồm C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃ alkoxy, flo và clo.

Với một số phương án, B và B' cùng nhau tạo thành fluoren-9-yliden, adamantyliden, bornyliden, norbornyliden hoặc bixyclo(3.3.1)nonan-9-yliden.

Với một số phương án theo sáng chế, hợp chất vòng ngưng tụ indeno được thể hiện bằng hợp chất có công thức Ia sau đây:

Ia

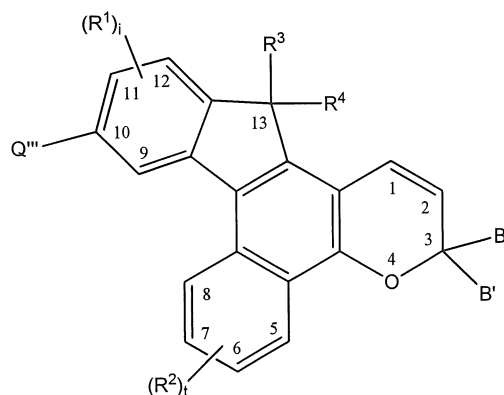


Liên quan đến hợp chất có công thức Ia, chỉ số dưới (t) được chọn từ 0 đến 4, và các nhóm R¹, R², R³, R⁴, R⁵, và Q', và chỉ số dưới (i) như được mô tả ở trên ở đây.

Theo các phương án khác nữa, Q' của hợp chất vòng ngưng tụ indeno được thể hiện bằng hợp chất có công thức Ia được chọn từ -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b và -C(O)NR^aR^a, trong đó mỗi R^a và R^b độc lập là như được mô tả từ trước ở đây.

Theo một số phương án theo sáng chế, hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno được thể hiện bằng hợp chất có công thức IIa sau đây:

IIa

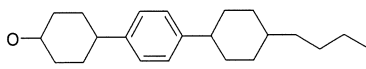
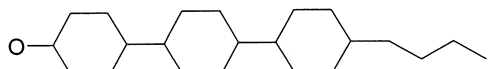
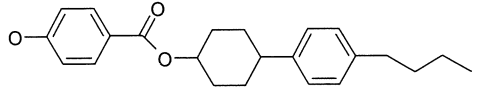
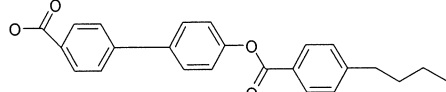
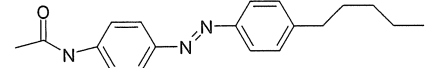
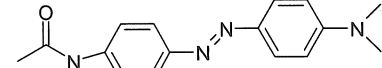
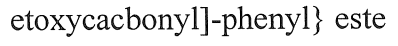


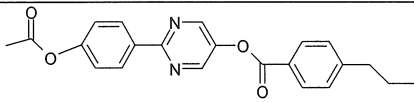
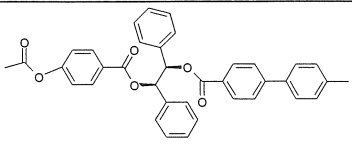
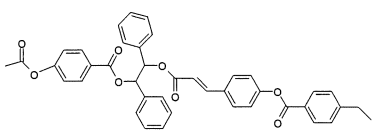
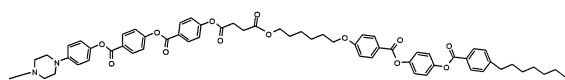
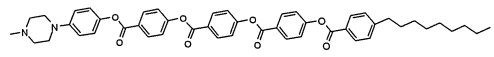
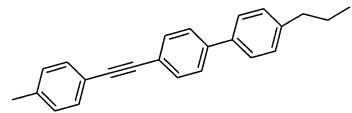
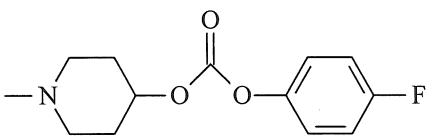
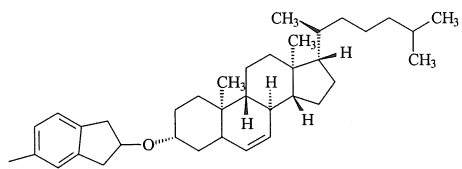
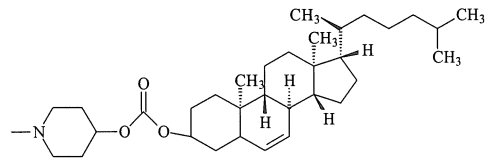
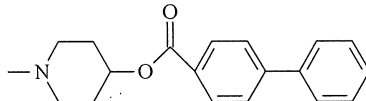
Liên quan đến hợp chất có công thức IIa, chỉ số dưới (t) được chọn từ 0 đến 4, và các nhóm R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Q''' , B và B', và chỉ số dưới (i) như được mô tả ở trên ở đây. Các số trong cấu trúc vòng của công thức IIa chỉ các vị trí mà các nhóm khác nhau có thể được liên kết vào đó. Ví dụ, mỗi B và B' được liên kết vào vị trí-3, mỗi R^3 và R^4 được liên kết vào Vị trí-13, và Q''' được liên kết vào Vị trí-10. (Các) nhóm R^1 có thể được liên kết vào các Vị trí-9, 11, và 12, và (các) nhóm R^2 có thể được liên kết vào các Vị trí-5, 6, 7, và 8.

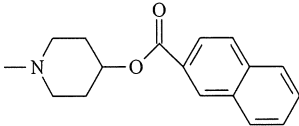
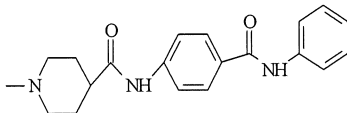
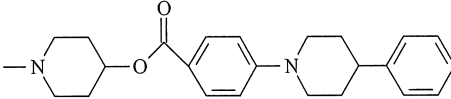
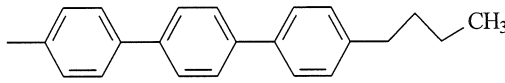
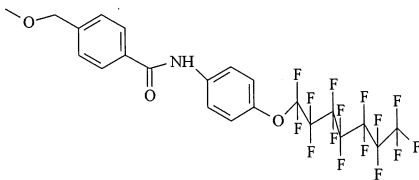
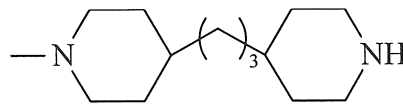
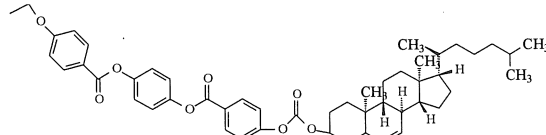
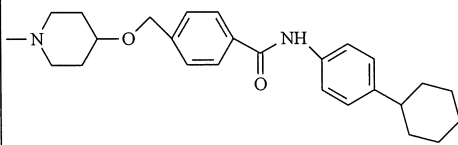
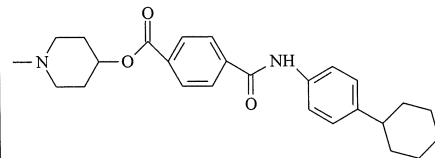
Theo các phương án khác nữa, vị trí-12 của hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno được thể hiện bằng hợp chất có công thức IIa, có hydro được liên kết vào đó, và Q''' là -CN.

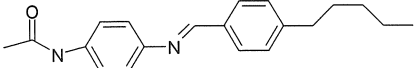
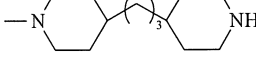
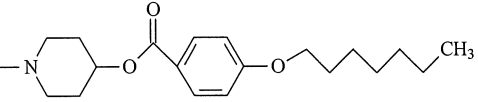
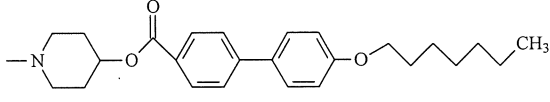
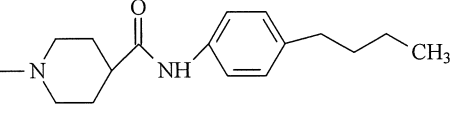
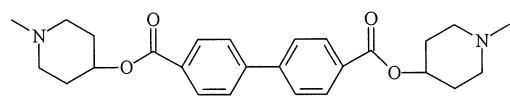
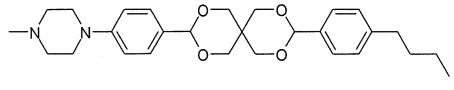
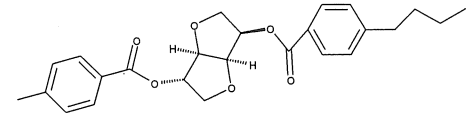
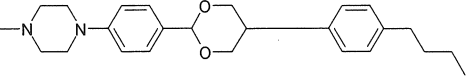
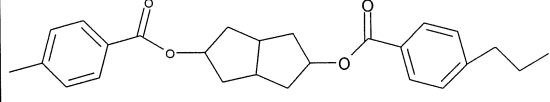
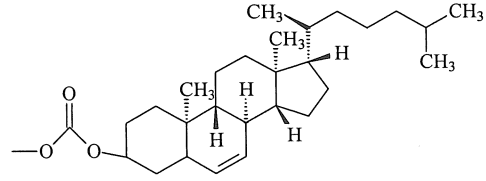
Theo các phương án bổ sung, và tham khảo thêm hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno được thể hiện bằng hợp chất có công thức IIa, i ít nhất là 1, Vị trí-12 có R^1 được liên kết vào đó, và Q''' được chọn từ $-N_3$, $-C(O)OR^a$, $-C\equiv C-R^a$, $-C(R^a)=C(R^a)(R^a)$, $-OC(O)R^a$, $-OC(O)OR^a$, $-SR^a$, và $-OS(O_2)R^b$.

Theo các phương án khác nữa theo sáng chế, mỗi nhóm kéo dài L của các hợp chất vòng ngưng tụ indeno và các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, có thể độc lập được chọn từ các hợp chất dưới đây.

(1) 4-[4-(4-butyl-xyclohexyl)-phenyl]-xyclohexyloxy 	(2) 4"-butyl-[1,1';4',1'"]terxyclohexan-4-yloxy 
(3) 4-[4-(4-butyl-phenyl)-xyclohexyl-oxycarbonyl]-phenoxy 	(4) 4'-(4-butyl-benzoyloxy)-biphenyl-4-cacbonoxyloxy 
(5) 4-(4-pentyl-phenylazo)-phenyl-carbamoyl 	(6) 4-(4-dimethylamino-phenylazo)-phenylcarbamoyl 
(7) {4-[5-(4-propyl-benzoyloxy)-pyrimidin-2-yl]-phenyl} este 	(8) {4-[2-(4'-metyl-biphenyl-4-cacbonoxyloxy)-1,2-diphenyl-etoxycarbonyl]-phenyl} este 

	
(9) 4-(1,2-diphenyl-2-{3-[4-(4-propylbenzoyloxy)-phenyl]-acryloyloxy}-etoxyacabonyl)-phenyl] este 	(10) 4-[4-(4-{4-[3-(6-{4-[4-(4-nonylbenzoyloxy)-phenoxy]-hexyloxy}-propionyloxy]-benzoyloxy}-benzoyloxy)-phenyl]-piperazin-1-yl 
(11) {4-[4-(4-{4-[4-(4-nonylbenzoyloxy)-benzoyloxy]-benzoyloxy}-benzoyloxy)-phenyl]-piperazin-1-yl} 	(12) 4-(4'-propyl-biphenyl-4-yletynyl)-phenyl 
(13) 4-(4-flo-phenoxyacabonyloxy)-piperidin-1-yl 	(14) 2-[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]phenantren-3-yloxy]-indan-5-yl 
(15) 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]phenantren-3-yloxyacabonyloxy]-piperidin-1-yl 	(16) 4-(biphenyl-4-cacabonyloxy)-piperidin-1-yl 
(17) 4-(naphtalen-2-cacabonyloxy)-	(18) 4-hydroxy-piperidin-1-yl

piperidin-1-yl 	
(19) 4-(4-phenylcarbamoyl-phenyl-carbamoyl)-piperidin-1-yl 	(20) 4-(4-(4-phenylpiperidin-1-yl)-benzoyloxy)-piperidin-1-yl 
(21) 4-butyl-[1,1';4',1'']terphenyl-4-yl 	(22) 4-(4-pentadecafluoroheptyloxy-phenylcarbamoyl)-benzyloxy 
(23) 4-(3-piperidin-4-yl-propyl)-piperidin-1-yl 	(24) 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]phenantren-3-yloxyacaconyloxy]-benzoyloxy}-phenoxyacaconyl)-phenoxymethyl 
(25) 4-[4-(4-xyclohexyl-phenyl-carbamoyl)-benzyloxy]-piperidin-1-yl 	(26) 4-[4-(4-xyclohexyl-phenyl-carbamoyl)-benzoyloxy]-piperidin-1-yl 
(27) N-{4-[(4-pentyl-benzyliden)-amino]phenyl}-axetamidyl	(28) 4-(3-piperidin-4-yl-propyl)-piperidin-1-yl

	
(29) 4-(4-hexyloxy-benzoyloxy)-piperidin-1-yl]	(30) 4-(4'-hexyloxy-biphenyl-4-cacbonlyoxy)-piperidin-1-yl
	
(31) 4-(4-butyl-phenylcarbamoyl)-piperidin-1-yl	(32) bis-[1-Tên của nhóm PC]-piperidin-4-yl] este của axit biphenyl-4,4'-dicarboxylic
	
(33) 4-(4-(9-(4-butylphenyl)-2,4,8,10-tetraoxaspiro[5.5]undec-3-yl)phenyl)piperazin-1-yl	(34) 4-(6-(4-butylphenyl)cacbonlyoxy-(4,8-dioxabixyclo[3.3.0]oct-2-yl))oxycacbonly)phenyl
	
(35) 1-{4-[5-(4-butyl-phenyl)-[1,3]dioxan-2-yl]-phenyl}-4-metyl-piperazin-1-yl	(36) 4-(7-(4-propylphenylcacbonlyoxy)-bixyclo[3.3.0]oct-2-yl)oxycacbonly)-phenyl
	
(37) 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-yloxycacbonlyoxy	
	

Các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, như được thể hiện bởi các hợp chất có công thức II và IIa, có thể được sử dụng để thể hiện chế phẩm và/hoặc sản phẩm đổi màu theo ánh sáng. Các ví dụ về sản phẩm có thể đổi màu theo ánh sáng bằng các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ

giới hạn ở, các chi tiết quang học, màn hình, cửa sổ (hoặc các vật trong suốt), gương, và thành phần hoặc các chi tiết của tế bào tinh thể lỏng. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ “quang học” có nghĩa là có liên quan đến hoặc được kết hợp với ánh sáng và/hoặc thị giác. Các ví dụ về các chi tiết quang học có thể đổi màu theo ánh sáng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các chi tiết liên quan đến mắt, các chi tiết hiển thị, cửa sổ, gương, và các chi tiết tế bào tinh thể lỏng. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ “liên quan đến mắt” có nghĩa là có liên quan đến hoặc được kết hợp với mắt và thị giác. Các ví dụ không giới hạn về các chi tiết liên quan đến mắt bao gồm các thấu kính điều chỉnh và không điều chỉnh, bao gồm các thấu kính tầm nhìn đơn hoặc đa tầm nhìn, có thể là các thấu kính đa tầm nhìn phân khúc hoặc không phân khúc (như, nhưng không chỉ giới hạn ở, thấu kính hai tròng, các thấu kính ba tròng và các thấu kính lũy tiến), cũng như các chi tiết khác được sử dụng để điều chỉnh, bảo vệ, hoặc cải thiện (thẩm mỹ hoặc khác) thị giác, bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở, các kính lúp, các thấu kính bảo vệ, kính che mặt, kính bảo hộ, cũng như, các thấu kính cho các thiết bị quang học (ví dụ, máy ảnh và kính thiên văn). Như được sử dụng ở đây thuật ngữ “hiển thị” có nghĩa là sự thể hiện các thông tin có thể nhìn thấy hoặc có thể đọc được bằng máy dưới dạng từ ngữ, các số, các biểu tượng, các thiết kế hoặc hình vẽ. Các ví dụ không giới hạn về các chi tiết hiển thị bao gồm màn hình, chi tiết điều khiển, và các chi tiết an ninh, như tem bảo đảm. Như được sử dụng ở đây thuật ngữ “cửa sổ” có nghĩa là độ mở phù hợp để cho phép truyền bức xạ qua. Các ví dụ không giới hạn về cửa sổ bao gồm các vật trong suốt trong máy bay và ô tô, kính chắn gió, các bộ lọc, cửa chớp, 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. 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 được sắp xếp. một ví dụ không nhằm giới hạn về chi tiết tế bào tinh thể lỏng là màn hình tinh thể lỏng.

Sản phẩm có thể đổi màu theo ánh sáng bằng các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế bằng các phương pháp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các phương pháp thẩm hút, các phương pháp đúc tại chỗ, các phương pháp phủ, các phương pháp phủ đúc trong, các phương pháp đúc trên, và các phương pháp tạo lớp. Đối với các phương pháp thẩm hút, hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno thường được khuếch tán vào vật liệu polyme của sản phẩm được tạo thành hoặc được chế tạo trước đó, như chất nền hoặc lớp phủ hoặc màng được phủ từ trước. Bước thẩm hút có thể được tạo thành

bằng cách nhúng vật liệu polyme của sản phẩm được tạo thành hoặc được chế tạo trước đó trong dung dịch chứa hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno, có hoặc không gia nhiệt. Sau đó, mặc dù không được yêu cầu, hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno có thể được liên kết với vật liệu polyme (ví dụ, của chất nền hoặc lớp phủ).

Đối với các phương pháp đúc tại chỗ, hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno có thể được trộn với: chế phẩm polyme và/hoặc oligome trong dung dịch hoặc dạng nóng chảy; hoặc chế phẩm monome ở dạng lỏng, sao cho tạo thành chế phẩm đổi màu theo ánh sáng có thể đúc được. Sau đó chế phẩm đổi màu theo ánh sáng có thể đúc được thường được đưa vào khoang của khuôn đúc (ví dụ, khuôn đúc thấu kính). Chế phẩm đổi màu theo ánh sáng có thể đúc được sau đó được hóa cứng (ví dụ, lưu hóa) trong khuôn sao cho tạo thành sản phẩm đổi màu theo ánh sáng.

Đối với sản phẩm bao gồm chất nền, các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế có thể được liên kết với ít nhất một phần của chất nền làm một phần của lớp phủ được kết nối với ít nhất là một phần của chất nền này. Chất nền này có thể là chất nền polyme hoặc chất nền vô cơ (như, nhưng không chỉ giới hạn ở, chất nền thủy tinh). Hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế có thể được kết hợp vào ít nhất một phần của chế phẩm phủ trước khi phủ chế phẩm phủ lên nền. Theo cách khác, chế phẩm phủ có thể được phủ lên nền, ít nhất là hóa cứng một phần, và sau đó hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế có thể được thấm vào ít nhất là một phần của lớp phủ. Như được sử dụng ở đây, các thuật ngữ “hóa cứng” và “sự hóa cứng” bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, lưu hóa, polyme hóa, tạo liên kết ngang, làm lạnh, và làm khô.

Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng có thể được sản xuất sử dụng các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế bằng các phương pháp phủ trong khuôn đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này (hoặc đúc trong khuôn). Với các phương pháp phủ đúc trong, chế phẩm phủ đổi màu theo ánh sáng bao gồm hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, có thể là chế phẩm phủ lỏng hoặc chế phẩm phủ bột, được phủ lên ít nhất là một phần của bề mặt bên trong của khuôn, và sau đó ít nhất là hóa cứng một phần. Sau đó, dung dịch hoặc dạng nóng chảy polyme, hoặc dung dịch hoặc hỗn hợp oligome hoặc monome được đúc hoặc đúc trong khoang của khuôn và tiếp xúc với chế phẩm phủ đổi màu theo ánh sáng đã phủ trước đó, và ít nhất là hóa cứng một phần. Sau đó sản phẩm đổi màu theo ánh sáng tạo thành được lấy ra khỏi khuôn đúc. Các ví dụ không giới hạn về

các lớp phủ bột trong đó các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo các phương án không giới hạn khác nhau được bộc lộ ở đây có thể được sử dụng như được nêu trong Patent Mỹ số 6,068,797 ở cột 7, dòng 50 đến cột 19, dòng 42, được đưa ra đây để tham khảo.

Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng được sản xuất sử dụng các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế cũng có thể được tạo thành bởi các phương pháp đúc trên đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này. Các phương pháp đúc trên thường liên quan đến việc tạo thành chất nền trong khuôn đúc, và sau đó tạo không gian bên trong giữa chất nền và bề mặt bên trong của khuôn, mà sau đó chế phẩm phủ đổi màu theo ánh sáng được đưa vào đó (ví dụ, được bơm vào) và sau đó hóa cứng (ví dụ, lưu hóa). Theo cách khác, các phương pháp đúc trên có thể liên quan đến việc đưa chất nền đã được tạo thành từ trước vào khuôn, sao cho không gian bên trong được xác định giữa chất nền và bề mặt bên trong khuôn, và sau đó chế phẩm phủ đổi màu theo ánh sáng được đưa vào (ví dụ, được tiêm) vào không gian bên trong.

Sản phẩm đổi màu theo ánh sáng, được sản xuất sử dụng các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, cũng có thể được tạo thành bằng các phương pháp tạo lớp đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này. Đối với các phương pháp tạo lớp, màng bao gồm các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế có thể được gắn vào hoặc kết nối với một phần của chất nền, có hoặc không có chất kết dính và/hoặc dùng nhiệt và áp suất. Sau đó, nếu muốn, chất nền thứ hai có thể được phủ lên trên chất nền thứ nhất và hai chất nền này có thể được tạo lớp với nhau (ví dụ, bằng cách dùng nhiệt và áp suất) để tạo thành chi tiết trong đó màng bao gồm hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno được đặt giữa hai chất nền này. Các phương pháp tạo màng chứa vật liệu đổi màu theo ánh sáng có thể bao gồm ví dụ và nhưng không chỉ giới hạn ở, phương pháp kết hợp vật liệu đổi màu theo ánh sáng với dung dịch polyme hoặc dung dịch hoặc hỗn hợp oligome, đúc hoặc ép đùn màng từ đó, và, nếu cần thiết, ít nhất là màng hóa cứng một phần. Ngoài ra hoặc theo cách khác, màng có thể được tạo thành (có hoặc không có vật liệu đổi màu theo ánh sáng) và được thấm bằng vật liệu đổi màu theo ánh sáng.

Các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế, có thể được sử dụng riêng rẽ hoặc kết hợp với các chất đổi màu theo ánh sáng khác. Các nhóm chất đổi màu theo ánh sáng có thể được sử dụng trong chế phẩm (ví dụ, trong hỗn hợp) với các hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế bao gồm, nhưng không giới hạn ở: các

spiro(indolin)naphthoxazin và spiro(indolin)benzoxazin, ví dụ như được mô tả trong các patent Mỹ số 3,562,172, 3,578,602, 4,215,010, 4,342,668, 5,405,958, 4,637,698, 4,931,219, 4,816,584, 4,880,667, và 4,818,096; các benzopyran, ví dụ như được mô tả trong các patent Mỹ số 3,567,605, 4,826,977, 5,066,818, 4,826,977, 5,066,818, 5,466,398, 5,384,077, 5,238,931, và 5,274,132; các dithizonat kim loại hữu cơ đổi màu theo ánh sáng, như, (arylazo)-thioformic arylhydrazidat, ví dụ, thủy ngân dithizonat được mô tả trong, ví dụ, patent Mỹ số 3,361,706; và các fulgit và fulgimit, ví dụ, 3-furyl và 3-thienyl fulgit và fulgimit được mô tả trong patent Mỹ số 4,931,220 ở cột 20, dòng 5 đến cột 21, dòng 38.

Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa: (a) hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế; và (b) vật liệu hữu cơ được chọn từ polyme, oligome, monome, và dạng kết hợp bao gồm hai hoặc nhiều trong số nhóm này. Polyme của chế phẩm đổi màu theo ánh sáng có thể được chọn từ polycacbonat, polyamit, polyimit, poly(met)acrylat, polyxylic alken, polyuretan, poly(urea)uretan, polythiouretan, polythio(urea)uretan, polyol(allyl cacbonat), xenluloza axetat, xenluloza diaxetat, xenluloza triaxetat, xenluloza axetat propionat, xenluloza axetat butyrat, polyalken, polyalkylen-vinyl axetat, poly(vinylaxetat), poly(vinyl alcohol), poly(vinyl clorua), poly(vinylformal), poly(vinylaxetal), poly(vinyliden clorua), poly(etylen terephthalat), polyeste, polysulfon, polyolefin, các copolyme của nó, và các kết hợp của chúng.

Chế phẩm đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế có thể tùy ý còn chứa, ít nhất một chất phụ gia được chọn từ các thuốc nhuộm, các chất thúc đẩy việc sắp xếp liên kết, các chất mào quang hóa, các chất mào do nhiệt, các chất ức chế polyme hóa, các dung môi, các chất ổn định ánh sáng, các chất ổn định nhiệt, các chất tách khuôn, các chất kiểm soát độ lưu biến, các chất cân bằng, các chất loại bỏ tự do, và các chất cải thiện độ bám dính.

Sáng chế cũng đề cập đến chế phẩm phủ đổi màu chứa: (a) hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế; (b) hỗn hợp tạo màng được chọn từ hỗn hợp nhựa đóng rắn được, hỗn hợp nhựa dẻo nhiệt, và các dạng kết hợp của chúng; và (c) hỗn hợp dung môi tùy ý.

Sáng chế cũng đề cập đến sản phẩm đổi màu theo ánh sáng chứa hợp chất pyran vòng ngưng tụ indeno theo sáng chế. Các ví dụ về sản phẩm đổi màu theo ánh sáng theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các chi tiết quang học được chọn từ ít nhất

một trong số các, chi tiết liên quan đến mắt, chi tiết hiển thị, cửa sổ, gương, vật liệu bao gói, chi tiết tế bào tinh thể lỏng hoạt tính, và chi tiết tế bào tinh thể lỏng thụ động.

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 được sắp xếp. 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 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 là màn hình tinh thể lỏng.

Các ví dụ về các chi tiết đổi màu theo ánh sáng liên quan đến mắt theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các thấu kính điều chỉnh, các thấu kính không điều chỉnh, các thấu kính tiếp xúc, các thấu kính trong mắt, các kính lúp, các thấu kính bảo vệ, và kính che mắt. Các ví dụ về các chi tiết hiển thị bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, màn hình, chi tiết điều khiển, và các chi tiết an ninh.

Hơn nữa, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo các phương án không giới hạn khác nhau theo sáng chế có thể có tỷ lệ hấp thụ trung bình ít nhất là 1,5 ở trạng thái được hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD. Theo các phương án không giới hạn khác, hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể có tỷ lệ hấp thụ trung bình nằm trong khoảng từ 4 đến 20, 3 đến 30, hoặc 2,5 đến 50 ở trạng thái được hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD. Theo các phương án không giới hạn khác nữa, các hợp chất đổi màu theo ánh sáng có thể có tỷ lệ hấp thụ trung bình nằm trong khoảng từ 1,5 đến 50 ở trạng thái được hoạt hóa như được xác định theo phương pháp CELL METHOD.

Các trình tự phản ứng để tạo thành các hợp chất đổi màu theo ánh sáng theo các phương án không giới hạn khác theo sáng chế có nhóm L được bộc lộ trong các trình tự phản ứng A qua J, K, M, N, P, Q, T trong patent Mỹ số 7,342,112, được đưa ra đây để tham khảo.

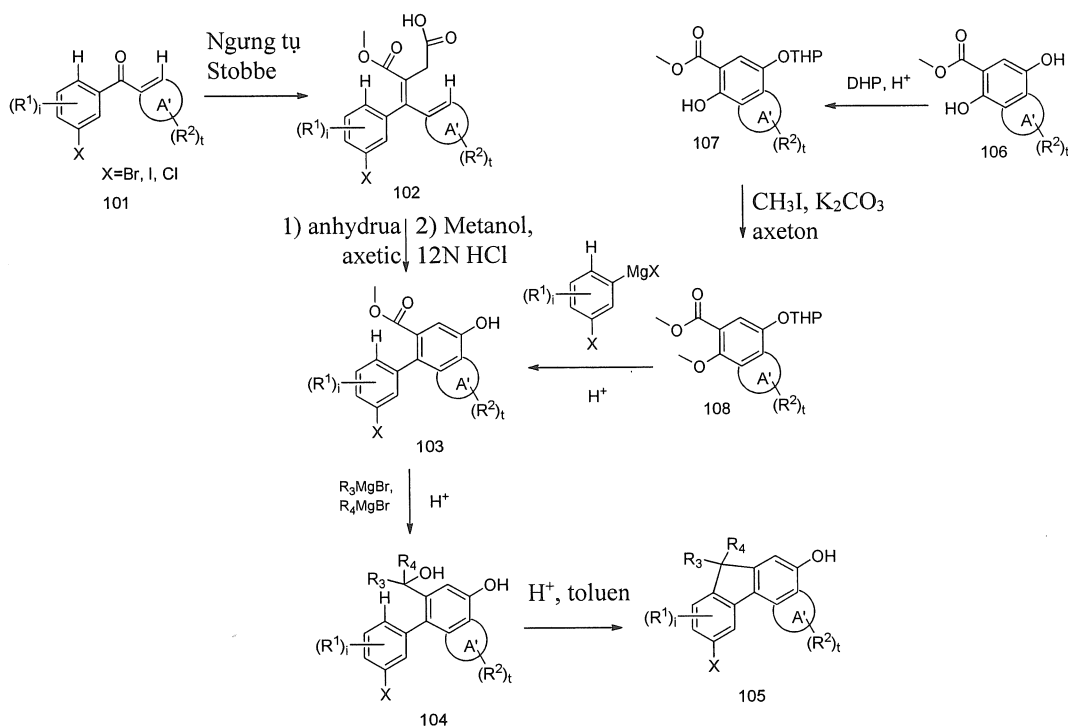
Như được bộc lộ trong các sơ đồ được nêu dưới đây, hợp chất 105 là một trong số các hợp chất vòng ngưng tụ indeno được mô tả ở đây. Đó cũng dùng làm cơ sở để điều chế các hợp chất vòng ngưng tụ indeno khác được mô tả ở đây. Ví dụ, chất này có thể được điều chế như được thể hiện trong các sơ đồ 1, 2, 3, 4 và 5. Khi được điều chế, chức hydroxy của hợp chất 105 có thể được sử dụng để tạo pyran và halogen của 105 hoặc một

trong số các tiền chất 408 của nó có thể được sử dụng để chuyển hóa thành Q'. Tất cả các cấu trúc từ Sơ đồ 6 là các hợp chất vòng ngưng tụ indeno được mô tả ở đây.

Các phản ứng hóa học được mô tả chi tiết có thể được sử dụng để chuyển hóa hợp chất 105 thành 604 có thể thấy trong Sơ đồ 7, 8 và 9. Các phản ứng hóa học được mô tả chi tiết để chuyển hóa thuốc nhuộm pyran 606 thành 605 có thể thấy trong Sơ đồ 10.

Trong tất cả các sơ đồ, X có thể được chọn từ halogen, ví dụ, F, Br, Cl và I. Mỗi t và i là số nguyên được chọn từ 0 đến tổng số ác vị trí có thể. Từ Sơ đồ 1 đến Sơ đồ 6, R¹ cho mỗi lần xuất hiện, có thể độc lập được chọn từ hydro, halogen và các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thể được chọn từ alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, xycloalkyl, aryl, heteroaryl, alkoxy, perfloalkoxy, heteroalkyl, heteroxycloalkyl, alkylthiol, arylthiol, amino aminocacbonyl, aryloxycacbonyl, alkyloxycacbonyl, aminocacbonloxy, alkoxycacbonylamino, aryloxycacbonylamino, xycloalkoxycacbonylamino, heteroxycloalkyloxycacbonyl-amino và heteroaryloxycacbonylamino. R² được chọn từ R¹.

Sơ đồ 1



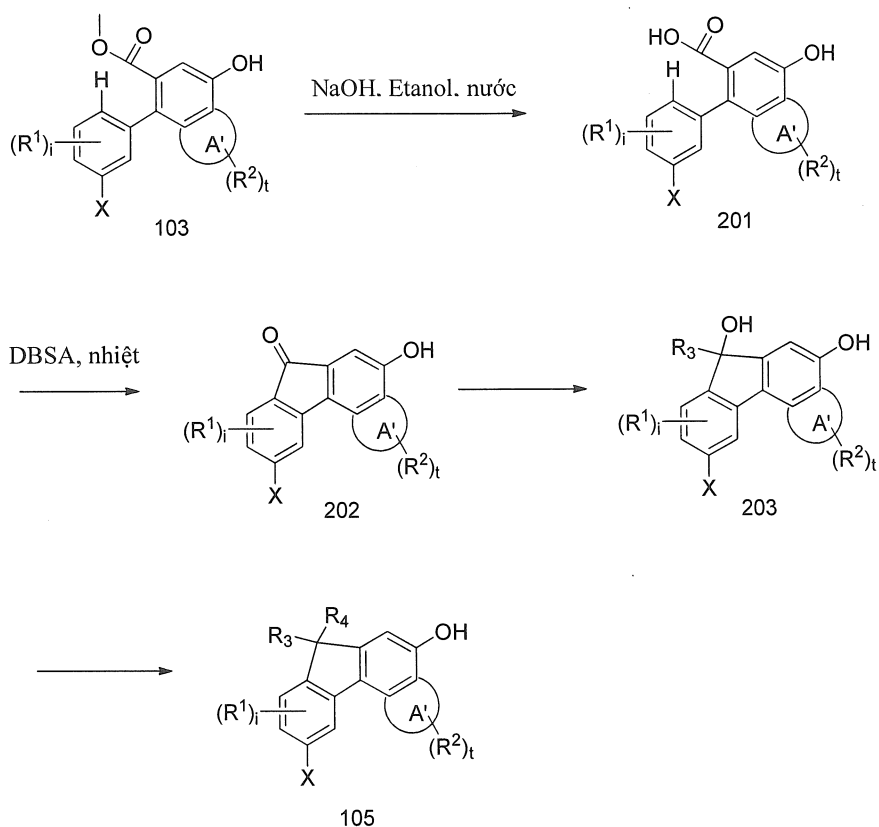
Sơ đồ 1 thể hiện một phương pháp điều chế hợp chất 105. R₃ và R₄ có thể được chọn từ các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thể như heteroalkyl, alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl, và heteroxycloalkyl.

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

Hợp chất 103 cũng có thể được điều chế từ phản ứng thế thơm ái nhân qua trung gian este bắt đầu từ hợp chất 106 bằng các phương pháp đã được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này biết rõ, ví dụ, như được mô tả thêm trong Synthesis, January 1995, các trang 41-43; Tạp chí Chemistry Society Perkin Transaction 1, 1995, các trang 235-241 và Patent Mỹ số 7,557,208 B2, các bộc lộ này đề cập đến các phương pháp tổng hợp được đưa toàn bộ ra đây để tham khảo.

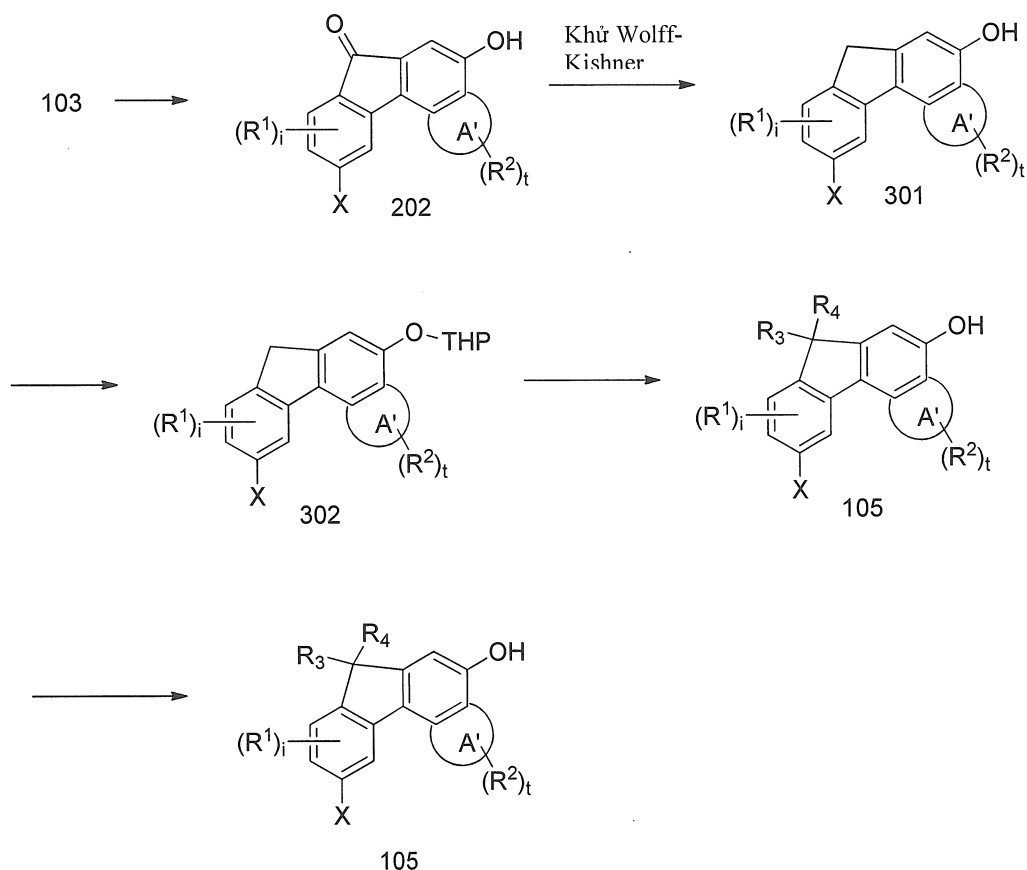
Hợp chất 103 có thể được chuyển hóa hơn nữa thành sản phẩm ngưng tụ indeno của hợp chất 105 với các phần tử thế khác nhau trên cầu cacbon qua các phản ứng nhiều bước có thể thấy trong các patent Mỹ số 5,645,767; 5,869,658; 5,698,141; 5,723,072; 5,961,892; 6,113,814; 5,955,520; 6,555,028; 6,296,785; 6,555,028; 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, các bộc lộ này đề cập đến các phần tử thế trên cầu cacbon được đưa toàn bộ ra đây để tham khảo. Sơ đồ 1 minh họa hợp chất 103 phản ứng với chất phản ứng Grignard sau đó phản ứng đóng vòng để tạo thành hợp chất 105.

Sơ đồ 2



Sơ đồ 2 minh họa phương pháp thứ hai chuyển hóa hợp chất 103 thành hợp chất 105. Sau khi thủy phân hợp chất 103 sau đó phản ứng đóng vòng, thu được hợp chất 202. Nhóm cacbonyl của hợp chất 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 203. R³ có thể được chọn từ các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thể như heteroalkyl, alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl và heteroxycloalkyl. Nhóm hydroxyl của hợp chất 203 có thể được chuyển hóa thành R⁴, có thể được chọn từ halogen và các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thể như alkoxy, silanoxy, heteroaryloxy và aryloxy.

