

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 561 675**

51 Int. Cl.:

**G03C 1/73** (2006.01)

**C07D 311/94** (2006.01)

**C09K 9/02** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **26.10.2011 E 11784842 (4)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **30.12.2015 EP 2652551**

54 Título: **Compuestos fotocromicos, composiciones y artículos**

30 Prioridad:

**16.12.2010 US 459671 P**  
**05.10.2011 US 201113253188**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:  
**29.02.2016**

73 Titular/es:

**TRANSITIONS OPTICAL, INC. (100.0%)**  
**9251 Belcher Road**  
**Pinellas Park, FL 33782, US**

72 Inventor/es:

**CHOPRA, ANU**

74 Agente/Representante:

**VALLEJO LÓPEZ, Juan Pedro**

**ES 2 561 675 T3**

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

**DESCRIPCIÓN**

Compuestos fotocromicos, composiciones y articulos

**5 Campo de la invención**

La presente invención se refiere a compuestos de naftopirano, específicamente a la compuestos de naftopirano condensado con indeno, tales como compuestos fotocromicos de naftopirano condensado con indeno, que tienen grupos atradores de electrones en posiciones especificadas.

10

**Antecedentes de la invención**

Numerosos materiales fotocromicos convencionales, tales como, por ejemplo, naftopiranos fotocromicos, pueden experimentar una transformación desde una primera forma o estado a una segunda forma o estado en respuesta a la absorción de radiación electromagnética. Por ejemplo, numerosos materiales fotocromicos convencionales térmicamente reversibles son capaces de transformarse entre una primera forma de estado fundamental "transparente" o "decolorada" y una segunda forma de estado activado "coloreada" en respuesta a la absorción de ciertas longitudes de onda de radiación electromagnética (o "radiación actínica"). Como se usa en el presente documento con respecto a materiales, artículos y composiciones fotocromicos, los términos "transparente" y "decolorado" significan que el material, artículo, o composición fotocromico está básicamente sin color, es decir, no tiene básicamente ninguna absorción de radiación electromagnética dentro de la región visible del espectro electromagnético (420 nm - 700 nm). Como se usa en el presente documento, la expresión "radiación actínica" se refiere a una radiación electromagnética que es capaz de hacer que un material fotocromico se transforme de una primera forma o estado a una segunda forma o estado. El material fotocromico puede volver a continuación a la forma transparente de estado fundamental en respuesta a energía térmica en ausencia de la radiación actínica. Los artículos y composiciones fotocromicos que contienen uno o más materiales fotocromicos, por ejemplo, lentes fotocromicas para aplicaciones de gafas, presentan generalmente estados ópticamente transparentes y coloreados que corresponden al material o materiales fotocromicos que contienen. De ese modo, por ejemplo, las lentes de las gafas que contienen materiales fotocromicos se pueden transformar de un estado transparente a un estado coloreado tras la exposición a radiación actínica, tal como ciertas longitudes de onda que se encuentran en la luz solar, y pueden volver al estado transparente en ausencia de tal radiación después de la absorción de energía térmica.

25

Cuando se utilizan en artículos y composiciones fotocromicos, los materiales fotocromicos convencionales se incorporan por lo general a una matriz de polímero hospedadora mediante uno de embebido, mezcla, y/o unión. Alternativamente, el material fotocromico se puede embeber en un artículo o revestimiento preformado. Como se usa en el presente documento, la expresión "composición fotocromica" se refiere a un material fotocromico en combinación con uno o más materiales distintos, que puede ser o no ser un material fotocromico diferente.