Sơ đồ 3

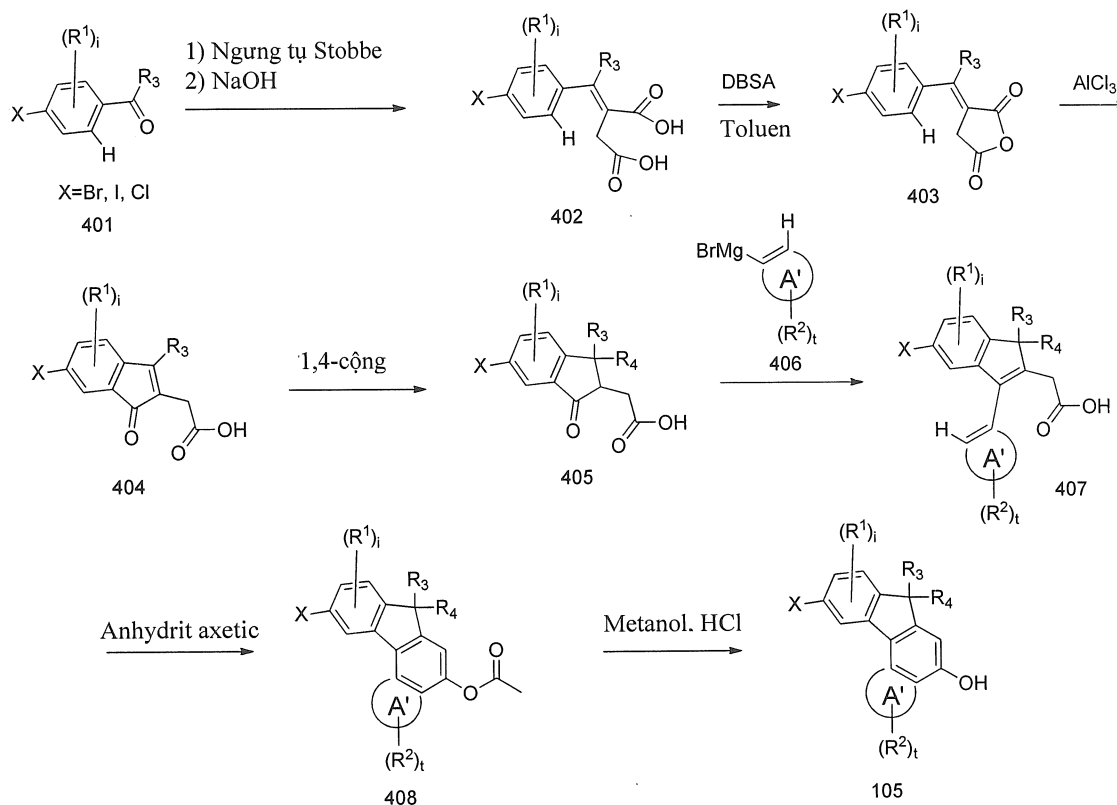


Sơ đồ 3 minh họa phương pháp thứ ba chuyển hóa hợp chất 103 thành hợp chất 105. Hợp chất 202 của Sơ đồ 2 có thể được khử thành 301 sử dụng phản ứng khử Wolff-Kishner hoặc phiên bản cải biến của nó. Các ví dụ có thể được tìm thấy trong tài liệu: "Practical procedures for the preparation of N-tert-butyl dimethylsilylhydrozones and their use in modified Wolff-Kishner reductions and in the synthesis of vinyl halogenua and gem-dihalogenua" 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 302 có gem-cacbon rất ái nhân khi được deproton hóa bởi bazơ như LDA hoặc chất phản ứng methyl Grignard. Theo người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này, hợp chất được deproton hóa 302 có thể được chuyển hóa thành hợp chất được thế R^3 và R^4 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 105 có thể được điều chế với R^3 và R^4 được chọn từ hydro, các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thế được chọn từ heteroalkyl, alkyl, xycloalkyl, carboxy, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, alkylcacbonyl, alkoxycacbonyl, aminocacbonyl, arylcacbonyl, aryloxycacbonyl, hoặc R^3

và R^4 có thể cùng với các nguyên tử ở giữa bất kỳ để tạo thành nhóm được chọn từ oxo, xycloalkyl tùy ý được thế, và heteroxycloalkyl tùy ý được thế.

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

Sơ đồ 4

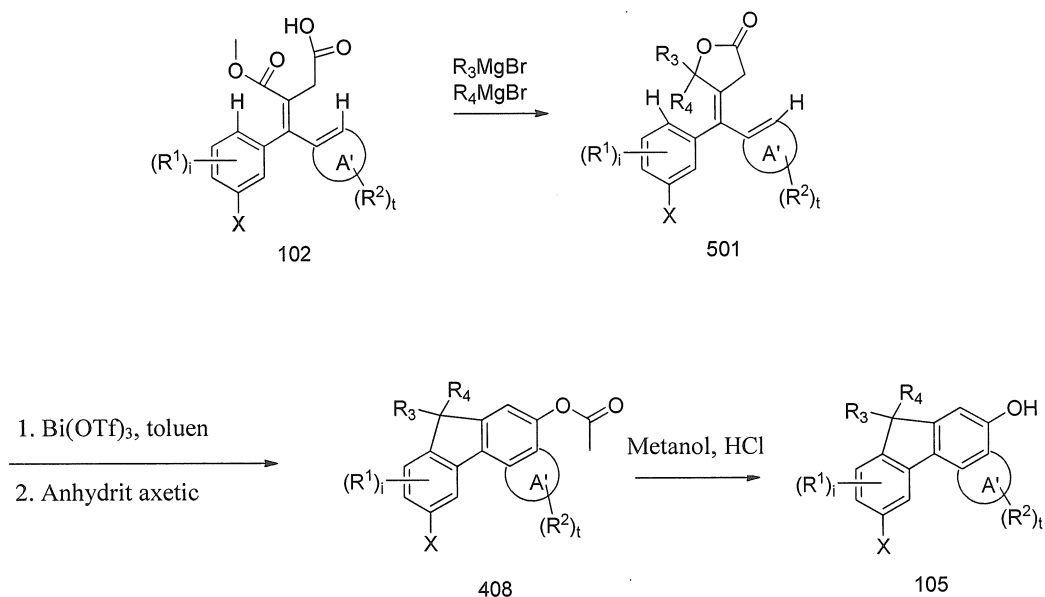


Sơ đồ 4 bắt đầu từ aryl keton 401. R_3 có thể được chọn từ hydro, các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thế như heteroalkyl, alkyl, perfloalkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl và heteroxycloalkyl.

Sau phản ứng Stobbe với dimetyl succinat, hợp chất 402 được chuyển hóa thành anhydrit 403. Anhydrit này có thể được chuyển thành indenon axit 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, rượu và thiol. Phản ứng này tạo thành indano axit 405. R_4 có thể được chọn từ hydro, các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thế như heteroalkyl, alkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, xycloalkyl, heteroxycloalkyl, amino, alkoxy, và thiol. Hợp chất 405 có thể phản ứng với chất phản ứng Grignard 406 để tạo thành hợp chất 407 sau khi kiểm tra độ axit. Hợp chất 407 được làm phản ứng đóng vòng trong anhydrit axetic sau đó metanol phân để tạo thành sản phẩm 408, có thể được sử dụng để tạo thành sản phẩm 105.

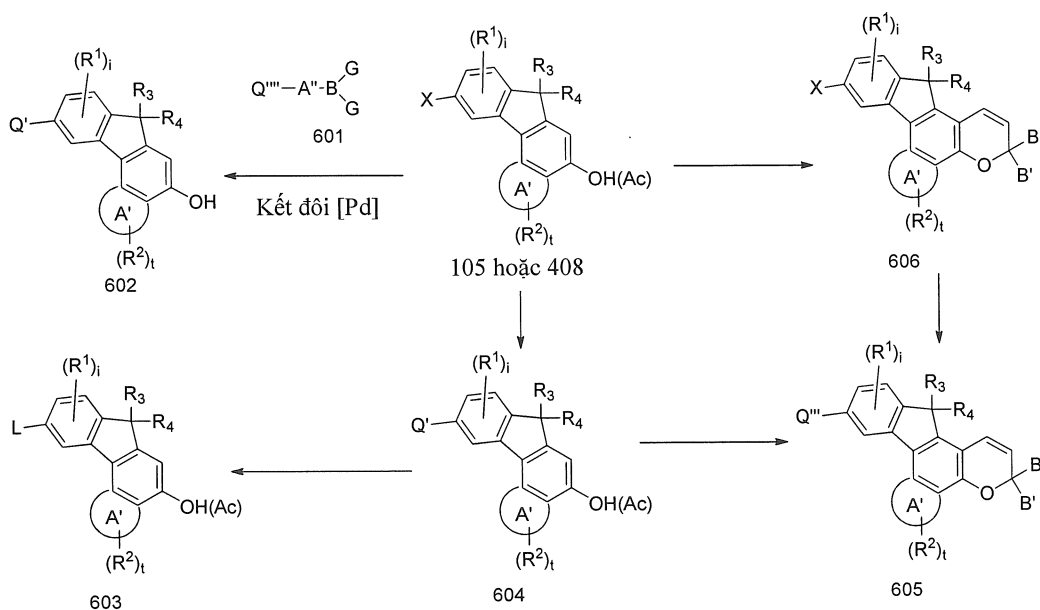
dùng trực tiếp trong Sơ đồ 6 hoặc được chuyển hóa thành hợp chất 105 bằng cách thủy phân:

Sơ đồ 5



Sơ đồ 5 bắt đầu từ sản phẩm Stobbe 102, phản ứng với chất phản ứng Grignard để tạo thành hợp chất 501. R_3 và R_4 có thể được chọn từ các nhóm không đối ảnh hoặc 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 anhydrit axetic, hai phản ứng đóng vòng xuất hiện lần lượt trong cùng một bình. Phản ứng tạo thành hợp chất 408, có thể được chuyển hóa thành hợp chất 105.

Sơ đồ 6



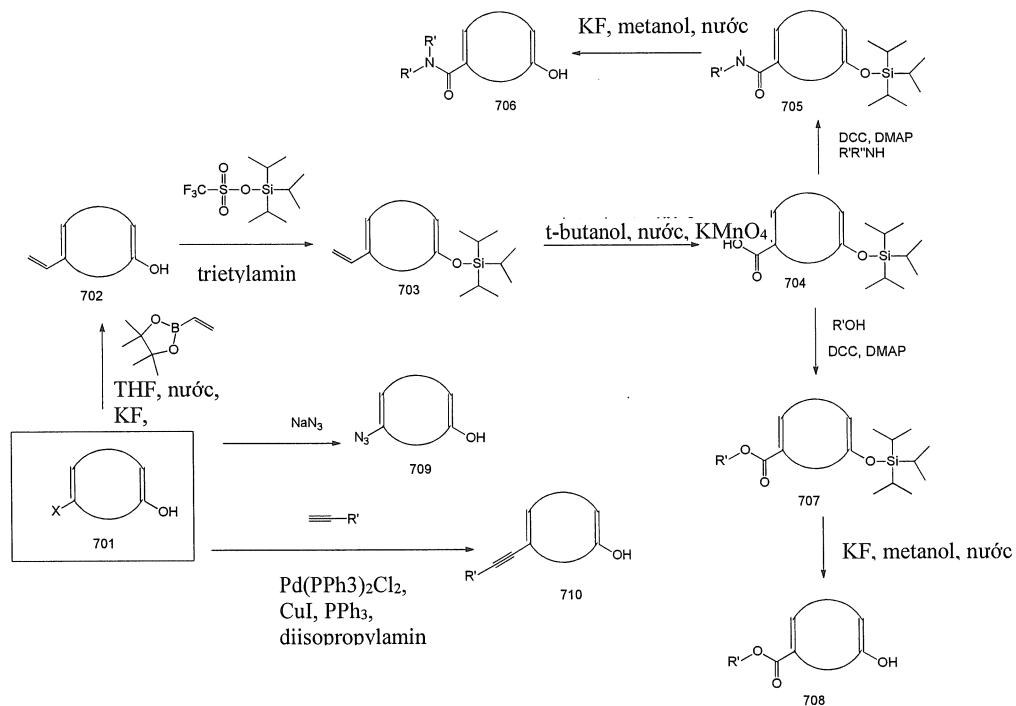
Sơ đồ 6 minh họa các phương pháp chuyển hóa các hợp chất 105 (với -OH) hoặc 408 (với axetat) vào các hợp chất vòng ngưng tụ indeno khác. Nhóm hydroxy của 105 có thể được sử dụng trong hóa học để tạo thành thuốc nhuộm pyran 606, halogen của nó có thể được chuyển hóa thành Q''' như được quan sát Sơ đồ 10. Halogen X của 105 có thể được chuyển hóa thành Q' với sự tạo thành hợp chất 604. Chi tiết được bộc lộ trong các sơ đồ 7-9. Hợp chất 604 có thể phản ứng với propargyl alcohol để tạo thành thuốc nhuộm pyran 605. Q' của 604 cũng có thể được chuyển hóa thành Q' khác được thể hiện bởi nhóm kéo dài L. Neus phản ứng Suzuki được sử dụng, thì Q'''' và A'' của dẫn xuất của axit boronic 601, cùng nhau tạo thành Q' trên 602. Các phương pháp để tổng hợp dẫn xuất của axit boronic có thể được tìm thấy trong tài liệu: "Palladium(0)-Catalyzed Cross-Coupling Reaction of Alkoxydiboron with Haloarenes: A Direct Procedure for Arylboronic Estes, J. Org. Chem. 60, trang 7508-7519, 1995" bởi Miyaura, Norio và các đồng tác giả và các tham khảo ở đây, các tài liệu bộc lộ này đề cập đến các phương pháp tổng hợp được đưa đây để tham khảo. Như được mô tả ở đây, G có thể là -OH hoặc -O-Alkyl; A'' có thể được chọn từ aryl, alkenyl, alkynyl và heteroaryl; Q'''' có thể được chọn từ halogen, -OH, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b, C(O)NR^aR^a và nhóm kéo dài L. Các nhóm Q'''' và A'' cùng nhau tạo thành nhóm Q'. Mỗi B và B' có thể độc lập được chọn từ L, hydro, halogen, và các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thể như metallocenyl, alkyl hoặc perfluoroalkyl, alkenyl, alkynyl, heteroalkyl, alkoxy, perfluoroalkoxy, aryl, heteroaryl, heteroxycycloalkyl, và xycloalkyl, hoặc trong đó B và B' cùng với nguyên tử xen giữa để tạo thành nhóm như xycloalkyl tùy ý được thể và heteroxycycloalkyl tùy ý được thể.

Nhóm Q' có thể được chọn từ halogen, -OH, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b, C(O)NR^aR^a và nhóm kéo dài L. Nhóm Q''' có thể được chọn từ halogen, -OH, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b, và C(O)NR^aR^a.

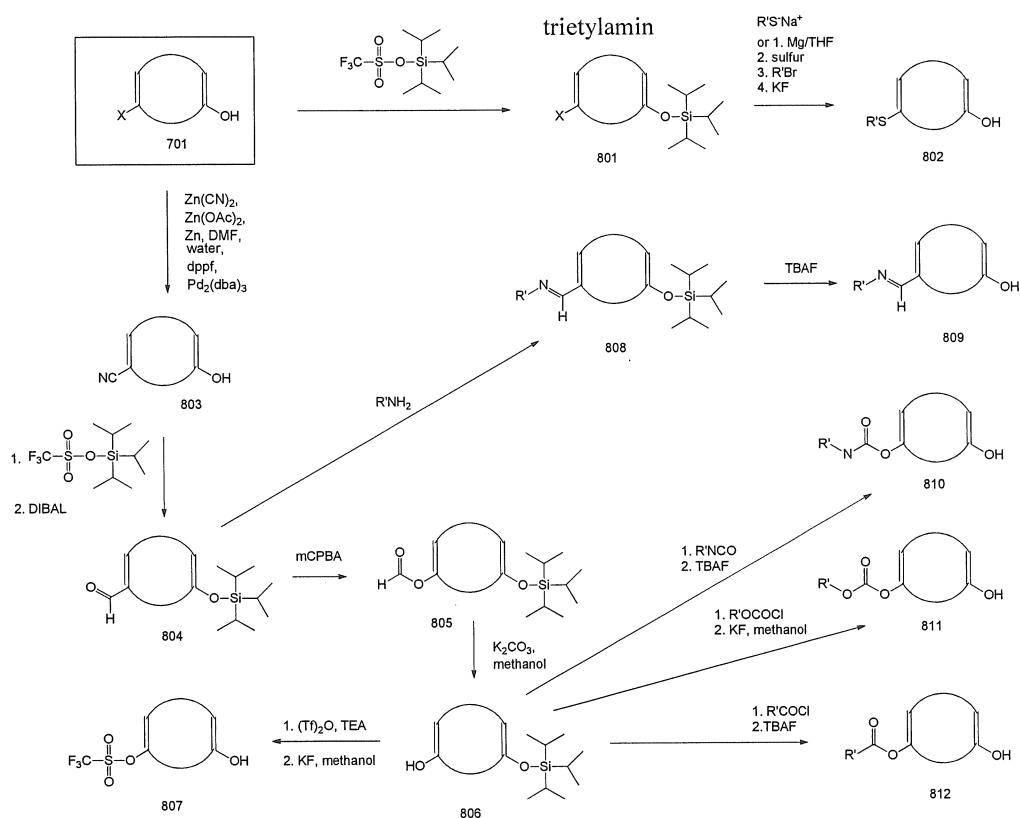
Các Sơ đồ 7, 8 và 9 minh họa chi tiết quy trình chuyển hóa halogen thành Q'. Các phản ứng hóa học được thực hiện ở giai đoạn hydroxy bắt đầu từ hợp chất 105, được thể hiện dưới dạng hợp chất 701 biểu diễn naphtol trong các sơ đồ 7 và 8. Sản phẩm của sơ đồ 8, được thể hiện bởi hợp chất 801 được sử dụng trong Sơ đồ 9 làm nguyên liệu ban

đầu để tạo thành các hợp chất được thể hiện. Mỗi sản phẩm hydroxy của các hợp chất 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 rượu propargylic như được thể hiện trong Sơ đồ 6.

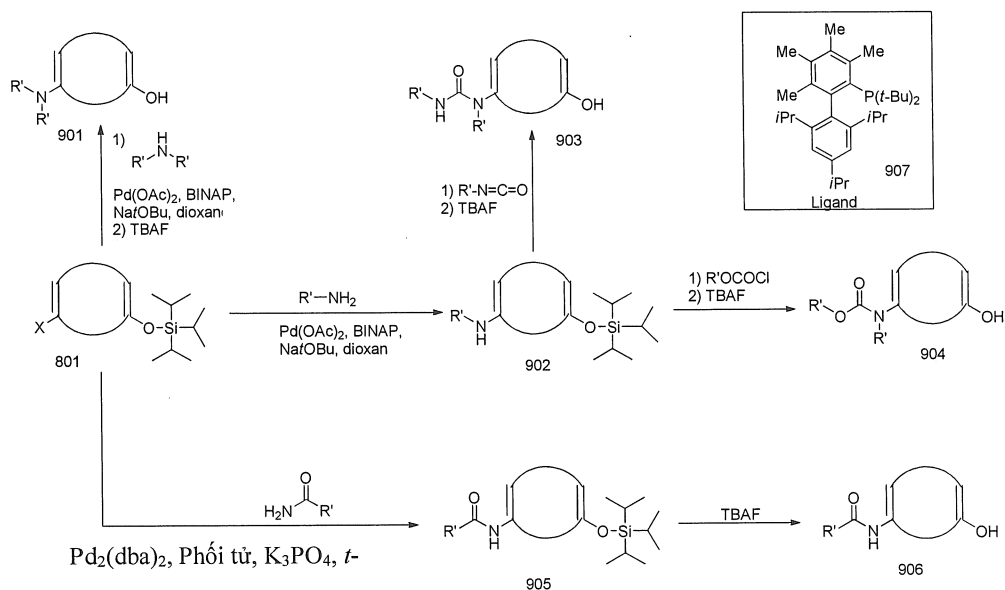
Sơ đồ 7



Sơ đồ 8



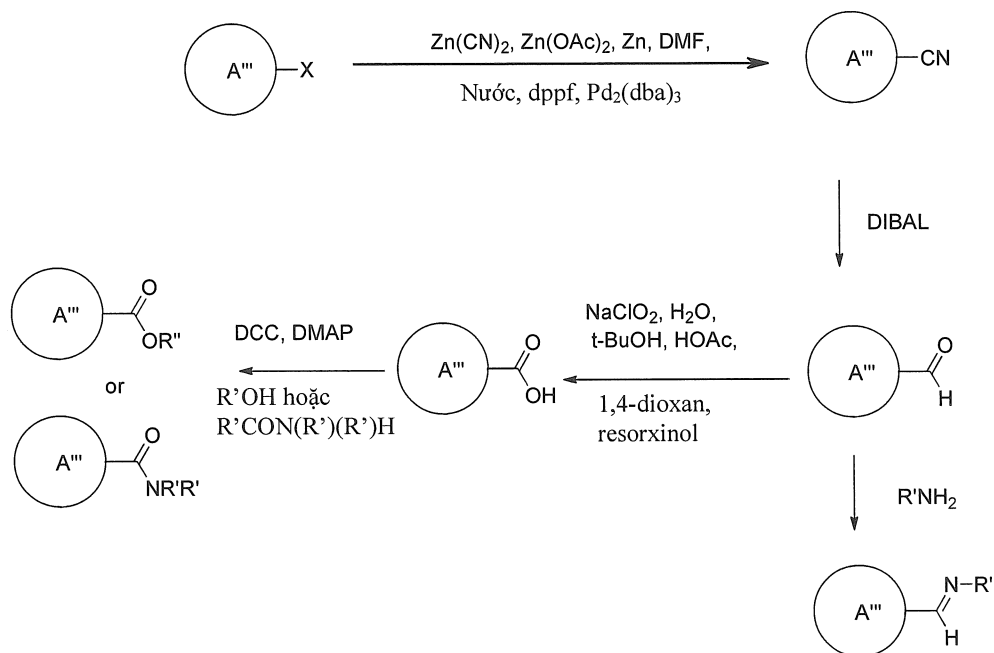
Sơ đồ 9



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 606 từ Sơ đồ 6. Sơ đồ 10 chứng minh cách thức để chuyển hóa -X thành -Q''' các nhóm như xiano, aldehyt, axit carboxylic, và các nhóm không đối ảnh hoặc đối ảnh tùy ý được thể được chọn từ imin, alkoxycarbonyl, aminocarbonyl và aryloxycarbonyl tại vị trí được mô tả. Các phương pháp xyanat hóa và oxy hóa đã được mô tả trong công bố patent Mỹ số

2009/0309076A1, trong đó các phương pháp xyanat hóa và oxy hóa được đưa đây để tham khảo.