35

Para numerosas aplicaciones fotocromicas, generalmente es deseable disponer de un material fotocromico que pueda volver rápidamente desde la forma coloreada de estado activado a la forma transparente de estado fundamental, mientras aún mantenga características aceptables tales como densidad de color. Por ejemplo, en aplicaciones de gafas fotocromicas, las lentes ópticas que comprenden los materiales fotocromicos se transforman desde un estado ópticamente transparente a un estado coloreado a medida que el portador se mueve desde una región de baja radiación actínica, tal como el interior, a una región de alta radiación actínica, tal como la luz solar directa. A medida que la lente se colorea, se transmite menos radiación electromagnética de las regiones visible y/o ultravioleta del espectro electromagnético a través de la lente hacia el ojo del portador. En otras palabras, la lente absorbe más radiación electromagnética en el estado coloreado que en el estado ópticamente transparente. Cuando el portador se mueve posteriormente desde la región de alta radiación actínica de vuelta a la región de baja radiación actínica, el material fotocromico de las gafas vuelve desde la forma coloreada de estado activado a la forma transparente de estado fundamental en respuesta a energía térmica. Si esta transformación desde coloreado a transparente dura varios minutos o más, la vista del portador puede ser inferior a la óptima durante este tiempo debido al efecto combinado de la menor luz ambiente y la transmisión reducida de luz visible a través de la lente coloreada.

45

50

Por lo tanto, para ciertas aplicaciones, puede ser ventajoso desarrollar materiales fotocromicos que puedan hacer una transición con mayor rapidez desde la forma coloreada a la forma transparente, en comparación con los materiales fotocromicos convencionales. Como se usa en el presente documento, la expresión "velocidad de desvanecimiento" es una medida de la velocidad a la que el material fotocromico se transforma desde el estado coloreado activado al estado transparente sin activar. La velocidad de desvanecimiento para un material fotocromico se puede medir, por ejemplo, por activación de un material fotocromico hasta la saturación en condiciones controladas en una matriz determinada, medida de su absorbancia de estado estacionario activado (es decir, densidad óptica saturada) y a continuación determinación del período de tiempo que tarda la absorbancia del material fotocromico en disminuir a la mitad del valor de absorbancia de estado estacionario activado. Cuando se mide de este modo, la velocidad de desvanecimiento se denomina  $T_{1/2}$ , con unidades en segundos.

60

Además, como se ha mencionado anteriormente, por lo general la transformación entre la forma de estado fundamental y la forma de estado activado requiere que el material fotocromico se exponga a ciertas longitudes de

65

onda de radiación actínica. Para numerosos materiales fotocromicos convencionales, las longitudes de onda de radiación actínica que pueden causar esta transformación varían por lo general de 320 nanómetros ("nm") a 390 nm. Por lo tanto, los materiales fotocromicos convencionales pueden no ser óptimos para su uso en aplicaciones que se protejan de una cantidad considerable de radiación actínica en el intervalo de 320 nm a 390 nm. Por tanto, para algunas aplicaciones, puede ser ventajoso desarrollar materiales fotocromicos que puedan tener un espectro de absorción de la forma de estado fundamental para radiación electromagnética que esté desplazada batocrómicamente. Como se usa el presente documento, la expresión "desplazado batocrómicamente" significa que tiene un espectro de absorción para la radiación electromagnética que está desplazado a valores de longitud de onda más larga. De ese modo, un material fotocromico que tiene un espectro de absorción de la forma de estado fundamental desplazado batocrómicamente requerirá la absorción de radiación actínica que tenga una longitud de onda más larga con el fin de realizar la transición desde la forma de estado fundamental a la forma de estado activado.

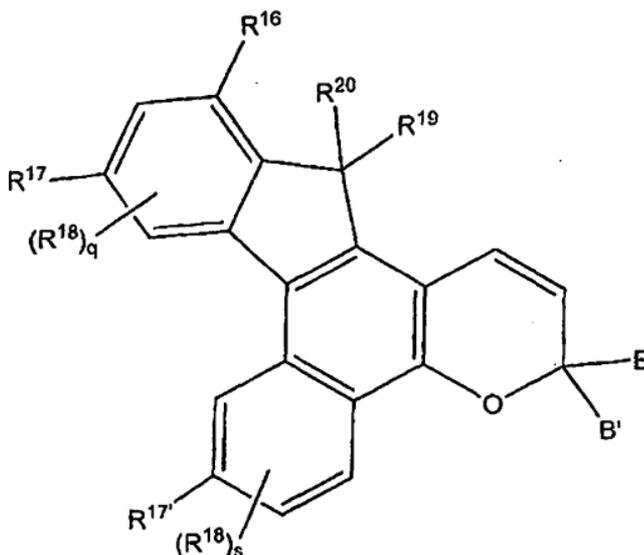
Por ejemplo, las lentes para aplicaciones de gafas que se fabrican usando materiales fotocromicos convencionales pueden no alcanzar su forma de estado activado completamente coloreada cuando se usan en un automóvil. Esto es debido a que el parabrisas del automóvil puede absorber una gran parte de la radiación electromagnética en el intervalo de 320 nm a 390 nm antes de que sea absorbida por el material o materiales fotocromicos de las lentes. En ciertas aplicaciones, tales como las que implican el uso de materiales fotocromicos detrás del parabrisas, puede ser ventajoso que el espectro de absorción de la forma de estado fundamental del material fotocromico se desplace batocrómicamente de modo que el material fotocromico pueda absorber suficiente radiación electromagnética que tenga una longitud de onda mayor de 390 nm para permitir que el material fotocromico se transforme desde la forma de estado fundamental a la forma de estado activado.

El espectro de absorción de un material fotocromico en la forma de estado activado corresponderá al color del medio o artículo que contiene el material fotocromico, por ejemplo, el color de la lente de las gafas, cuando se expone a radiación actínica. Cuando un material fotocromico en la forma de estado activado absorbe longitudes de onda específicas dentro de la región visible de radiación electromagnética, las longitudes de onda dentro de la región visible que se transmiten (es decir, no se absorben) corresponden al color del material fotocromico en la forma de estado activado. Por ejemplo, la absorción de longitudes de onda de luz de aproximadamente 500 nm a aproximadamente 520 nm en la región visible del espectro electromagnético da como resultado un material fotocromico que exhibe un color "rojizo", es decir, absorbe radiación visible de longitud de onda corta o del extremo azul del espectro visible y transmite radiación de longitud de onda más larga o del extremo rojo del espectro visible. Por el contrario, la absorción de longitudes de onda de luz de aproximadamente 580 nm a aproximadamente 610 nm en la región visible del espectro electromagnético da como resultado un material fotocromico que exhibe un color "más azul", es decir, absorbe radiación visible de longitud de onda más larga o del extremo rojo del espectro visible y transmite radiación de longitud de onda más corta o del extremo azul del espectro visible.

Numerosos compuestos fotocromicos actuales tienen espectros de absorción de estado activado que absorben luz visible hacia el extremo azul del espectro visible y exhiben un color rojizo en la forma activada. Si el material fotocromico tiene un espectro de absorción de estado activado que está desplazado batocrómicamente, es decir, desplazado para absorber luz que tiene una longitud de onda más larga, el material fotocromico exhibirá un color más azul que el material fotocromico actual. Para ciertas aplicaciones puede ser deseable disponer de un material fotocromico que tenga un espectro de absorción de la forma activada desplazado batocrómicamente para radiación actínica y que por lo tanto pueda exhibir un color más azul. El documento de Patente EP-A-1184379 desvela un compuesto similar al compuesto de la presente reivindicación 1, pero sin especificar las posiciones de los grupos atractores de electrones.

### Sumario de la invención

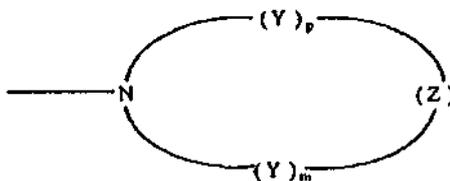
La presente invención se refiere a un compuesto, tal como un compuesto fotocromico, representado por la siguiente Fórmula I:



Fórmula I

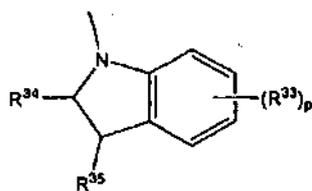
En la Fórmula I, R<sup>16</sup>, R<sup>17</sup> y R<sup>17'</sup> se seleccionan cada uno independientemente entre un grupo atractor de electrones que tiene un valor  $\sigma_p$  de Hammett de 0,05 a 0,85, con la condición de que uno de R<sup>16</sup> y R<sup>17</sup> es hidrógeno.