Sơ đồ 10



Sáng chế được mô tả cụ thể hơn trong các ví dụ dưới đây, nhưng chỉ dùng để minh họa sáng chế, vì một số cải biến và thay đổi ở đây là rõ ràng với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này. Trừ khi có chỉ định khác, tất cả các phần và tất cả các phần trăm là tính theo trọng lượng.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Phần 1 mô tả quy trình điều chế hợp chất của các Ví dụ từ 1 đến 1-18 tương ứng với các naphthol và các ví dụ 1A-5A, 9A, 10A và 13A-18A tương ứng với indenonaphthopyran. Phần 2 mô tả thử nghiệm các đặc tính đổi màu theo ánh sáng của hợp chất trong các Ví dụ 2A-5A, 10A, 13A và 18A.

Trong 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 thường nó có nghĩa được chấp nhận theo cách thông thường.

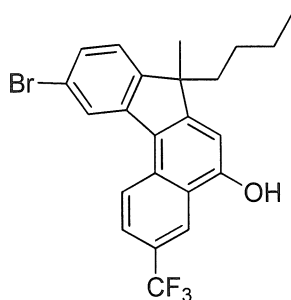
BINAP	=	2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl
Bi(OTf) ₃	=	bismut triflat
CuI	=	đồng iodua
DHP	=	3,4-dihydro-2H-pyran
DCC	=	dixyclohexylcarbodiimit
DCM	=	diclometan

DBSA	=	axit dodexylbenzensulfonic
DIBAL	=	diisobutylaluminium hydride
DMAP	=	4-dimethylaminopyridine
DME	=	dimethyl ether
DMF	=	N,N-dimethylformamide
DMSO	=	dimethylsulfoxide
Dppf	=	1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene
EtMgBr	=	ethyl magnesium bromide
Et ₂ O	=	diethyl ether
g	=	gram
h	=	giờ
HPLC	=	sắc ký lỏng hiệu năng cao
(iPr) ₂ NH	=	diisopropyl amine
HOAc	=	axit acetic
LDA	=	lithi diisopropylamide
KMnO ₄	=	kali permanganat
M	=	mol (molarity)
mCPBA	=	axit meta-chloroperoxybenzoic
MeLi	=	methyl lithium
mg	=	milligram
min	=	phút
mL	=	mililit
mmol	=	millimol
mM	=	millimol
NatOBu	=	natri <i>tert</i> -butoxide
N	=	bình thường (sự bình thường)
ng	=	nanogram
nm	=	nanomet
nM	=	nanomol
NMP	=	<i>N</i> -methyl pyrrolidone
NMR	=	cộng hưởng từ hạt nhân
Pd(OAc) ₂	=	paladi acetat
Pd ₂ (dba) ₃	=	tris(dibenzylidenacetone)dipaladium(0)
PPh ₃	=	triphenyl phosphine
PPTS	=	pyridine <i>p</i> -toluenesulfonate

pTSA	=	axit <i>p</i> -toluensulfonic
$\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$	=	bis(triphenylphosphin)paladi(II) clorua
PBS	=	nước muối đệm phosphat
TBAF	=	Tetra- <i>n</i> -butylamoni florua
THF	=	tetrahyrdofuran
TLC	=	sắc ký lớp mỏng
<i>t</i> -BuOH	=	<i>t</i> -butanol
$(\text{Tf})_2\text{O}$	=	anhydrit axit triflometansulfonic
μL	=	microlít
μM	=	micromol
$\text{Zn}(\text{OAc})_2$	=	kẽm axetat
$\text{Zn}(\text{CN})_2$	=	Kẽm xyanua

Phần 1 – Các ví dụ điều chế

Ví dụ 1



Bước 1

Hỗn hợp gồm 4-bromoaxetophenon (148 g), dimetyl este của axit succinic (130 g) và toluen (2,5 L) được khuấy cơ học trong bình phản ứng thích hợp. Kali *t*-butoxit (100 g) được bổ sung trong một phần và chất kết tủa được tạo thành. Sau khi trộn một giờ, nước (1 L) được bổ sung. Lớp nước thu hồi được rửa bằng toluen (200 ml) hai lần và axit hóa bằng dung dịch HCl 12 N đến độ pH 2. Sản phẩm này được chiết bằng etyl axetat và sau đó được tái kết tinh từ hỗn hợp gồm etyl ete/hexan (1/1). Thu được các tinh thể màu trắng (170 g). Phân tích NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit (E)-4-(4-bromophenyl)-3-(metoxycarbonyl)pent-3-enoic.

Bước 2

Sản phẩm thu được từ bước 1 (160 g) được trộn với dung dịch nước natri hydroxit 50 % trọng lượng (200 g) và nước (4 lít) trong cốc 4 lit. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến sôi và một giờ sau độ pH của dung dịch được điều chỉnh đến khoảng 2 sử dụng dung dịch

HCl 12 N. Kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc. Thu được các tinh thể màu trắng đục (152 gam). NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit (E)-2-(1-(4-bromophenyl)etyliden)succinic.

Bước 3

Hỗn hợp gồm sản phẩm thu được từ bước 2 (152 g), DBSA (5 g) và toluen (1 L) được bổ sung vào bình phản ứng và gia nhiệt đến hồi lưu bằng cách loại nước sử dụng máy Dean-Stark, trong hai giờ. Hỗn hợp tạo thành được chuyển qua cột nhồi silicagel và rửa giải khỏi cột nhồi này bằng etyl axetat/hexan tỷ lệ 2/8 (thể tích/thể tích), và cô. Loại silicagel được sử dụng trong ví dụ này và các ví dụ khác là Grade 60, cỡ lỗ 230-400. Bổ sung hexan (1 L) vào dầu tạo thành. Sản phẩm này được kết tinh và được thu gom bằng cách lọc và làm khô trong chân không. Thu được các tinh thể màu trắng đục (130 gam). NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với (E)-3-(1-(4-bromophenyl)etyliden)dihydrofuran-2,5-dion.

Bước 4

Bổ sung vào hỗn hợp có khuấy gồm nhôm clorua (130 g) và metylen clorua (1 L), sản phẩm thu được từ bước 3 (125 g) trong ba phần cách nhau mỗi 5 phút. Sau khi khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ, HPLC thể hiện rằng phản ứng được hoàn thành với sự tạo thành hai sản phẩm. Hỗn hợp phản ứng được rót chậm vào nước (2 L). Khí 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. Lớp nước được làm bão hòa bằng NaCl rắn và sau đó được loại bỏ bằng phễu tách. Lớp hữu cơ được thu hồi được làm khan trên magie sulat và cô. Etyl axetat (200 mL) được bổ sung và các tinh thể màu vàng được tạo thành được thu gom và làm khô (50 gam). NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit 2-(6-bromo-3-metyl-1-oxo-1H-inden-2-yl)axetic.

Bước 5

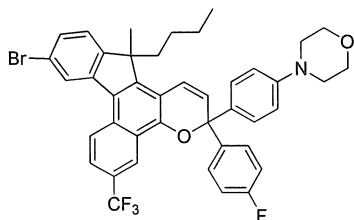
Bình phản ứng chứa hỗn hợp gồm mangan clorua (7,46 g) và lithi clorua (5 g) được làm khô ở nhiệt độ 200 °C trong lò chân không trong một giờ. Dưới sự bảo vệ của nitơ, THF được bổ sung (200 mL). Sau 30 phút, bổ sung đồng (I) clorua (0,59 g) và sản phẩm thu được từ bước 4 (19,4 g). Hỗn hợp này được khuấy đến trong và được làm lạnh đến nhiệt độ 0°C. Bổ sung vào hỗn hợp tạo thành, dung dịch butyl magie bromua (99 mL) 2M trong THF được bổ sung nhỏ giọt trong 2 giờ. Sau khi bổ sung, hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ 0 °C trong 2 giờ và nước (200 mL) được bổ sung. Độ pH của hỗn hợp

được điều chỉnh đến ~2 sử dụng dung dịch HCl 12 N. Etyl axetat (200 mL) được bổ sung. Phần hữu cơ thu hồi được làm khan, và cô. Sản phẩm này được tinh chế bằng CombiFlash®Rf của Teledyne ISCO. Thu được dầu (4 g) làm sản phẩm. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với axit 2-(5-bromo-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 trang bị phễu nhỏ giọt và làm khô trong lò. THF (60 mL) và 1-bromo-4-triflometylbenzen (15,3 g) được bổ sung. Bắt đầu từ giọt 1,2-dibromoetan đầu tiên, chất phản ứng Grignard bắt đầu được tạo thành. Bể nước đá được sử dụng để kiểm soát nhiệt độ khoảng nhiệt độ trong phòng. Sau hai giờ dung dịch sản phẩm thu được từ bước 5 (4,2 g) trong THF khan (20 mL) được đưa vào phễu nhỏ giọt và được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng cách nhau mỗi 10 phút. Sau khi bổ sung, hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 giờ và nước (100 mL) được bổ sung. Độ pH được điều chỉnh đến khoảng 2 sử dụng dung dịch HCl 12 N. Etyl axetat (100 mL) được bổ sung và pha hữu cơ tạo thành được thu gom bằng phễu tách, được rửa bằng NaCl/nước, được làm khan trên magie sulfat và cô. Dầu thu được được hòa tan trong toluen (100 mL) trong bình phản ứng. Anhydrit axetic (10 gam) và bismut triflat (0,5 g) được bổ sung. Hỗn hợp được hồi lưu trong 1 giờ và được làm lạnh 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. Toàn bộ dung môi được loại bỏ. Tách bằng cột nhồi silicagel được áp dụng cho sản phẩm thô. Thu được dầu (3 g) làm sản phẩm. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 10-bromo-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

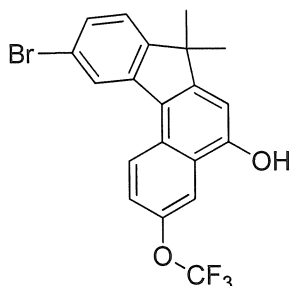
Ví dụ 1A



Sản phẩm thu được từ bước 6 (3 g) của Ví dụ 1 được cho vào bình phản ứng. Bổ sung vào bình này 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). Hỗn hợp được hồi lưu trong 4 giờ. Toàn bộ dung môi được loại bỏ. Cột nhồi silicagel được sử dụng để tinh chế sản

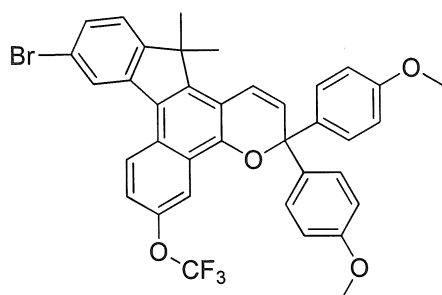
phẩm này. Thu được dầu màu nâu nhẹ (2 gam) làm sản phẩm. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-(N-morpholino)phenyl)-10-bromo-6-triflometyl-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 2



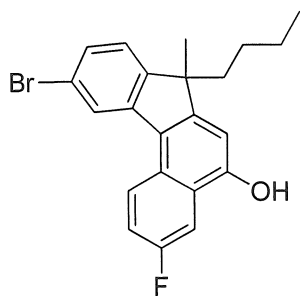
Các quy trình từ Ví dụ 1 được tuân theo ngoại trừ là: trong bước 5, dung dịch methyl magie bromua 1,4 M trong THF được sử dụng thay cho butyl magie bromua; và trong bước 6, 1-bromo-4-triflometoxybenzen được sử dụng thay cho 1-bromo-4-triflometylbenzen. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 10-bromo-7,7-dimetyl-3-(triflometoxy)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 2A



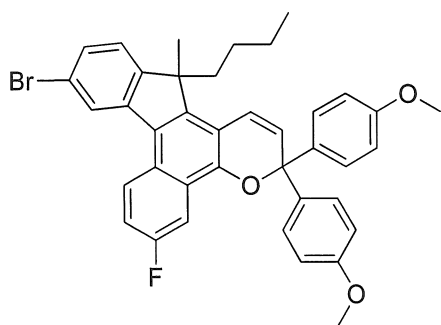
Các quy trình từ Ví dụ 1A được tuân theo ngoại trừ là: 10-bromo-7,7-dimetyl-3-(triflometoxy)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol từ Ví dụ 2 được sử dụng thay cho 10-bromo-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol; 1,1-bis(4-metoxi-phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxi-phenyl)-10-bromo-6-triflometoxy-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 3



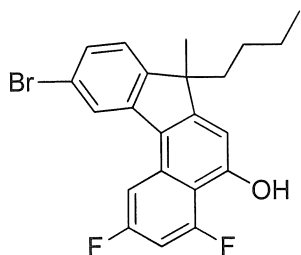
Các quy trình từ Ví dụ 1 được tuân theo ngoại trừ là trong bước 6, 1-bromo-4-flobenzen được sử dụng thay cho 1-bromo-4-triflometylbenzen. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 10-bromo-7-butyl-3-flo-7-metyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 3A



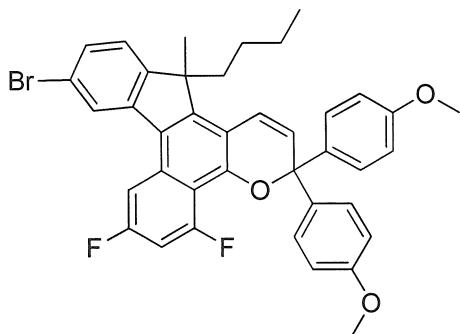
Các quy trình từ Ví dụ 1A được tuân theo ngoại trừ là: 10-bromo-7-butyl-3-flo-7-metyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol từ Ví dụ 3 được sử dụng thay cho 10-bromo-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol; 1,1-bis(4-metoxypheyl)-prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10-bromo-6-flo-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 4



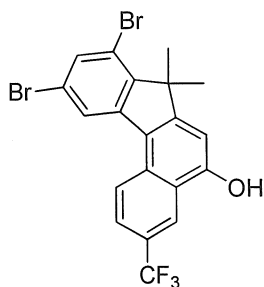
Các quy trình từ Ví dụ 1 được tuân theo ngoại trừ là trong bước 6, 1-bromo-3,5-diflobenzen được sử dụng thay cho 1-bromo-4-triflometylbenzen. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 10-bromo-7-butyl-2,4-diflo-7-metyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 4A



Các quy trình từ Ví dụ 1A được tuân theo ngoại trừ là: 10-bromo-7-butyl-2,4-difluoro-7-metyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol từ Ví dụ 4 được sử dụng thay cho 10-bromo-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol; 1,1-bis(4-metoxypheyl)-prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)pheyl)prop-2-yn-1-ol. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10-bromo-5,7-diflo-13-metyl-13-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 5



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 cho vào bể nước đá bão hòa NaCl. Dung dịch isopropyl magie clorua 3M (160 ml) được bổ sung nhỏ giọt vào dung dịch này với tỷ lệ sao cho nhiệt độ bên trong được kiểm soát đến nhiệt độ từ -20 đến 0°C. Việc bổ sung kết thúc trong khoảng từ 30 phút đến 1 giờ. Hỗn hợp được khuấy trong nửa giờ ở cùng nhiệt độ và bis[2-(N,N-dimetyl-amino)etyl]ete (61 g) được bổ sung chậm cách nhau mỗi 5 phút 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 cách nhau mỗi 5 phút. 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 3N. Lớp hữu cơ được thu gom bằng phễu

tách, được rửa bằng 5% NaOH/nước và NaCl/nước, làm khô và cô. Bổ sung vào đầu thu hồi, metanol (300 ml) được bổ sung 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'-triflormetylbenzophenon.

Bước 2

Hỗn hợp gồm 3,5-dibromo-4'-triflormetylbenzophenon (75 g) từ bước 1, dimethyl este của axit succinic (32,2 g) và toluen (800 ml) được cho vào bình 5 L ba cổ được trang bị máy khuấy cơ học. Chất rắn kali t-butoxit (22,6 g) được bổ sung từng mẻ cách nhau mỗi 30 phút. 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 được điều chỉnh đến ~2 sử dụng dung dịch HCl 3 N. Sau khi khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 10 phút, lớp hữu cơ được thu gom, được rửa bằng NaCl/HCl, làm khan 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-(triflormetyl)phenyl)but-3-enoic.

Bước 3

Chất rắn lanthan (III) clorua (100 g) khan 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 dung tích 5 lít được trang bị máy khuấy cơ học và phễu nhỏ giọt. Hỗn hợp được hồi lưu trong vài giờ cho đến khi hòa tan. Chất rắn axit (E)-4-(3,5-dibromophenyl)-3-(metoxycarbonyl)-4-(4-(triflormetyl)phenyl)but-3-enoic (106 g) từ bước 2 được hòa tan trong hỗn hợp này. Sau đó hỗn hợp này được làm lạnh đến nhiệt độ -15 °C. Dung dịch methyl magie clorua 3M (238 ml) được cho vào phễu nhỏ giọt. 30% đầu tiên của Grignard được bổ sung chậm vào hỗn hợp. Sự tạo thành bọt khí được quan sát. Sau khi nhiệt độ trở về -15 °C, Grignard còn lại được bổ sung vào hỗn hợp này trong 2 phút. Sau 30 phút, nước (1 L) được bổ sung chậm vào hỗn hợp và độ pH được điều chỉnh đến axit sử dụng axit axetic. Hỗn hợp này trở nên trong suốt và tạo thành hai lớp. Lớp nước được xả bỏ. Lớp hữu cơ được rửa bằng NaCl/nước bốn lần và sau đó 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 silicagel 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 của sản phẩm này được tái kết tinh

từ metanol và phân tích NMR thể hiện rằng các tinh thể được tinh chế có cấu trúc phù hợp với (E)-4-((3,5-dibromophenyl)(4-(triflormetyl)phenyl)metylen)-5,5-dimetyldihydrofuran-2(3H)-on.