El sustituyente R<sup>18</sup> de la Fórmula I es independientemente en cada aparición: hidrógeno; halógeno; alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>; fenilo sustituido o sin sustituir; -OR<sup>29</sup> o -OC(=O)R<sup>29</sup>, en el que R<sup>29</sup> es hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, o cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, y los sustituyentes del fenilo son alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; un fenilo monosustituido, teniendo el fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en el que el sustituyente en la posición para es: un resto de ácido dicarboxílico, un resto de diamina, un resto de amino alcohol, un resto de poliol, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>i</sub>]<sub>k</sub>-, en el que t es el número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; -N(R<sup>30</sup>)R<sup>31</sup>, en el que R<sup>30</sup> y R<sup>31</sup> son cada uno independientemente hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo, naftilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benzotien-2-ilo, benzotien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, benzopiridilo, fluorenilo, alquilarilo C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>, bicicloalquilo C<sub>4</sub>-C<sub>20</sub>, tricicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>20</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, en el que dicho grupo arilo es fenilo o naftilo, o R<sup>30</sup> y R<sup>31</sup> se juntan con el átomo de nitrógeno para formar un anillo de hetero-bicicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub> o un anillo de hetero-tricicloalquilo C<sub>4</sub>-C<sub>20</sub>; un anillo que contiene nitrógeno representado por la siguiente fórmula gráfica IVA:

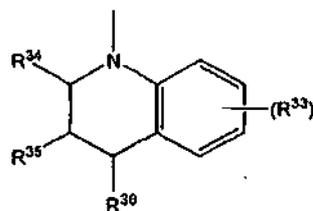


IVA

en la que cada -Y- se elige independientemente en cada aparición entre -CH<sub>2</sub>-, -CH(R<sup>32</sup>)-, -C(R<sup>32</sup>)<sub>2</sub>-, -CH(arilo)-, -C(arilo)<sub>2</sub>-, y -C(R<sup>32</sup>)(arilo)-, y Z es -Y-, -O-, -S-, -S(O)-, -SO<sub>2</sub>-, -NH-, -N(R<sup>32</sup>)- o -N(arilo)-, en el que cada R<sup>32</sup> es independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o hidroxialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cada arilo es independientemente fenilo o naftilo, m es un número entero 1, 2 o 3, y p es un número entero 0, 1, 2 o 3 y cuando p es 0, Z es -Y-; un grupo representado por una de las siguientes fórmulas gráficas IVB o IVC:



IVB

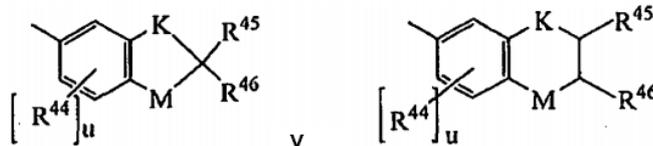


IVC

en las que R<sup>34</sup>, R<sup>35</sup>, y R<sup>36</sup> son cada uno independientemente hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo, o naftilo, o los grupos R<sup>34</sup> y R<sup>35</sup> juntos forman un anillo de 5 a 8 átomos de carbono y cada R<sup>33</sup> es independientemente en cada aparición alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o halógeno y p es un número entero 0, 1, 2 o 3; y amina espirobicíclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> sin sustituir, mono, o disustituida, o amina espirotríclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> sin sustituir, mono, y disustituida, en las que dichos sustituyentes son independientemente arilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; además, q es un número entero de 0 a 2; y s es un número entero de 0 a 3.