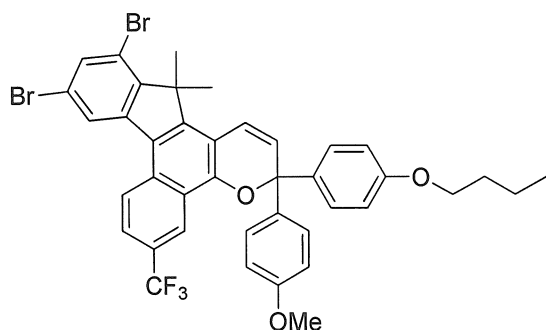
Bước 4

Bổ sung vào bình phản ứng sản phẩm thu được từ bước 3, toluen (500 ml), bismut triflat (20 g) và axit axetic (0,24 g). Hỗn hợp tạo thành được khuấy ở nhiệt độ hồi lưu trong 1 giờ. Sau khi được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng, anhydrit axetic (100 ml) được bổ sung. Hỗn hợp được gia nhiệt lại đến nhiệt độ hồi lưu và sau một giờ, hỗn hợp được làm mát đến nhiệt độ trong phòng và được lọc qua cột nhồi silicagel. Dung dịch thu gom được cô đến khô. Axeton (50 ml) được bổ sung vào chất rắn thu được để tạo thành bột nhão và metanol (250 ml) sau đó được bổ sung. Hỗn hợp tạo thành được làm lạnh để tạo thành các 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-(triflormetyl)-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-(triflormetyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat (2,42 g) từ bước 4. Axit clohydric đậm đặc (1 mL) được bổ sung và dung dịch được gia nhiệt đến hồi lưu trong 4 giờ. Dung môi được loại bỏ trong chân không và cặn này được tinh chế bằng cách lọc qua cột nhồi silicagel, sử dụng hỗn hợp hexan/etyl axetat tỷ lệ 4:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa nguyên liệu mong muốn được gom lại và cô để tạo thành chất rắn màu kem (1,63 g). Phân tích NMR của chất rắn màu kem được xác định cấu trúc phù hợp với 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflormetyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

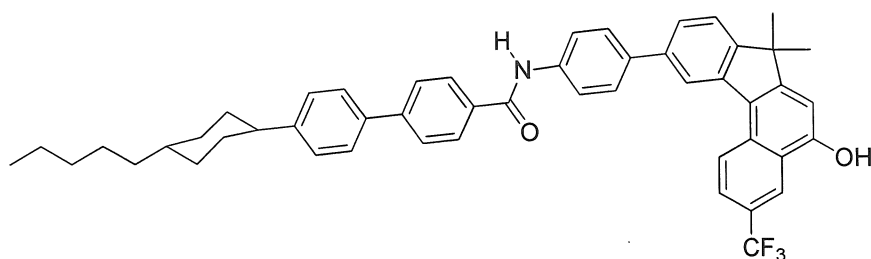
Ví dụ 5A



Bổ sung 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-metoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol (28.00 g) và 4-axit dodecylbenzensulfonic (2.40 g) vào dung dịch clorofom (100 mL) chứa sản phẩm

thu được từ bước 5 của Ví dụ 5, (36,24 g). Dung dịch được gia nhiệt đến hồi lưu trong 8 giờ. Hỗn hợp phản ứng được cô dưới áp suất giảm để tạo thành cặn dạng dầu. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan etyl axetat tỷ lệ 9:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa nguyên liệu mong muốn được gom lại và cô đến cặn dạng dầu. Cặn này được tái kết tinh từ diclometan và metanol. Các tinh thể được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để tạo thành chất rắn màu xám (20,00 g). Phân tích NMR của chất rắn màu xám này được xác định cấu trúc phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-metoxypheyl)-10,12-dibromo-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

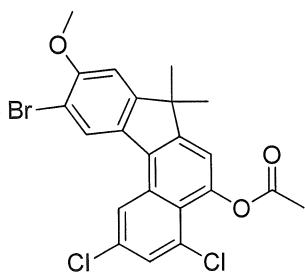
Ví dụ 6



8,10-Dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat (53,88 g) từ bước 4 của Ví dụ 5 và 4'-(4-trans-pentylxyclohexyl)-N-(4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-carboxamit (56,27 g) được hòa tan trong bình phản ứng chứa hỗn hợp gồm toluen (1000 mL) và etanol (1000 mL) với tỷ lệ 1:1. Bổ sung kali cacbonat (42,26 g) và triphenylphosphin (8,02 g) và dung dịch được khử khí bằng cách sục nitơ trong 20 phút. Bổ sung paladi axetat (2,29 g) và hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 3 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng và huyền phù được 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 lạnh đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng etyl axetat (500 mL). Hỗn hợp này được lọc qua bộ lọc CELIT[®] và dịch lọc được thu gom và cô trong chân không để tạo thành cặn. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp toluen và etyl axetat tỷ lệ 19:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa sản phẩm mong muốn được gom lại và cô trong chân không để tạo thành cặn màu kem. Toluene được bổ sung vào cặn để kết tủa sản phẩm này. Kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để tạo thành chất rắn màu kem (32 g). Phân tích NMR của chất rắn màu kem được xác định 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.

Ví dụ 7



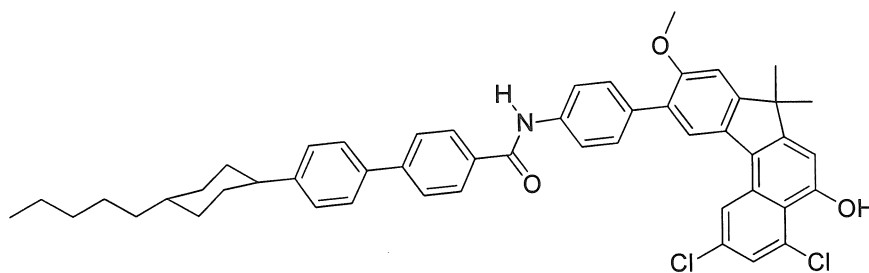
Bước 1 đến Bước 4

Các quy trình từ Bước 1 đến Bước 4 của Ví dụ 5 được tuân theo ngoại trừ là trong bước 1, 3,5-diclobromobenzen và 4-metoxycarbonyl clorua được sử dụng thay cho tribromobenzen và 4-triflometylbenzoyl clorua. Thu được chất rắn màu trắng đục làm sản phẩm. NMR xác định 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 sản phẩm thu được từ bước 4 (5 g), NBS (2,7 g) và DMF (100 mL) được khuấy trong bình phản ứng và gia nhiệt đến nhiệt độ 90°C. Hai giờ sau, hỗn hợp phản ứng được rót vào nước (400 mL) và được chiết bằng 1/1 etyl axetat/THF (200 mL). Lốp hữu cơ được thu gom, được rửa bằng dung dịch nước natri bisulfite ba lần, làm khô và 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 xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 10-bromo-2,4-diclo-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat.

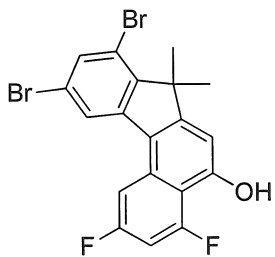
Ví dụ 8



Hỗn hợp gồm sản phẩm của Ví dụ 7, 10-bromo-2,4-diclo-9-metoxi-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat (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-carboxamit (4,94 g), natri cacbonat (4 g), THF (200 mL), nước (20 mL) và Tetrakis(triphenylphosphin)paladi(0) (1

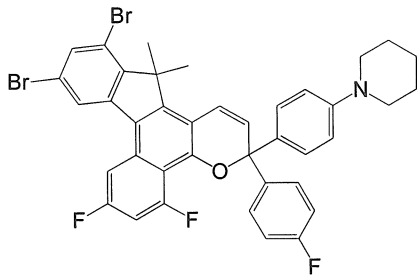
g) được cho vào bình phản ứng và được khử khí bằng cách sục nitơ qua hỗn hợp này trong 10 phút. Hỗn hợp này được gia nhiệt đến hồi lưu trong 17 giờ. Kali cacbonat (5 g) và etanol (50 mL) được bổ sung và hỗn hợp tạo thành được hồi lưu trong 8 giờ, được chiết sử dụng THF và nước bão hòa natri clorua. Lóp hữu cơ tạo thành được thu gom, được rửa bằng 100 mL 1 N HCl ba lần, được rửa bằng 100 mL dung dịch nước natri sulfite 1 N một lần, được rửa bằng nước bão hòa natri clorua một lần, được làm khan trên magie sulfat và cô. Cặn thu hồi được hòa tan trong toluen/THF tỷ lệ 10/1 (thể tích/thể tích) (200 mL) và được chuyển qua cột nhồi silicagel đã được rửa sử dụng toluen/THF tỷ lệ 10/1 để thu hồi sản phẩm này. Dung dịch trong tạo thành được cô và được bổ sung vào metanol và được khuấy trong nửa giờ. Chất rắn tạo thành được thu gom và làm khô để tạo thành chất rắn màu trắng đục (7,5 g) làm sản phẩm. NMR xác định 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-carboxamit.

Ví dụ 9



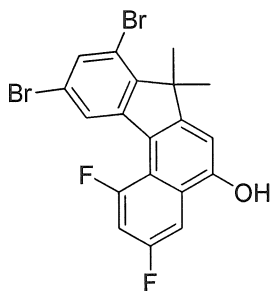
Các quy trình từ Ví dụ 5 được tuân theo ngoại trừ là trong bước 1, 3,5-diflobenzoyl clorua được sử dụng thay cho 4-triflometylbenzoyl clorua để điều chế trong bước 5, sản phẩm mong muốn được tái kết tinh sử dụng etyl axetat làm dung môi. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 8,10-dibromo-2,4-diflo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 9A



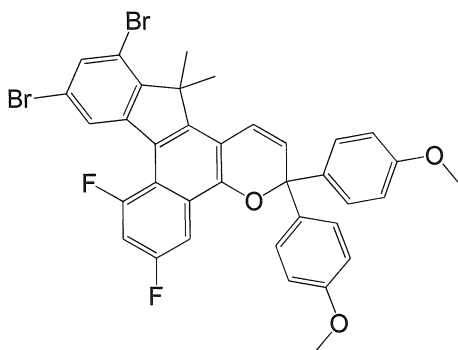
Các quy trình từ Ví dụ 1A được tuân theo ngoại trừ là: 8,10-dibromo-2,4-diflo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol từ Ví dụ 9 được sử dụng thay cho 10-bromo-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol và 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-piperidinyl)phenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-(N-piperidinyl)phenyl)-10,12-dibromo-5,7-diflo-13,13-dimetyl-butyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 10



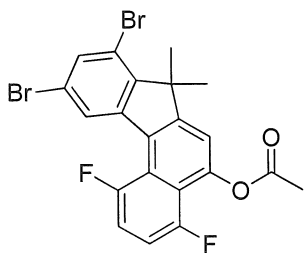
Các quy trình từ Ví dụ 5 được tuân theo ngoại trừ là trong bước 1, 2,4-diflobenzoyl clorua được sử dụng thay cho 4-triflometylbenzoyl clorua. Phân tích NMR được xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 8,10-dibromo-1,3-diflo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 10A



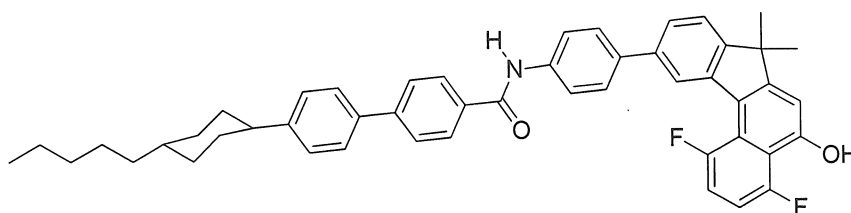
Các quy trình từ Ví dụ 1A được tuân theo ngoại trừ là 8,10-dibromo-1,3-diflo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol được sử dụng thay cho 10-bromo-7-butyl-7-metyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-ol và 1,1-bis(4-metoxyphephenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-flophenyl)-1-(4-(N-morpholino)phenyl)prop-2-yn-1-ol. NMR thể hiện rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxyphephenyl)-10,12-dibromo-6,8-diflo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 11



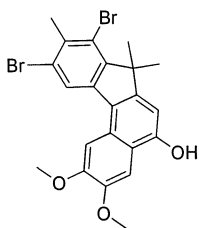
Các quy trình từ bước 1 đến bước 4 của Ví dụ 5 được tuân theo ngoại trừ là trong bước 1, 2,5-diflobenzoyl clorua được sử dụng thay cho 4-triflometylbenzoyl clorua. Phân tích NMR được xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 8,10-dibromo-1,4-difluo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat.

Ví dụ 12



Các quy trình Ví dụ 6 được tuân theo ngoại trừ là 8,10-dibromo-1,4-difluo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat được sử dụng thay cho 8,10-Dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat. Phân tích NMR của chất rắn này được xác định cấu trúc phù hợp với 7,7-dimetyl-1,4-difluo-10-[4-(4-(4-(4-trans-pentylxyclohexyl)phenyl)benzamido)phenyl]-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 13



Bước 1

Magie (3,9 g) và THF (50 mL) được cho vào bình khô được trang bị phễu nhỏ giọt, chứa THF (800mL) dung dịch chứa 2,4,6-tribromotoluen (53 g). Một phần mười dung dịch THF trong phễu nhỏ giọt được bổ sung vào bình này và bình phản ứng bắt đầu sôi. Bình phản ứng được cho vào bể nước đá và hỗn hợp phản ứng được duy trì ở nhiệt độ 0°C và phần còn lại của dung dịch trong phễu nhỏ giọt được bổ sung nhỏ giọt trong nửa giờ. Sau khi khuấy 1,5 giờ, bis[2-(N,N-dimetylamino)etyl]ete (28,4 g) được bổ sung. Sau khi khuấy trong một giờ, 3,4-dimetoxibenzoyl clorua (35,5 g) được bổ sung một

phần. Hỗn hợp tạo thành được khuấy qua đêm, nước (500 mL) được bổ sung vào hỗn hợp này và dung dịch HCl 12N được sử dụng để điều chỉnh độ pH đến ~ 2. DCM được bổ sung vào hỗn hợp này (500 mL) và lớp hữu cơ tạo thành được thu gom, được rửa bằng nước một lần, được rửa một lần bằng natri bicacbonat, được làm khan trên magie sulfat và cô. Thu được dầu màu vàng (65 g). Dầu này được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 2

Sản phẩm thu được từ bước 1 (65 g), dimetyl succinat (30 g) và toluen (500 mL) được bổ sung vào bình phản ứng được trang bị máy khuấy cơ học, phễu nhỏ giọt và tấm phủ nitơ. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng cho đến khi các chất rắn được hòa tan. Dung dịch toluen chứa kali t-pentoxit (25 % trọng lượng, 87,4 g) được bổ sung qua phễu nhỏ giọt và hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong 2 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. Dịch chiết nước kết hợp được rửa bằng toluen. HCl (12 N) được bổ sung vào dịch chiết nước cho đến khi độ pH được điều chỉnh đến 5. Dầu màu vàng được kết tủa. Hỗn hợp tạo thành được chiết bằng etyl axetat, được làm khan trên magie sulfat, cô và làm khô trong chân không. Thu được dầu trong vát màu vàng (35 g) làm sản phẩm. Chất này được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 3

Hỗn hợp gồm các sản phẩm axit Stobbe thu được từ bước 2 (35 g), bismut triflat (2,1 g), diclometan (200 mL) và anhydrit axetic (27 g) được trộn và được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong bình phản ứng trong một giờ. Hỗn hợp tạo thành được cô bằng cách làm bay hơi trong chân không và metanol (500 mL) và HCl (12 N, 2 mL) được bổ sung. Hỗn hợp tạo thành được hồi lưu trong 4 giờ và cô để tạo thành dầu. Dầu này được chuyển sang tách bằng cột nhồi silicagel sau đó tái kết tinh từ etyl axetat/hexan với tỷ lệ 2/8 (thể tích/thể tích). Thu được các tinh thể màu trắng (5 g) làm sản phẩm. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với methyl 1-(3,5-dibromo-4-metylphenyl)-4-hydroxy-6,7-dimetoxi-2-naphtoat.

Bước 4

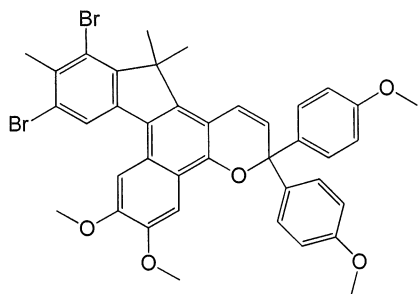
Sản phẩm thu được từ bước 3 (1,5 g) được hòa tan trong 30 mL THF khan trong bình làm khô được trang bị phễu nhỏ giọt và que khuấy từ. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và 7 mL dung dịch THF 3 M chứa methyl magie bromua được bổ

sung nhỏ giọt. Sau khi bổ sung, hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong qua đêm. Sau đó hỗn hợp phản ứng được rót vào vào 100 mL nước. Giá trị độ pH của hỗn hợp được điều chỉnh đến ~5 sử dụng HCl (12 N). Etyl axetat (100 mL) được bổ sung. Lớp hữu cơ tạo thành được tách, được làm khan trên magie sulfat, cô và làm khô trong chân không. Chất rắn màu trắng thu hồi (1,5 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 5

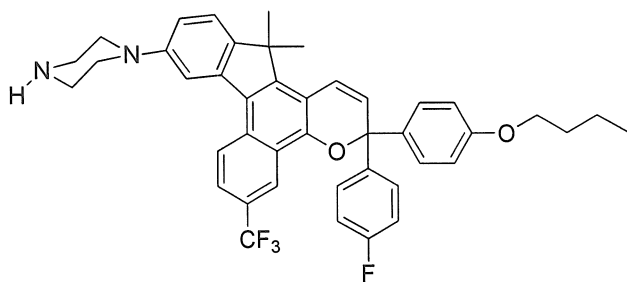
Sản phẩm thu được từ bước 4 (1,5 g), toluen (100 mL) và bismut triflat (0,04 g) được bổ sung vào bình phản ứng được trang bị que khuấy từ. Hỗn hợp tạo thành được hồi lưu trong 4 giờ. Hỗn hợp phản ứng được chuyển qua cột nhồi silicagel. Sau khi cô, thu được chất rắn màu trắng (0,8 g). NMR xác định rằng chất rắn màu trắng này có cấu trúc phù hợp với 8,10-dibromo-2,3-dimethoxy-7,7,9-trimethyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 13A



Bổ sung vào bình phản ứng chứa dung dịch toluen (20 ml) chứa sản phẩm từ Ví dụ 13 (0,8 g), 1,1-bis(4-methoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol (0,8 g) và vài tinh thể axit p-toluen sulfonic được bổ sung. Sau khi khuấy trong một giờ ở nhiệt độ trong phòng, toàn bộ dung môi được làm bay hơi. Sản phẩm thu hồi được tinh chế bằng CombiFlash®Rf sau đó tái kết tinh từ ete ete. Thu được các tinh thể màu trắng (0,95 g) làm sản phẩm. NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-methoxyphenyl)-10,12-dibromo-6,7-dimethoxy-11,13,13-trimethyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphtho[1,2-b]pyran.

Ví dụ 14A



Bước 1

Bổ sung 2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphtyl (1,20 g) và paladi (II) axetat (0,30 g) vào hỗn hợp gồm dioxan (100 mL) và toluen (100 mL) được khử khí trong bình phản ứng. Sản phẩm thu được từ bước 4 của Ví dụ 5, 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat (5,10 g) sau đó là 1-formylpiperazin (2,80 g) được bổ sung dưới dòng khí nitơ. Natri *tert*-butoxit (2,80 g) được bổ sung và dung dịch được gia nhiệt đến hồi lưu trong 22 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng tetrahydrofuran. Dung dịch được lọc qua nền bộ lọc CELIT® 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 (thể tích:thể tích) làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa nguyên liệu mong muốn được gom lại và cô. Cặn này (1,25 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo. Phân tích NMR của cặn này được xác định cấu trúc phù hợp với 4-(8-bromo-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)piperazin-1-carbaldehyt.

Bước 2

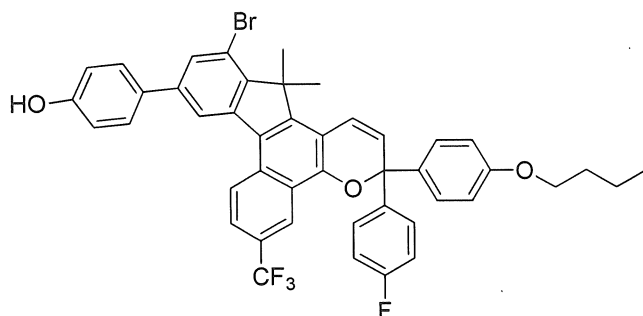
Sản phẩm của bước 1, (0,69 g) và 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-flophenyl)prop-2-yn-1-ol (0,60 g) được hòa tan trong 1,2-dicloetan (20 mL) trong bình phản ứng. Bổ sung axit p-toluensulfonic (0,1 g) và dung dịch được gia nhiệt đến hồi lưu trong 18 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng và dung môi được loại bỏ trong chân không. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và diclometan với tỷ lệ 1:1 làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa nguyên liệu mong muốn được gom lại và cô. Cặn này (0,75 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 3

Sản phẩm của bước 2 (2,00 g) được hòa tan trong dioxan (30 mL) trong bình phản ứng. Nước HCl 10% (5 mL) được bổ sung và dung dịch được gia nhiệt đến hồi lưu trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng và được rót vào dung dịch nước natri bicacbonat bão hòa (300 mL). Lớp nước thu hồi được chiết bằng etyl

axetat (300 mL). Dung dịch etyl axetat được làm khan bằng natri sulfat khan, được lọc và cô để tạo thành cặn. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp etyl axetat và metanol với tỷ lệ 1:1 (thể tích:thể tích) làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa nguyên liệu mong muốn được gom lại và cô. Cặn này được thu gom làm sản phẩm. NMR xác định rằng cấu trúc này phù hợp với 3-(4-flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-(piperazin-1-yl)-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 15A



Bước 1

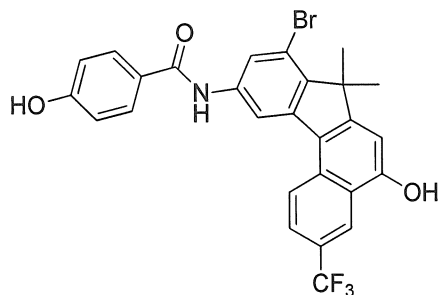
Quy trình từ Ví dụ 5A được tuân theo ngoại trừ là 1-(4-flophenyl)-1-(4-butoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-metoxyphephenyl)prop-2-yn-1-ol. Phân tích NMR của sản phẩm màu tím được xác định cấu trúc phù hợp với 3-(4-butoxyphenyl)-3-(4-flophenyl)-10,12-dibromo-6-triflometyl-13,13-dimetyl-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Bước 2

Bổ sung vào hỗn hợp gồm sản phẩm của bước 1 (2,00 g) và 4-(4,4,5,5-tetrametyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol (0,57 g) trong hỗn hợp gồm THF (25 mL) và nước (25 mL) với tỷ lệ 1:1 trong bình phản ứng được bổ sung kali florua (1,5 g). Dung dịch được khử khí bằng cách sục nitơ trong 10 phút. Bổ sung bis(triphenylphosphin) paladi(II) clorua (0,25 g) vào dung dịch được khử khí này. Dung dịch được gia nhiệt đến hồi lưu trong 8 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng etyl axetat. Sau đó hỗn hợp này được lọc qua nền của Bộ lọc CELIT[®] và dịch lọc được phân chia bằng etyl axetat và nước. Dịch chiết etyl axetat được thu gom, làm khan bằng natri sulfat khan và cô để tạo thành cặn dạng dầu. Cặn này được tinh chế bằng sắc ký cột sử dụng hỗn hợp hexan và etyl axetat với tỷ lệ 9:1 (thể tích:thể tích) làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa sản phẩm mong muốn được gom lại và cô trong chân

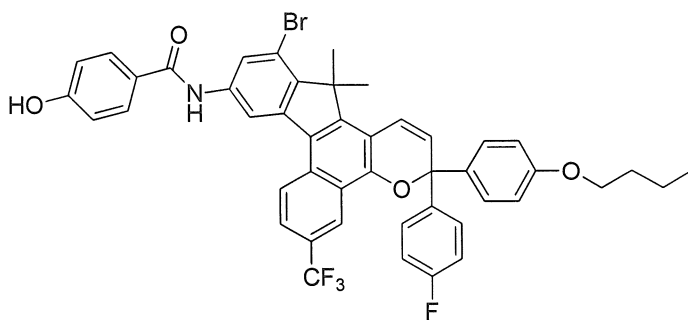
không để tạo thành cặn dạng dầu. Dầu này được hòa tan trong lượng tối thiểu diclometan và được nhỏ giọt vào dung dịch chứa metanol được khuấy mạnh. Kết tủa tạo thành được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để tạo thành chất rắn (1,00 g). Phân tích NMR của chất rắn này được xác định cấu trúc phù hợp với 3-(flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-(4-hydroxyphenyl)-6-triflometyl-12-bromo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-b]pyran.

Ví dụ 16



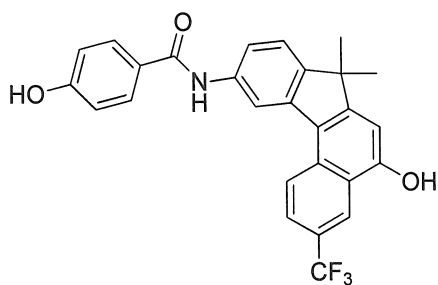
Bổ sung bis(dibenzylidenaxeton)paladi(0) (0,55 g), 2-di-tert-butylphosphino-3,4,5,6-tetrametyl-2',4',6'-triisopropyl-1,1'-biphenyl (1,14 g), kali phosphat nghiền (8,72 g), 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-5-yl axetat từ bước 4 của Ví dụ 5 (5,00 g) và 4-hydroxybenzamid (2,15 g) vào bình đáy tròn ba cổ (100 mL). Bình này được rút ra và được nạp bằng nitơ. Bổ sung *tert*-butanol được khử khí (30 mL) và hỗn hợp được gia nhiệt đến hồi lưu trong 6 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng và được pha loãng bằng EtOAc. Dung dịch được lọc qua nền Bộ lọc CELIT[®] và dịch lọc được thu gom. 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 (thể tích:thể tích) làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa nguyên liệu mong muốn được gom lại và cô để tạo thành dầu. Dầu này được bổ sung vào lượng tối thiểu etyl axetat và hexan được bổ sung, và bình này được cô để tạo thành các tinh thể. Các tinh thể được thu gom bằng cách lọc trong chân không và làm khô để tạo thành chất rắn màu trắng (4,27g). Phân tích NMR của chất rắn màu trắng này được xác định cấu trúc phù hợp với N-(8-bromo-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7H-benzo[c]fluoren-10-yl)-4-hydroxybenzamid.

Ví dụ 16A



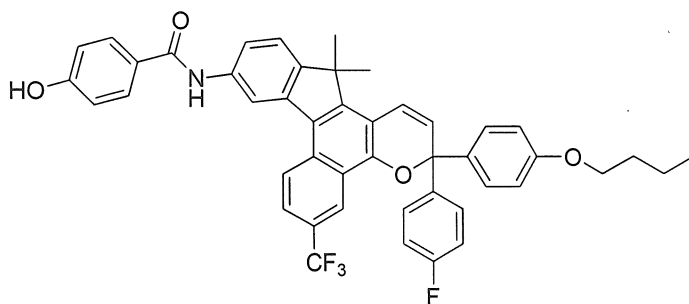
Quy trình từ Ví dụ 5A được tuân theo ngoại trừ là 1-(4-flophenyl)-1-(4-butoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-metoxyphephenyl)prop-2-yn-1-ol và sản phẩm này từ Ví dụ 16A được sử dụng thay cho 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-5-ol. Phân tích NMR của chất rắn màu kem được xác định cấu trúc phù hợp với 3-(flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-(4-hydroxybenzamit)-6-triflometyl-12-bromo-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-*b*]pyran.

Ví dụ 17



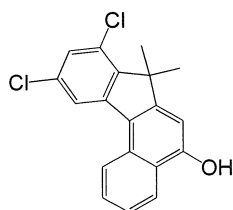
Bổ sung N-(8-bromo-5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-10-yl)-4-hydroxybenzamit (5,00 g) từ Ví dụ 16A, kali cacbonat (5,10 g), 2-butanol (50 mL) và metanol (50 mL) vào bình đáy tròn và được khử khí trong 10 phút. Tetrakis(triphenyl)phosphin paladi (0) (0,55 g) được bổ sung và gia nhiệt đến hồi lưu trong nitơ trong 2 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm lạnh đến nhiệt độ trong phòng và được lọc qua nền của Bộ lọc CELIT[®]. 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 (thể tích:thể tích) làm dung môi rửa giải. Các phân đoạn chứa nguyên liệu mong muốn được gom lại và cô để tạo thành dạng bột (4,00 g). Phân tích NMR của bột này được xác định cấu trúc phù hợp với 4-hydroxy-N-(5-hydroxy-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-10-yl)benzamit.

Ví dụ 17A



Quy trình từ Ví dụ 5A được tuân theo ngoại trừ là 1-(4-flophenyl)-1-(4-butoxyphenyl)prop-2-yn-1-ol được sử dụng thay cho 1-(4-butoxyphenyl)-1-(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol và sản phẩm từ Ví dụ 17A được sử dụng thay cho 8,10-dibromo-7,7-dimetyl-3-(triflometyl)-7*H*-benzo[*c*]fluoren-5-ol. Phân tích NMR của chất rắn màu kem được xác định cấu trúc phù hợp với 3-(flophenyl)-3-(4-butoxyphenyl)-10-(4-hydroxybenzamit)-6-triflometyl-13,13-dimetyl-3,13-dihydro-indeno[2',3':3,4]naphto[1,2-*b*]pyran.

Ví dụ 18



Bước 1

Magie (5,38 g) và THF (50 mL) được cho vào bình khô được trang bị phễu nhỏ giọt chứa hỗn hợp gồm 1-bromo-3,5-diclobenzen (50 g) và THF (300 mL). Bỏ sung 30 mL dung dịch trong phễu nhỏ giọt được bỏ sung vào bình này. Vài giọt dibromoetan cũng được bỏ sung vào bình này và vài phút sau, dung môi trong bình phản ứng bắt đầu sôi. Phần còn lại của dung dịch trong phễu nhỏ giọt được bỏ sung từng giọt. Nước đá được sử dụng từng lúc để giúp cho hỗn hợp phản ứng giữ ở khoảng nhiệt độ trong phòng. Sau khi bỏ sung, hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong hai giờ. Benzonitril (22,82 g) được bỏ sung vào hỗn hợp phản ứng và hỗn hợp được hồi lưu trong 2 ngày. Dung dịch HCl 3 N (300 mL) được bỏ sung và hỗn hợp được khuấy trong 4 giờ và sau đó được chiết sử dụng etyl axetat. Lớp hữu cơ được thu gom và sau đó cô. Dầu thu hồi (49 g) được sử dụng trong bước tiếp theo mà không cần tinh chế thêm.

Bước 2

Sản phẩm thu được từ bước 1 (47 g), dimetyl succinat (36 g) và toluen (500 mL) được bỏ sung vào bình phản ứng được trang bị máy khuấy cơ học, phễu bỏ sung chất rắn

và tấm phủ nitor. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng cho đến khi các chất rắn được hòa tan. Kali t-butoxit rắn (23,1 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 được rửa bằng toluen. HCl (3 N) được bổ sung vào dung dịch nước này để điều chỉnh độ pH đến 5. Hỗn hợp tạo thành được chiết bằng etyl axetat, được làm khan trên magie sulfat, cô và làm khô trong chân không. Thu được dầu làm sản phẩm (65 g). Dầu này được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 3

Hỗn hợp gồm sản phẩm (65 g) từ bước 2 và anhydrit axetic (200 mL) được trộn và tái hồi lưu trong bình phản ứng được trang bị bình ngưng. Sau một giờ, anhydrit axetic được loại bỏ bằng cách làm bay hơi trong chân không và dầu thu được (67 g) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 4

Bổ sung metanol (500 mL) và HCl (12 N, 1 mL) vào bình phản ứng chứa sản phẩm của bước 3 (67 g). Hỗn hợp này được hồi lưu trong hai 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 khan trên magie sulfat, cô và làm khô trong chân không. Thu được dầu trong (48 g). Etyl axetat/hexan (1/9) ((thể tích/thể tích) được sử dụng để kết tinh sản phẩm này. thu được các tinh thể màu trắng (12 g) dưới dạng chất đồng phân vùng không mong muốn. Nước cái được cô. Thu được dầu (31 g). NMR xác định rằng phần chính của sản phẩm trong dầu này (80%) có cấu trúc phù hợp với metyl 1-(3,5-diclophenyl)-4-hydroxy-2-naphtoat.

Bước 5

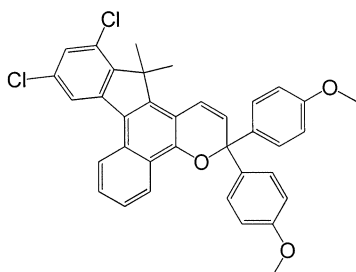
Sản phẩm (31 g) từ bước 4 được hòa tan trong THF khan (500 ml) trong bình làm khô được trang bị phễu nhỏ giọt và que khuấy từ. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng, và dung dịch chứa metyl magie bromua (160 ml) trong toluen/THF (1:1) 1,6 M được bổ sung nhỏ giọt. Sau khi bổ sung, hỗn hợp được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong khoảng 16 giờ. Sau đó hỗn hợp phản ứng được rót vào vào 2 L nước đá. Giá trị độ pH của hỗn hợp 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 khan trên magie sulfat, cô và làm khô

trong chân không. Sản phẩm thu hồi (30 g dầu) được sử dụng trực tiếp trong bước tiếp theo.

Bước 6

Sản phẩm thu được từ bước 5 (30 g) và xylene (300 mL) được bổ sung vào bình phản ứng được trang bị que khuấy từ. Bổ sung axit p-toluensulfonic (1 g) và hỗn hợp tạo thành được hồi lưu trong tám giờ. Xylene 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 khan trên magie sulfat và cô. Thu được sản phẩm thô dưới dạng dầu (20 g). Một phần nhỏ sản phẩm này (1,8 g) được tinh chế sử dụng CombiFlash Rf của Teledyne ISCO. Sau khi tách, thu được hai thành phần. Phân tích NMR thể hiện thành phần chính có cấu trúc phù hợp với: 8,10-diclo-7,7-dimetyl-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

Ví dụ 18A



Sản phẩm thô thu được từ bước 6 của Ví dụ 18 (18 g) được cho vào bình phản ứng. Bổ sung vào bình này 1,1-bis(4-metoxypheyl)prop-2-yn-1-ol (20 g), vài tinh thể axit p-toluensulfonic và metylen clorua (300 ml). Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong một giờ. Sản phẩm được tinh chế sử dụng CombiFlash® Rf của Teledyne ISCO sau đó tái kết tinh từ etyl ete. Thu được chất rắn màu xám (10 g) làm sản phẩm. Phân tích NMR xác định rằng sản phẩm này có cấu trúc phù hợp với 3,3-bis(4-metoxypheyl)-10,12-diclo-13,13-trimetyl-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 2A-5A, 10A, 13A và 18A theo cách dưới đây. Lượng hợp chất được tính toán để thu được dung dịch $1,5 \times 10^{-3}$ mol 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 bơm 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 lưới 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 cho chúng tiếp xúc với ánh sáng tử ngoại 365 nm trong 10 phút ở khoảng cách khoảng 14 cm so với nguồn sáng để hoạt hóa trước 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 lạnh 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. Khoang 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 vonfram 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 chi tiết 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 khoang chứa 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 (ΔOD) 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: $\Delta OD = \log(\% Tb / \% Ta)$, trong đó % Tb là phần trăm truyền qua ở trạng thái trắng, % Ta là phần trăm truyền qua ở trạng thái hoạt hóa và logarit là 10.

$\lambda_{\max\text{-vis}}$ 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. $\lambda_{\max\text{-vis}}$ 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 tiếp xúc với 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

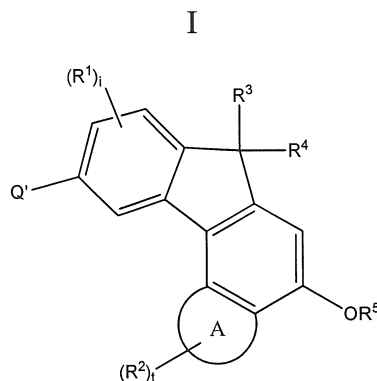
Ví dụ #	$\lambda_{\max\text{-vis}}$ (nm)	Độ nhạy ($\Delta OD/\text{phút}$)	ΔOD ở bão hòa	T1/2 (giây)
2A	572	0,44	0,27	35
3A	564	0,46	0,34	44
4A	551	0,65	0,44	35

5A	565	0,23	0,09	14
9A	603	0,33	0,18	28
10A	562	0,28	0,10	14
13A	572	0,26	0,26	93
18A	550	0,49	0,36	39

Sáng chế được mô tả với việc đề cập đến các nội dung chi tiết cụ thể về các phương án cụ thể của nó. Các nội dung này không được dự định làm giới hạn phạm vi của sáng chế ngoại trừ được các nội dung được bao gồm trong yêu cầu bảo hộ.

YÊU CẦU BẢO HỘ

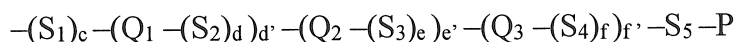
1. Hợp chất vòng ngưng tụ indeno có công thức (I) sau:



trong đó:

(A) vòng A được chọn từ aryl không được thế, aryl được thế, aryl vòng ngưng tụ không được thế, aryl vòng ngưng tụ được thế, heteroaryl không được thế, và heteroaryl được thế,

(B) Q' được chọn từ halogen, -OH, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b, -C(O)NR^aR^a và nhóm kéo dài L, trong đó mỗi R^a độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi ít nhất một trong số các nhóm -O-, -S-, -C(O)-, -C(O)O-, -S(O)-, -S(O₂)-, -N=N-, -N(R₁₁')- trong đó R₁₁' được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, -Si(OR₁₄)_u(R₁₄)_v-, trong đó mỗi u và v độc lập được chọn từ 0 đến 2, với điều kiện tổng của u và v là 2, và mỗi R₁₄ độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, và dạng kết hợp gồm hai hoặc nhiều nhóm này, hoặc hai nhóm R^a cùng với -N và tùy ý một nguyên tử khác loại bổ sung được chọn từ N và O để tạo thành heteroxycloalkyl, và R^b được chọn từ perhalohydrocarbyl, và Q'' được chọn từ halo, -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a, và aryl được thế, trong đó các phần tử thế này được chọn từ -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a, trong đó nhóm kéo dài L nêu trên được thể hiện bằng công thức sau:



trong đó:

(i) mỗi Q₁, Q₂, và Q₃ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ, nhóm hóa trị hai được chọn từ nhóm thơm không được thế hoặc được thế, nhóm vòng béo không được thế hoặc được thế, nhóm dị vòng không được thế hoặc được thế, và

dạng kết hợp của chúng, trong đó các phần tử thể được chọn từ nhóm được thể hiện bởi P, mesogen tinh thể lỏng, halogen, poly(C₁-C₁₈ alkoxy), C₁-C₁₈ alkoxycarbonyl, C₁-C₁₈ alkylcarbonyl, C₁-C₁₈ alkoxycarbonyloxy, aryloxy carbonyloxy, perflo(C₁-C₁₈)alkoxy, perflo(C₁-C₁₈)alkoxycarbonyl, perflo(C₁-C₁₈)alkylcarbonyl, perflo(C₁-C₁₈)alkylamino, di-(perflo(C₁-C₁₈)alkyl)amino, perflo(C₁-C₁₈)alkylthio, C₁-C₁₈ alkylthio, C₁-C₁₈ axetyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl, C₃-C₁₀ xycloalkoxy, nhóm C₁-C₁₈ alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh được thể một lần bằng xyano, halo, hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, hoặc được thể nhiều lần bằng halo, và nhóm bao gồm một trong số các nhóm có công thức sau: -M(T)_(t-1) và -M(OT)_(t-1), trong đó M được chọn từ nhôm, antimon, tantali, titan, ziricon và silicon, T được chọn từ các gốc chức hữu cơ, các gốc hydrocacbon chức hữu cơ, các gốc hydrocacbon béo và các gốc hydrocacbon thơm, và t là hóa trị của M,

(ii) mỗi c, d, e, và f độc lập được chọn từ số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 20; và mỗi S₁, S₂, S₃, S₄, và S₅ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ đơn vị đệm được chọn từ:

(1) -(CH₂)_g-, -(CF₂)_h-, -Si(Z')₂(CH₂)_g-, -(Si(CH₃)₂O)_h-, trong đó mỗi Z' độc lập được chọn từ hydro, C₁-C₁₈ alkyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl, và aryl; g mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ 1 đến 20; h là số nguyên bao gồm từ 1 đến 16;

(2) -N(Z)-, -C(Z)=C(Z)-, -C(Z)=N-, -C(Z')-C(Z')- hoặc liên kết đơn, trong đó Z mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, C₁-C₁₈ alkyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl và aryl, và Z' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl, C₃-C₁₀ xycloalkyl và aryl; và

(3) -O-, -C(O)-, -C≡C-, -N=N-, -S-, -S(O)-, -S(O)(O)-, -(O)S(O)-, -(O)S(O)O-, -O(O)S(O)O-, hoặc gốc C₁-C₂₄ alkylen mạch thẳng hoặc mạch nhánh, gốc C₁-C₂₄ alkylen này là không được thể, được thể một lần bởi xyano hoặc halo, hoặc được thể nhiều lần bởi halo,

với điều kiện nếu hai đơn vị đệm bao gồm các nguyên tử khác loại được liên kết với các đơn vị đệm sẽ được liên kết sao cho các nguyên tử khác loại không liên kết trực tiếp với nhau, và

với điều kiện nếu S₁ và S₅ lần lượt được liên kết với hợp chất có công thức I và P, chúng được liên kết sao cho hai nguyên tử khác loại không liên kết trực tiếp với nhau;