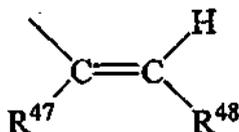
Los sustituyentes R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> son cada uno independientemente: hidrógeno; alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>; alilo; fenilo sustituido o sin sustituir; bencilo sustituido o sin sustituir; cloro; flúor; el grupo -C(=O)W, en el que W es hidrógeno, hidroxilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, los grupos arilo fenilo o naftilo sin sustituir, mono o disustituidos, fenoxi, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, amino, monoalquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, dialquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, fenilamino, fenilamino sustituido con mono o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o fenilamino sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; -OR<sup>37</sup>, en el que R<sup>37</sup> es alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, cloroalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fluoroalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alilo, o el grupo -CH(R<sup>38</sup>)Y<sup>m</sup>, en el que R<sup>38</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> e Y<sup>m</sup> es CN, CF<sub>3</sub>, o COOR<sup>39</sup>, en el que R<sup>39</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, o R<sup>37</sup> es el grupo, -C(=O)W', en el que W' es hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, los grupos arilo fenilo o naftilo sin sustituir, mono o disustituidos, fenoxi, fenoxi sustituido con mono, o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, amino, monoalquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, dialquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, fenilamino, fenilamino sustituido con mono o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o fenilamino sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, en los que cada uno de los sustituyentes de dicho grupo fenilo, o naftilo es independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; o un fenilo monosustituido, teniendo dicho fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en el que el sustituyente es: un resto de ácido dicarboxílico, un resto de diamina, un resto de amino alcohol, un resto de poliol, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>]<sub>k</sub>-, en el que t es un número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; o R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> juntos forman un grupo oxo, un grupo espiro-carbocíclico que contiene de 3 a 6 átomos de carbono, o un grupo espiro-heterocíclico que contiene de 1 a 2 átomos de oxígeno y de 3 a 6 átomos de carbono incluyendo el átomo de carbono espiránico, estando dichos grupos espiro-carbocíclico y espiro-heterocíclico condensados a 0, 1 o 2 anillos de benceno.

Los sustituyentes B y B' son cada uno independientemente: un grupo fenilo o arilo sin sustituir, mono, di, o trisustituido; 9-julolidinilo; o un grupo heteroaromático sin sustituir, mono o disustituido elegido entre piridilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benzotien-2-ilo, benzotien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, carbazoilo, benzopiridilo, indolinilo, y fluorenilo, en el que cada uno de los sustituyentes de fenilo, arilo y heteroaromático son cada uno independientemente: hidroxilo, un grupo -C(=O)R<sup>40</sup>, en el que R<sup>40</sup> es -OR<sup>41</sup>, -N(R<sup>42</sup>)R<sup>43</sup>, piperidino, o morfolino, en el que R<sup>41</sup> es alilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo, fenilo sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> o haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, dicho sustituyente halo es cloro, flúor, bromo o yodo, R<sup>42</sup> y R<sup>43</sup> son cada uno independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>, fenilo o fenilo sustituido, siendo los sustituyentes del fenilo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; un grupo sin sustituir o monosustituido elegido entre pirazolilo, imidazolilo, pirazolinilo, imidazolinilo, pirrolinilo, fenotiazinilo, fenoxazinilo, fenazinilo, y acridinilo, siendo cada uno de dichos sustituyentes alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo, o halógeno; un fenilo monosustituido, teniendo dicho fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en el que el sustituyente es: un resto de ácido dicarboxílico o derivado del mismo, un resto de diamina o derivado del mismo, un resto de amino alcohol o derivado del mismo, un resto de poliol o derivado del mismo, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>]<sub>k</sub>-, en el que t es un número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; un grupo representado por una de:



50

en las que K es -CH<sub>2</sub>- o -O-, y M es -O- o nitrógeno sustituido, con la condición de que cuando M es nitrógeno sustituido, K es -CH<sub>2</sub>-, siendo los sustituyentes del nitrógeno sustituido hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, o acilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, eligiéndose independientemente cada R<sup>44</sup> en cada aparición entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, hidroxilo, y halógeno, siendo independientemente cada R<sup>45</sup> y R<sup>46</sup> hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y u es un número entero que varía de 0 a 2; o un grupo representado por:



en el que R<sup>47</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y R<sup>48</sup> es un grupo sin sustituir, mono, o disustituido elegido entre naftilo, fenilo, furanilo, y tienilo, en el que los sustituyentes son alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, o halógeno. Además, B y B' tomados juntos pueden formar uno de un fluoren-9-ilideno, fluoren-9-ilideno mono, o disustituido, eligiéndose independientemente cada uno de dichos sustituyentes de fluoren-9-ilideno entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y halógeno.

La presente invención también se refiere a una composición fotocromática que comprende el compuesto descrito previamente y, opcionalmente, al menos un compuesto fotocromático distinto. La composición comprende:

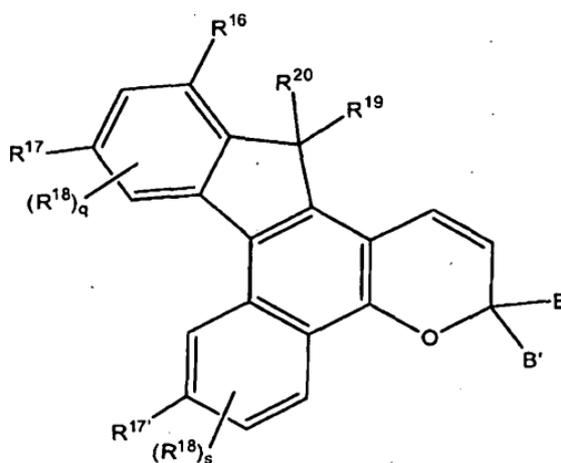
- (a) un compuesto fotocromático individual;
- (b) una mezcla de compuestos fotocromáticos;
- (c) un material que comprende al menos un compuesto fotocromático;
- (d) un material al que se une químicamente al menos un compuesto fotocromático;
- (e) el material (c) o (d) que comprende además un revestimiento para evitar básicamente el contacto del al menos un compuesto fotocromático con materiales externos;
- (f) un polímero fotocromático; o
- (g) mezclas de los mismos.

Además, la presente invención proporciona un artículo fotocromático que comprende un sustrato y el compuesto fotocromático descrito previamente conectado al menos a una parte de un sustrato.

### Descripción detallada de la invención

Como se usa en la presente memoria descriptiva y en las reivindicaciones anexas, los artículos "un", "uno", "una", "el" y "la" incluyen las referencias en plural a menos que se limite expresa e inequívocamente a una referencia.

Como se ha mencionado anteriormente, la presente invención se refiere a un compuesto, tal como un compuesto fotocromático, representado por la siguiente Fórmula I:

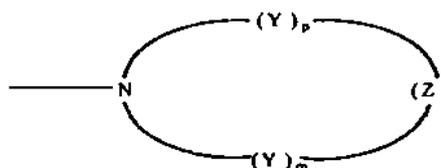


Fórmula I

En la Fórmula I, R<sup>16</sup>, R<sup>17</sup> y R<sup>17'</sup> se seleccionan cada uno independientemente entre un grupo atractor de electrones que tiene un valor  $\sigma_p$  de Hammett de 0,05 a 0,85, con la condición de que uno de R<sup>16</sup> y R<sup>17</sup> es hidrógeno. Sometido a la condición, en una realización particular de la presente invención, de que R<sup>16</sup>, R<sup>17</sup> y R<sup>17'</sup> se seleccionan cada uno independientemente entre flúor, cloro, bromo, haloalquilo, haloalcoxi, ciano, nitro, sulfonilo, sulfonato, -OC(=O)R<sup>0</sup>, o