(iii) P được chọn từ: hydroxy, amino, C₂-C₁₈ alkenyl, C₂-C₁₈ alkynyl, azido, silyl, siloxy, silylhydrua, (tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy, thio, isoxyanato,

thioisoxyanato, acryloyloxy, metacryloyloxy, 2-(acryloyloxy)ethylcarbamyl, 2-(metacryloyloxy)ethylcarbamyl, aziridinyl, alyloxycacbonxyloxy, epoxy, axit carboxylic, este carboxylic, acryloylamino, metacryloylamino, aminocacbonyl, C₁-C₁₈ alkyl aminocacbonyl, aminocacbonyl(C₁-C₁₈)alkyl, C₁-C₁₈ alkyloxycacbonxyloxy, halocacbonyl, hydro, aryl, hydroxy(C₁-C₁₈)alkyl, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, amino(C₁-C₁₈)alkyl, C₁-C₁₈ alkylamino, di-(C₁-C₁₈)alkylamino, C₁-C₁₈ alkyl(C₁-C₁₈)alkoxy, C₁-C₁₈ alkoxy(C₁-C₁₈)alkoxy, nitro, poly(C₁-C₁₈)alkyl ete, (C₁-C₁₈)alkyl(C₁-C₁₈)alkoxy(C₁-C₁₈)alkyl, polyetylenoxy, polypropyleneoxy, etylenyl, acryloyl, acryloyloxy(C₁-C₁₈)alkyl, metacryloyl, metacryloyloxy(C₁-C₁₈)alkyl, 2-cloacryloyl, 2-phenylacryloyl, acryloyloxyphenyl, 2-cloacryloylamino, 2-phenylacryloylaminocacbonyl, oxetanyl, glyxidil, xyano, isoxyanato(C₁-C₁₈)alkyl, este axit itaconic, vinyl ete, vinyl este, dẫn xuất styren, các polyme tinh thể lỏng mạch thẳng và mạch nhánh, các dẫn xuất siloxan, các dẫn xuất etylenimin, các dẫn xuất axit maleic, các dẫn xuất axit fumaric, các dẫn xuất axit xinamic không được thế, các dẫn xuất axit xinamic được thế bằng ít nhất một trong số metyl, metoxy, xyano và halogen, hoặc 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, các gốc terpenoit, các gốc alkaloit và hỗn hợp gồm chúng, trong đó các phần tử thế này độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, amino, C₃-C₁₀ xycloalkyl, C₁-C₁₈ alkyl(C₁-C₁₈)alkoxy, flo(C₁-C₁₈)alkyl, xyano, xyano(C₁-C₁₈)alkyl, xyano(C₁-C₁₈)alkoxy hoặc hỗn hợp gồm 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; và

(iv) 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 1;

(C) i được chọn từ 0 đến 3, t được chọn từ 0 đến tổng số các vị trí mà R² có thể được liên kết vào đó, và R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi ít nhất một trong số các nhóm -O-, -S-, -C(O)-, -C(O)O-, -S(O)-, -S(O₂)-, -N=N-, -N(R₁₁')- trong đó R₁₁' được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, -Si(OR₁₄)_u(R₁₄)_v-, trong đó mỗi u và v độc lập được chọn từ 0 đến 2, với điều kiện tổng của u và v là 2, và mỗi R₁₄ độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, và dạng kết hợp bao gồm hai hoặc nhiều nhóm này; halogen; xyano; và -N(R₁₁')R₁₂'.

trong đó R_{11}' và R_{12}' mỗi nhóm độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, hoặc R_{11}' và R_{12}' cùng nhau tạo thành cấu trúc vòng tùy ý bao gồm ít nhất một nguyên tử khác loại,

(D) mỗi nhóm R^3 và R^4 độc lập được chọn từ, hydro; hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, mỗi nhóm này tùy ý và độc lập được ngắt quãng bởi ít nhất một trong số các nhóm -O-, -S-, -C(O)-, -C(O)O-, -S(O)-, -S(O₂)-, -N=N-, -N(R_{11}')- trong đó R_{11}' được chọn từ hydro, hydrocarbyl hoặc hydrocarbyl được thế, -Si(OR₁₄)_u(R₁₄)_v-, trong đó mỗi u và v độc lập được chọn từ 0 đến 2, với điều kiện tổng của u và v là 2, và mỗi R₁₄ độc lập được chọn từ hydro, hydrocarbyl và hydrocarbyl được thế, và dạng kết hợp bao gồm hai hoặc nhiều nhóm này; hoặc R^3 và R^4 cùng nhau tạo thành cấu trúc vòng tùy ý bao gồm ít nhất một nguyên tử khác loại, và

(E) R^5 được chọn từ hydro, -C(O)-R¹³ hoặc -S(O₂)R¹³ trong đó R¹³ là hydrocarbyl, hoặc halohydrocarbyl.

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

(A) vòng A được chọn từ aryl không được thế và aryl được thế;

(B) Q' được chọn từ bromo, flo, clo, -N₃, -NR^aR^a, -N(R^a)C(O)Q'', Q'', -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b, -C(O)NR^aR^a, và nhóm kéo dài L nêu trên, trong đó mỗi R^a độc lập được chọn từ hydro, 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, trong đó các phần tử thế này được chọn từ halo và hydroxyl, hoặc hai nhóm R^a cùng với -N và nguyên tử khác loại bổ sung được chọn từ N và O để tạo thành heteroxycloalkyl và R^b được chọn từ nhóm alkyl được perfluor hóa có từ 1 đến 18 nguyên tử cacbon, và Q'' được chọn từ -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a, và aryl được thế trong đó các phần tử thế này được chọn từ -OH, -NR^aR^a, -C(O)OR^a, -SR^a, và với nhóm kéo dài L, 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;

(C) R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ,

(a) -C(O)X₂₄, trong đó X₂₄ được chọn từ nhóm kéo dài L nêu trên, hydroxy, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, phenyl không được thế hoặc được thế một lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng ít nhất một trong số C₁-C₁₈ alkyl, phenyl, benzyl, và naphthyl,

(b) -OX₇ và -N(X₇)₂; trong đó X₇ được chọn từ:

(i) hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ axyl, phenyl(C₁-C₁₈)alkyl, mono(C₁-C₁₈)alkyl được thế phenyl(C₁-C₁₈)alkyl, mono(C₁-C₁₈)alkoxy được thế phenyl(C₁-C₁₈)alkyl; C₁-C₁₈ alkoxy(C₁-C₁₈)alkyl; C₃-C₁₀ xycloalkyl; mono(C₁-C₁₈)alkyl được thế C₃-C₁₀ xycloalkyl, C₁-C₁₈ haloalkyl, alyl, benzoyl, benzoyl được thế một lần, naphtoyl hoặc naphtoyl được thế một lần, trong đó mỗi trong số các phần tử thế benzoyl và naphtoyl này độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl, và C₁-C₁₈ alkoxy,

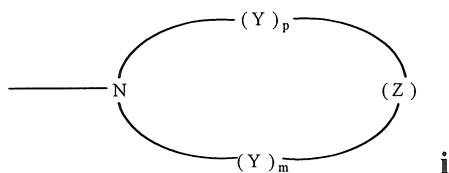
(ii) -CH(X₈)X₉, trong đó X₈ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₁₈ alkyl, và X₉ được chọn từ nhóm kéo dài L, -CN, -CF₃, hoặc -COOX₁₀, trong đó X₁₀ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₁₈ alkyl,

(iii) -C(O)X₆, trong đó X₆ được chọn từ ít nhất một trong số các, hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkoxy, phenoxy không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, nhóm amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl, và nhóm phenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, hoặc

(iv) tri(C₁-C₁₈)alkylsilyl, tri(C₁-C₁₈)alkylsilyloxy, tri(C₁-C₁₈)alkoxysilyl, tri(C₁-C₁₈)alkoxysilyloxy, di(C₁-C₁₈)alkyl(C₁-C₁₈ alkoxy)silyl, di(C₁-C₁₈)alkyl(C₁-C₁₈ alkoxy)silyloxy, di(C₁-C₁₈)alkoxy(C₁-C₁₈ alkyl)silyl hoặc di(C₁-C₁₈)alkoxy(C₁-C₁₈ alkyl)silyloxy;

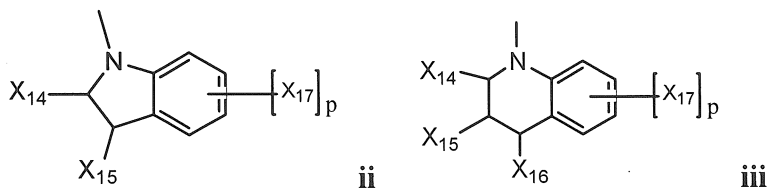
(c) -SX₁₁, trong đó X₁₁ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ haloalkyl, nhóm aryl không được thế, hoặc được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ alkoxy, hoặc halogen;

(d) vòng chứa nitơ được thể hiện bằng hợp chất có công thức i:



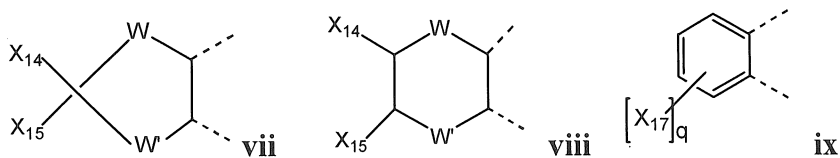
trong đó, mỗi -Y- mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -CH₂-, -CH(R₁₃')-, -C(R₁₃')₂-, -CH(aryl)-, -C(aryl)₂-, và -C(R₁₃')(aryl)-, và Z là -Y-, -O-, -S-, -S(O)-, -SO₂-, -NH-, -N(R₁₃')-, hoặc -N(aryl)-, trong đó mỗi R₁₃' độc lập là nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₂₀ alkyl, mỗi aryl độc lập là phenyl hoặc naphtyl, m là số nguyên 1, 2 hoặc 3, và p là số nguyên 0, 1, 2, hoặc 3, với điều kiện nếu p là 0, thì Z là -Y-;

(e) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc iii,



trong đó X_{14} , X_{15} , và X_{16} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, phenyl hoặc naphthyl, hoặc X_{14} và X_{15} cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 8 nguyên tử cacbon, p là số nguyên được chọn từ 0, 1, hoặc 2, và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, hoặc halogen;

(f) các nhóm R^1 liền kề trực tiếp, và các nhóm R^2 liền kề trực tiếp, trong mỗi trường hợp độc lập cùng nhau tạo thành nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức vii, viii, hoặc ix,



trong đó,

(i) W và W' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ $-O-$, $-N(X_7)-$, $-C(X_{14})-$, và $-C(X_{17})-$,

(ii) trong đó X_{14} và X_{15} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, phenyl hoặc naphthyl, hoặc X_{14} và X_{15} cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 8 nguyên tử cacbon; và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, hoặc halogen, và

(iii) q là số nguyên được chọn từ 0, 1, 2, 3, và 4;

(g) nhóm kéo dài L;

(h) nhóm B được chọn từ,

(i) hydro, C_1 - C_{18} alkyl, C_2 - C_{18} alkyliden, C_2 - C_{18} alkylidyn, vinyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl, C_1 - C_{18} haloalkyl, alyl, halogen, và benzyl không được thế hoặc được thế một lần bằng ít nhất một trong số C_1 - C_{18} alkyl và C_1 - C_{18} alkoxy;

(ii) phenyl được thế một lần ở vị trí *para* với ít nhất một phần tử thế được chọn từ: C_1 - C_{18} alkoxy, mạch C_1 - C_{20} alkylen mạch thẳng hoặc phân nhánh, mạch C_1 - C_4 polyoxyalkylen mạch thẳng hoặc phân nhánh, C_3 - C_{20} alkylen vòng, phenylen, naphtylen, C_1 - C_{18} alkyl được thế phenylen, mono- hoặc poly-uretan(C_1 - C_{20})alkylen, mono- hoặc poly-este(C_1 - C_{20})alkylen, mono- hoặc poly-cacbonat(C_1 -

C₂₀)alkylen, polysilanylen, polysiloxanylen và hỗn hợp gồm chúng, trong đó ít nhất một phần tử thế được liên kết với nhóm aryl của vật liệu đổi màu theo ánh sáng,

(iii) $-\text{CH}(\text{CN})_2$ và $-\text{CH}(\text{COOX}_1)_2$, trong đó X_1 được chọn từ ít nhất một trong số hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng phenyl, phenyl(C₁-C₁₈)alkyl được thế một lần bằng C₁-C₁₈ alkyl, C₁-C₁₈ haloalkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl và C₁-C₁₈ alkoxy, và nhóm kéo dài L,

(iv) $-\text{CH}(\text{X}_2)(\text{X}_3)$, trong đó,

(1) X_2 được chọn từ ít nhất một trong số hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₈ alkyl, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl và C₁-C₁₈ alkoxy; và

(2) X_3 được chọn từ ít nhất một trong số $-\text{COOX}_1$, $-\text{COX}_1$, $-\text{COX}_4$, và $-\text{CH}_2\text{OX}_5$, trong đó, X_4 được chọn từ ít nhất một trong số morpholino, piperidino, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl, và nhóm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ phenylamino và diphenylamino, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy; và X_5 được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, $-\text{C}(\text{O})\text{X}_2$, C₁-C₁₈ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng (C₁-C₁₈)alkoxy hoặc phenyl, phenyl(C₁-C₁₈)alkyl được thế một lần bằng (C₁-C₁₈)alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C₁-C₁₈ alkyl và C₁-C₁₈ alkoxy;

(v) nhóm aryl không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần; 9-julolidinyl; hoặc nhóm dị vòng thơm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ pyridyl, furanyl, benzofuran-2-yl, benzofuran-3-yl, thienyl, benzothien-2-yl, benzothien-3-yl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazoyl, benzopyridyl, indolinyl, hoặc fluorenyl; trong đó mỗi phần tử thế aryl và vòng thơm dị vòng mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ:

(1) nhóm kéo dài L;

(2) $-\text{COOX}_1$ hoặc $-\text{C}(\text{O})\text{X}_6$;

(3) aryl, halogen, haloaryl, C₃-C₁₀ xycloalkylaryl, và nhóm aryl được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₈ alkyl hoặc C₁-C₁₈ alkoxy;

(4) C_1 - C_{18} alkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyloxy(C_1 - C_{18})alkyl, aryl(C_1 - C_{18})alkyl, aryloxy(C_1 - C_{18})alkyl, mono- hoặc di- (C_1 - C_{18})alkylaryl(C_1 - C_{18})alkyl, mono- hoặc di- (C_1 - C_{18})alkoxyaryl(C_1 - C_{18})alkyl, C_1 - C_{18} haloalkyl, và mono(C_1 - C_{18})alkoxy(C_1 - C_{18})alkyl;

(5) C_1 - C_{18} alkoxy, C_3 - C_{10} xycloalkoxy, xycloalkyloxy(C_1 - C_{18})alkoxy, aryl(C_1 - C_{18})alkoxy, aryloxy(C_1 - C_{18})alkoxy, mono- hoặc di- (C_1 - C_{18})alkylaryl(C_1 - C_{18})alkoxy, và mono- hoặc di- (C_1 - C_{18})alkoxyaryl(C_1 - C_{18})alkoxy;

(6) aminocacbonyl, aminocacbonyl(C_1 - C_{18})alkylen, amino, mono- hoặc di-alkylamino, diarylamino, piperazino, N-(C_1 - C_{18})alkylpiperazino, N-aryl piperazino, aziridino, indolino, piperidino, morpholino, thiomorpholino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pyrrolidyl, hydroxy, acryloxy, metacryloxy, và halogen;

(7) $-OX_7$ hoặc $-N(X_7)_2$;

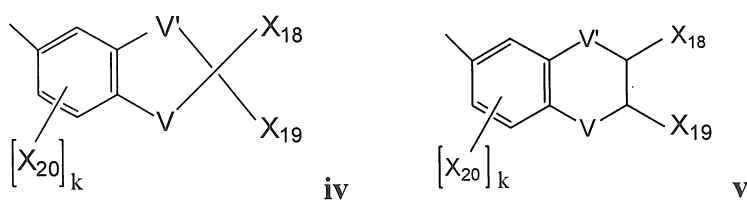
(8) $-SX_{11}$;

(9) vòng chứa nitơ được thể hiện bằng hợp chất có công thức i;

(10) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc iii;

(11) nhóm không được thể hoặc được thể một lần được chọn từ pyrazolyl, imidazolyl, pyrazolinyl, imidazolinyl, pyrrolidinyl, phenothiazinyl, phenoxazinyl, phenazinyl, hoặc acridinyl, trong đó mỗi phần tử thể độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, phenyl, hydroxy, amino hoặc halogen;

(12) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức iv hoặc v:



trong đó,

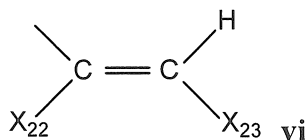
(I) V' độc lập được chọn đối với mỗi công thức này từ $-O-$, $-CH-$, C_1 - C_6 alkylen, và C_3 - C_{10} xycloalkylen,

(II) V độc lập được chọn đối với mỗi công thức này từ $-O-$ hoặc $-N(X_{21})-$, trong đó X_{21} là hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, và C_2 - C_{18} axyl, với điều kiện nếu V là $-N(X_{21})-$, thì V' là $-CH_2-$,

(III) mỗi X_{18} và X_{19} độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, và C_1 - C_{18} alkyl, và

(IV) k được chọn từ 0, 1, và 2, và mỗi X_{20} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, hydroxy và halogen, và

(13) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức vi:



trong đó

(I) X_{22} được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, và C_1 - C_{18} alkyl, và

(II) X_{23} được chọn từ nhóm kéo dài L và nhóm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ naphthyl, phenyl, furanyl và thienyl, trong đó mỗi phần tử thế mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C_1 - C_{18} alkyl, C_1 - C_{18} alkoxy, và halogen;

(D) mỗi nhóm R^3 và R^4 độc lập được chọn từ,

(i) hydro, C_1 - C_{20} alkyl, C_1 - C_{20} haloalkyl, C_3 - C_{10} xycloalkyl, alyl, benzyl, hoặc benzyl được thế một lần, các phần tử thế trên benzyl này được chọn từ halogen, C_1 - C_{20} alkyl hoặc C_1 - C_{20} alkoxy;

(ii) nhóm không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần được chọn từ phenyl, naphthyl, phenantryl, pyrenyl, quinolyl, isoquinolyl, benzofuranyl, thienyl, benzothienyl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazolyl, hoặc indolyl, các phần tử thế này trong mỗi trường hợp độc lập được chọn từ halogen, C_1 - C_{20} alkyl hoặc C_1 - C_{20} alkoxy;

(iii) phenyl được thế một lần, phần tử thế này nằm ở vị trí *para* là $-(CH_2)_t-$ hoặc $-O-(CH_2)_t-$, trong đó t là số nguyên 1, 2, 3, 4, 5 hoặc 6, phần tử thế này được liên kết với nhóm aryl là nhóm chức của vật liệu đổi màu theo ánh sáng;

(iv) nhóm $-CH(R^{10})G$, trong đó R^{10} là hydro, C_1 - C_{20} alkyl hoặc các nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, phenyl hoặc naphthyl, và G là $-CH_2OR^{11}$, trong đó R^{11} là hydro, $-C(O)R^{10}$, C_1 - C_{20} alkyl, C_1 - C_{20} alkoxy(C_1 - C_{20})alkyl, phenyl(C_1 - C_{20})alkyl, mono(C_1 - C_{20})alkoxy được thế phenyl(C_1 - C_{20})alkyl, hoặc các nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần phenyl hoặc naphthyl, mỗi trong số các phần tử thế của nhóm phenyl và naphthyl này là C_1 - C_{20} alkyl hoặc C_1 - C_{20} alkoxy; hoặc

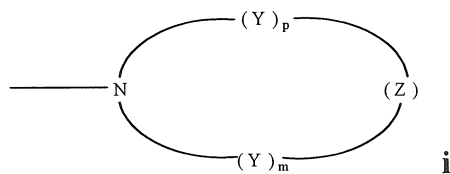
- (v) R^3 và R^4 cùng nhau tạo thành phần tử thể spiro được chọn từ vòng spiro-carboxylic được thể hoặc không được thể chứa từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon, vòng spiro-heteroxylic được thể hoặc không được thể chứa 1 hoặc 2 nguyên tử oxy và từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon bao gồm nguyên tử spirocacbon, vòng spiro-carboxylic và vòng spiro-heteroxylic này được phân cách bằng 0, 1 hoặc 2 vòng benzen, các phần tử thể này là hydro hoặc C_1 - C_{20} alkyl; và
- (E) R^5 được chọn từ hydro và $-C(O)-R^{13}$.

3. Hợp chất vòng ngưng tụ indeno theo điểm 1, trong đó,

- (A) vòng A được chọn từ aryl không được thể và aryl được thể;
- (B) Q' được chọn từ bromo, clo, $-NR^aR^a$, $-C(O)OR^a$, Q'' và nhóm kéo dài L, trong đó mỗi R^a độc lập được chọn từ hydro và nhóm alkyl có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, hoặc hai nhóm R^a cùng với $-N$ và nguyên tử N bổ sung để tạo thành heteroxycloalkyl và R^b được chọn từ nhóm alkyl được perflo hóa có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, và với nhóm kéo dài L, 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 3;
- (C) R^1 cho mỗi i, và R^2 cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ,
- (a) $-C(O)X_{24}$, trong đó X_{24} được chọn từ nhóm kéo dài L, hydroxy, C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, phenyl không được thể hoặc được thể một lần bằng C_1 - C_6 alkyl hoặc C_1 - C_6 alkoxy, amino không được thể, được thể một hoặc hai lần bằng ít nhất một trong số C_1 - C_6 alkyl, phenyl, benzyl, và naphtyl;
- (b) $-OX_7$ và $-N(X_7)_2$; trong đó X_7 được chọn từ,
- (i) hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} axyl, phenyl(C_1 - C_{12})alkyl, mono(C_1 - C_{12})alkyl được thể phenyl(C_1 - C_{12})alkyl, mono(C_1 - C_{12})alkoxy được thể phenyl(C_1 - C_{12})alkyl; C_1 - C_{12} alkoxy(C_1 - C_{12})alkyl; C_3 - C_7 xycloalkyl; mono(C_1 - C_{12})alkyl được thể C_3 - C_7 xycloalkyl, C_1 - C_{12} haloalkyl, alyl, benzoyl, benzoyl được thể một lần, naphtoyl hoặc naphtoyl được thể một lần, trong đó mỗi trong số các phần tử thể benzoyl và naphtoyl này độc lập được chọn từ C_1 - C_6 alkyl, và C_1 - C_6 alkoxy;
- (ii) $-CH(X_8)X_9$, trong đó X_8 được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, hoặc C_1 - C_{12} alkyl; và X_9 được chọn từ nhóm kéo dài L, $-CN$, $-CF_3$, hoặc $-COOX_{10}$, trong đó X_{10} được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, hoặc C_1 - C_{12} alkyl;
- (iii) $-C(O)X_6$, trong đó X_6 được chọn từ ít nhất một trong số các, hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkoxy, phenoxy không được thể, được thể một hoặc hai lần

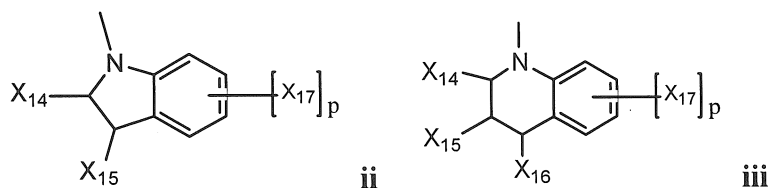
bằng C₁-C₁₂ alkyl hoặc C₁-C₁₂ alkoxy, nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, nhóm amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl, và nhóm phenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy;

(c) vòng chứa nitơ được thể hiện bằng hợp chất có công thức i;



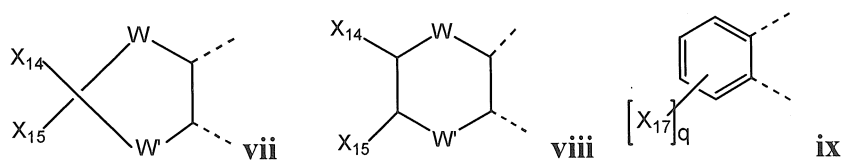
trong đó, mỗi -Y- mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -CH₂-, -CH(R₁₃')-, -C(R₁₃')₂-, -CH(aryl)-, -C(aryl)₂-, và -C(R₁₃')(aryl)-, và Z là -Y-, -O-, -S-, -S(O)-, -SO₂-, -NH-, -N(R₁₃')-, hoặc -N(aryl)-, trong đó mỗi R₁₃' độc lập là nhóm kéo dài L, hoặc C₁-C₂₀ alkyl, mỗi aryl độc lập là phenyl hoặc naphthyl, m là số nguyên 1, 2 hoặc 3, và p là số nguyên 0, 1, 2, hoặc 3, với điều kiện nếu p là 0, thì Z là -Y-;

(d) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc iii;



trong đó X₁₄, X₁₅, và X₁₆ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C₁-C₁₂ alkyl, phenyl hoặc naphthyl, hoặc X₁₄ và X₁₅ cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; p là số nguyên được chọn từ 0, 1, hoặc 2, và X₁₇ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C₁-C₁₂ alkyl, C₁-C₁₂ alkoxy, hoặc halogen;

(e) các nhóm R¹ liền kề trực tiếp, và các nhóm R² liền kề trực tiếp, trong mỗi trường hợp độc lập cùng nhau tạo thành nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức vii, viii, hoặc ix,



trong đó,

(i) W và W' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -O-, -N(X₇)-, -C(X₁₄)-, và -C(X₁₇)-,

(ii) trong đó X_{14} và X_{15} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl, phenyl hoặc naphthyl, hoặc X_{14} và X_{15} cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; và X_{17} mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl, C_1 - C_{12} alkoxy, hoặc halogen, và

(iii) q là số nguyên được chọn từ 0 đến 3;

(f) nhóm kéo dài L,

(g) nhóm B được chọn từ,

(i) C_1 - C_{12} alkyl, C_3 - C_7 xycloalkyl, C_1 - C_{12} haloalkyl và benzyl không được thế hoặc được thế một lần bằng ít nhất một trong số C_1 - C_6 alkyl và C_1 - C_6 alkoxy;

(ii) $-\text{CH}(\text{CN})_2$ và $-\text{CH}(\text{COOX}_1)_2$, trong đó X_1 được chọn từ ít nhất một trong số hydro, nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng phenyl, phenyl(C_1 - C_6)alkyl được thế một lần bằng C_1 - C_6 alkyl hoặc C_1 - C_6 alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C_1 - C_6 alkyl và C_1 - C_6 alkoxy; và nhóm kéo dài L;

(iii) $-\text{CH}(\text{X}_2)(\text{X}_3)$, trong đó,

(1) X_2 được chọn từ ít nhất một trong số nhóm kéo dài L, C_1 - C_{12} alkyl, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C_1 - C_6 alkyl và C_1 - C_6 alkoxy; và

(2) X_3 được chọn từ ít nhất một trong số $-\text{COOX}_1$, $-\text{COX}_1$, $-\text{COX}_4$, và $-\text{CH}_2\text{OX}_5$, trong đó: X_4 được chọn từ ít nhất một trong số morpholino, piperidino, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C_1 - C_6 alkyl, và nhóm được chọn từ phenylamino và diphenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ C_1 - C_6 alkyl hoặc C_1 - C_6 alkoxy; và X_5 được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, $-\text{C}(\text{O})\text{X}_2$, C_1 - C_{12} alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng (C_1 - C_{12})alkoxy hoặc phenyl, phenyl(C_1 - C_{12})alkyl được thế một lần bằng (C_1 - C_{12})alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thế aryl độc lập được chọn từ C_1 - C_6 alkyl và C_1 - C_6 alkoxy;

(iv) nhóm aryl không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần; 9-julolidinyl; hoặc nhóm dị vòng thơm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ pyridyl, furanyl, benzofuran-2-yl, benzofuran-3-yl, thienyl,

benzothien-2-yl, benzothien-3-yl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazoyl, benzopyridyl, indolyl, hoặc fluorenyl; trong đó mỗi phần tử thể aryl và vòng thơm dị vòng mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ:

(1) nhóm kéo dài L;
 (2) $-\text{COOX}_1$ hoặc $-\text{C(O)X}_6$;
 (3) aryl, haloaryl, $\text{C}_3\text{-C}_7$ xycloalkylaryl, và nhóm aryl được thế một hoặc hai lần bằng $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ alkyl hoặc $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ alkoxy;

(4) $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ alkyl, $\text{C}_3\text{-C}_7$ xycloalkyl, $\text{C}_3\text{-C}_7$ xycloalkyloxy($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkyl, aryl($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkyl, aryloxy($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkyl, mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkylaryl($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkyl, mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxyaryl($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkyl, haloalkyl, và mono($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxy($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkyl;

(5) $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ alkoxy, $\text{C}_3\text{-C}_7$ xycloalkoxy, xycloalkyloxy($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxy, aryl($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxy, aryloxy($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxy, mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkylaryl($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxy, và mono- hoặc di- ($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxyaryl($\text{C}_1\text{-C}_{12}$)alkoxy;

(6) amido, amino, mono- hoặc di-alkylamino, diarylamino, piperazino, N-($\text{C}_1\text{-C}_{18}$)alkylpiperazino, N-arylpiperazino, aziridino, indolino, piperidino, morpholino, thiomorpholino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pyrrolidyl, hydroxy, acryloxy, metacryloxy, và halogen;

(7) $-\text{OX}_7$ hoặc $-\text{N(X}_7)_2$;

(8) nhóm không được thế hoặc được thế một lần được chọn từ pyrazolyl, imidazolyl, pyrazolyl, imidazolyl, pyrrolidinyl, phenothiazinyl, phenoxazinyl, phenazinyl, hoặc acridinyl, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, $\text{C}_1\text{-C}_6$ alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_6$ alkoxy, phenyl, hydroxy, amino hoặc halogen;

(D) mỗi nhóm R^3 và R^4 độc lập được chọn từ hydro, $\text{C}_1\text{-C}_8$ alkyl, $\text{C}_1\text{-C}_8$ haloalkyl, và $\text{C}_3\text{-C}_7$ xycloalkyl, hoặc R^3 và R^4 cùng nhau tạo thành phần tử thể spiro được chọn từ vòng spiro-carboxylic được thế hoặc không được thế chứa từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon; và

(E) R^5 được chọn từ hydro và $-\text{C(O)-R}^{13}$.

4. Hợp chất vòng ngưng tụ indeno theo điểm 1, trong đó,

(A) vòng A được chọn từ aryl không được thế và aryl được thế;

(B) đối với Q', mỗi R^a độc lập được chọn từ hydro và nhóm alkyl có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon, và R^b được chọn từ nhóm alkyl được perfluor hóa có từ 1 đến 6 nguyên tử cacbon;

(C) R¹ cho mỗi i, và R² cho mỗi t, mỗi nhóm độc lập được chọn từ,

(a) -C(O)X₂₄, trong đó X₂₄ được chọn từ hydroxy, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, phenyl không được thế hoặc được thế một lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng ít nhất một trong số C₁-C₆ alkyl, phenyl, benzyl, và naphthyl;

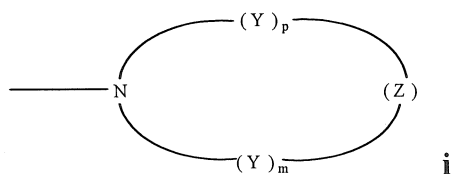
(b) -OX₇ và -N(X₇)₂; trong đó X₇ được chọn từ,

(i) hydro, C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ axyl, phenyl(C₁-C₆)alkyl, mono(C₁-C₆)alkyl được thế phenyl(C₁-C₆)alkyl, mono(C₁-C₆)alkoxy được thế phenyl(C₁-C₆)alkyl; C₁-C₆ alkoxy(C₁-C₆)alkyl; C₃-C₅ xycloalkyl; mono(C₁-C₆)alkyl được thế C₃-C₅ xycloalkyl, C₁-C₆ haloalkyl, alyl, benzoyl, benzoyl được thế một lần, naphthoyl hoặc naphthoyl được thế một lần, trong đó mỗi trong số các phần tử thế benzoyl và naphthoyl này độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl, và C₁-C₃ alkoxy,

(ii) -CH(X₈)X₉, trong đó X₈ được chọn từ hydro hoặc C₁-C₆ alkyl; và X₉ được chọn từ -CN, -CF₃, hoặc -COOX₁₀, trong đó X₁₀ được chọn từ hydro hoặc C₁-C₆ alkyl, và

(iii) -C(O)X₆, trong đó X₆ được chọn từ hydro, C₁-C₁₂ alkoxy, phenoxy không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₆ alkyl hoặc C₁-C₆ alkoxy, nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy, nhóm amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl, và nhóm phenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy;

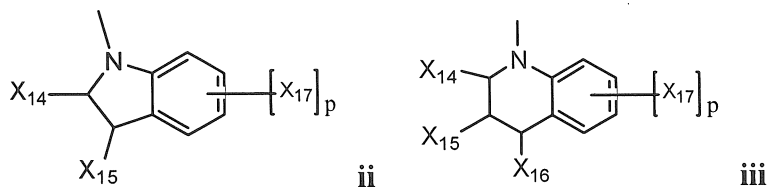
(c) vòng chứa nitơ được thể hiện bằng hợp chất có công thức i,



trong đó, mỗi -Y- mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -CH₂-, -CH(R₁₃')-, -C(R₁₃')₂-, -CH(aryl)-, -C(aryl)₂-, và -C(R₁₃')(aryl)-, và Z là -Y-, -O-, -S-, -S(O)-, -SO₂-, -NH-, -N(R₁₃')-, hoặc -N(aryl)-, trong đó mỗi R₁₃' độc lập là nhóm kéo dài L, hoặc

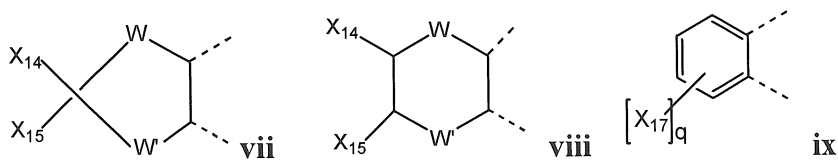
C₁-C₂₀ alkyl, mỗi aryl độc lập là phenyl hoặc naphtyl, m là số nguyên 1, 2 hoặc 3, và p là số nguyên 0, 1, 2, hoặc 3, với điều kiện nếu p là 0, thì Z là -Y-;

(d) nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức ii hoặc iii,



trong đó X₁₄, X₁₅, và X₁₆ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, C₁-C₆ alkyl, hoặc phenyl hoặc X₁₄ và X₁₅ cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; p là số nguyên được chọn từ 0, 1, hoặc 2, và X₁₇ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, hoặc halogen;

(e) các nhóm R¹ liên kế trực tiếp, và các nhóm R² liên kế trực tiếp, trong mỗi trường hợp độc lập cùng nhau tạo thành nhóm được thể hiện bằng hợp chất có công thức vii, viii, hoặc ix,



trong đó,

(i) W và W' mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ -O-, -N(X₇)-, -C(X₁₄)-, và -C(X₁₇)-,

(ii) trong đó X₁₄ và X₁₅ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ hydro, C₁-C₆ alkyl, phenyl hoặc naphtyl, hoặc X₁₄ và X₁₅ cùng nhau tạo thành vòng có từ 5 đến 7 nguyên tử cacbon; và X₁₇ mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ C₁-C₆ alkyl, C₁-C₆ alkoxy, hoặc halogen, và

(iii) q là số nguyên được chọn từ 0 đến 3;

(f) nhóm kéo dài L,

(g) nhóm B được chọn từ,

(i) C₁-C₆ alkyl, C₃-C₅ xycloalkyl, C₁-C₆ haloalkyl và benzyl không được thể hoặc được thể một lần bằng ít nhất một trong số C₁-C₃ alkyl và C₁-C₃ alkoxy;

(ii) -CH(CN)₂ và -CH(COOX₁)₂, trong đó X₁ được chọn từ hydro, C₁-C₆ alkyl không được thể hoặc được thể một lần bằng phenyl, phenyl(C₁-C₃)alkyl được thể một lần bằng C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy, và nhóm aryl không được

thể, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thể aryl độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl và C₁-C₃ alkoxy; và nhóm kéo dài L;

(iv) -CH(X₂)(X₃), trong đó,

(1) X₂ được chọn từ ít nhất một trong số nhóm kéo dài L, C₁-C₆ alkyl, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thể aryl độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl và C₁-C₃ alkoxy; và

(2) X₃ được chọn từ ít nhất một trong số -COOX₁, -COX₁, -COX₄, và -CH₂OX₅, trong đó: X₄ được chọn từ ít nhất một trong số morpholino, piperidino, amino không được thế, được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₃ alkyl, và nhóm được chọn từ phenylamino và diphenylamino không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thể độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl hoặc C₁-C₃ alkoxy; và X₅ được chọn từ hydro, nhóm kéo dài L, -C(O)X₂, C₁-C₆ alkyl không được thế hoặc được thế một lần bằng (C₁-C₆)alkoxy hoặc phenyl, phenyl(C₁-C₁₂)alkyl được thế một lần bằng (C₁-C₆)alkoxy, và nhóm aryl không được thế, được thế một hoặc hai lần, trong đó mỗi phần tử thể aryl độc lập được chọn từ C₁-C₃ alkyl và C₁-C₃ alkoxy;

(v) nhóm aryl không được thế, được thế một, hai hoặc ba lần; 9-julolidinyl; hoặc nhóm dị vòng thơm không được thế, được thế một hoặc hai lần được chọn từ pyridyl, furanyl, benzofuran-2-yl, benzofuran-3-yl, thienyl, benzothien-2-yl, benzothien-3-yl, dibenzofuranyl, dibenzothienyl, carbazoyl, benzopyridyl, indolinyl, hoặc fluorenyl; trong đó mỗi phần tử thể mỗi lần xuất hiện độc lập được chọn từ,

(1) nhóm kéo dài L;

(2) -C(O)X₆;

(3) aryl, haloaryl, C₃-C₇ xycloalkylaryl, và nhóm aryl được thế một hoặc hai lần bằng C₁-C₁₂ alkyl hoặc C₁-C₁₂ alkoxy;

(4) C₁-C₆ alkyl, C₃-C₅ xycloalkyl, C₃-C₅ xycloalkyloxy(C₁-C₆)alkyl, aryl(C₁-C₆)alkyl, aryloxy(C₁-C₆)alkyl, mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkylaryl(C₁-C₆)alkyl, mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkoxyaryl(C₁-C₆)alkyl, haloalkyl, và mono(C₁-C₆)alkoxy(C₁-C₆)alkyl;

(5) C₁-C₆ alkoxy, C₃-C₅ xycloalkoxy, xycloalkyloxy(C₁-C₆)alkoxy, aryl(C₁-C₆)alkoxy, aryloxy(C₁-C₆)alkoxy, mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkylaryl(C₁-C₆)alkoxy, và mono- hoặc di- (C₁-C₆)alkoxyaryl(C₁-C₆)alkoxy;

(6) aminocarbonyl, aminocarbonyl(C₁-C₁₈)alkylen, amino, mono- hoặc di-alkylamino, diarylamino, piperazino, N-(C₁-C₁₈)alkylpiperazino, N-aryl piperazino, aziridino, indolino, piperidino, morpholino, thiomorpholino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pyrrolidyl, hydroxy, acryloxy, metacryloxy, và halogen;

(7) -OX₇ hoặc -N(X₇)₂, và

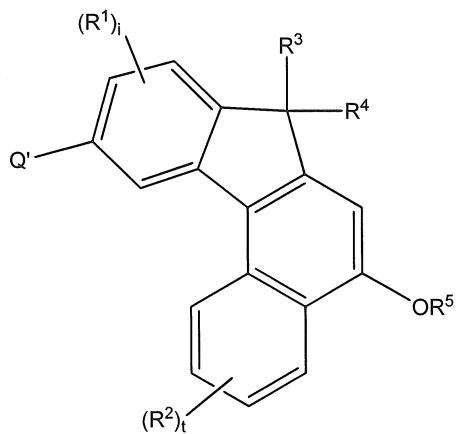
(8) nhóm không được thế hoặc được thế một lần được chọn từ pyrazolyl, imidazolyl, pyrazolinyl, imidazolinyl, pyrrolidinyl, phenothiazinyl, phenoxazinyl, phenazinyl, hoặc acridinyl, trong đó mỗi phần tử thế độc lập được chọn từ nhóm kéo dài L, C₁-C₃ alkyl, C₁-C₃ alkoxy, phenyl, hydroxy, amino hoặc halogen;

(D) mỗi nhóm R³ và R⁴ độc lập được chọn từ hydro, C₁-C₈ alkyl, C₁-C₈ haloalkyl, và C₃-C₇ xycloalkyl, hoặc R³ và R⁴ cùng nhau tạo thành phần tử thế spiro được chọn từ vòng spiro-carboxylic được thế hoặc không được thế chứa từ 3 đến 6 nguyên tử cacbon; và

(E) R⁵ được chọn từ hydro và -C(O)-R¹³.

5. Hợp chất vòng ngưng tụ indeno theo điểm 4, trong đó hợp chất vòng ngưng tụ indeno này được thể hiện bằng hợp chất có công thức Ia sau:

Ia



trong đó t được chọn từ 0 đến 4.

6. Hợp chất vòng ngưng tụ indeno theo điểm 5, trong đó Q' được chọn từ -CN, -C(O)OR^a, -C≡C-R^a, -C(R^a)=C(R^a)(R^a), -OC(O)R^a, -OC(O)OR^a, -SR^a, -OS(O₂)R^b và -C(O)NR^aR^a.

Fig.1