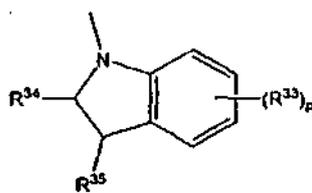
5 -C(=O)-X, en el que X es hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, -OR<sup>1</sup> o -NR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>, en los que R<sup>0</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> y R<sup>3</sup> son cada uno independientemente hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>, fenilo, fenilo monosustituido, fenilo disustituido, alquilenglicol, o polialquilenglicol, en el que dichos sustituyentes del fenilo mono y disustituido son alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>. Por lo general, (sometido a la condición indicada anteriormente) R<sup>16</sup>, R<sup>17</sup> y R<sup>17'</sup> se seleccionan cada uno independientemente entre, haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, cloro, flúor, ciano, nitro, -OC(=O)R<sup>0</sup> o -C(=O)-X, en el que X es -OR<sup>1</sup> en los que R<sup>0</sup> y R<sup>1</sup> son cada uno independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>. Más específicamente, R<sup>16</sup>, R<sup>17</sup> y R<sup>17'</sup> se pueden seleccionar cada uno independientemente entre CF<sub>3</sub>, CF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, cloro, flúor, ciano, nitro, acetilo, propionilo, metoxicarbonilo, y etoxicarbonilo. Además, cada uno de R<sup>16</sup> o R<sup>17</sup> puede ser hidrógeno.

10 El sustituyente R<sup>18</sup> de la Fórmula I es independientemente en cada aparición: hidrógeno; halógeno; alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>; fenilo sustituido o sin sustituir; -OR<sup>29</sup> o -OC(=O)R<sup>29</sup>, en los que R<sup>29</sup> es hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, o cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, y los sustituyentes del fenilo son alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; un fenilo monosustituido, teniendo del fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en el que el sustituyente en la posición para es: un resto de ácido dicarboxílico, un resto de diamina, un resto de amino alcohol, un resto de poliál, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>]<sub>k</sub>-, en el que t es el número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; -N(R<sup>30</sup>)R<sup>31</sup>, en el que R<sup>30</sup> y R<sup>31</sup> son cada uno independientemente hidrógeno, -alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>, fenilo, naftilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benzotien-2-ilo, benzotien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, benzopiridilo, fluorenilo, alquilarilo C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>, bicicloalquilo C<sub>4</sub>-C<sub>20</sub>, tricicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>20</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, en el que dicho grupo arilo es fenilo o naftilo, o R<sup>30</sup> y R<sup>31</sup> se juntan con el átomo de nitrógeno para formar un anillo de hetero-bicicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub> o un anillo de hetero-tricicloalquilo C<sub>4</sub>-C<sub>20</sub>; un anillo que contiene nitrógeno representado por la siguiente fórmula gráfica IVA:

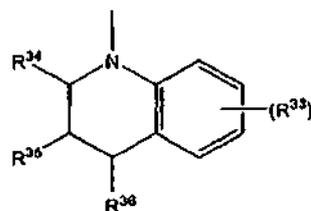


IVA

25 en la que cada -Y- se elige independientemente en cada aparición entre -CH<sub>2</sub>-, -CH(R<sup>32</sup>)-, -C(R<sup>32</sup>)<sub>2</sub>-, -CH(arilo)-, -C(arilo)<sub>2</sub>-, y -C(R<sup>32</sup>)(arilo)-, y Z es -Y-, -O-, -S-, -S(O)-, -SO<sub>2</sub>-, -NH-, -N(R<sup>32</sup>)- o -N(arilo)-, en los que cada R<sup>32</sup> es independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o hidroxialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cada arilo es independientemente fenilo o naftilo, m es un número entero 1, 2 o 3, y p es un número entero 0, 1, 2 o 3 y cuando p es 0, Z es -Y-; un grupo representado por una de las siguientes fórmulas gráficas IVB o IVC:



IVB



IVC

35 en las que R<sup>34</sup>, R<sup>35</sup>, y R<sup>36</sup> son cada uno independientemente hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo, o naftilo, o los grupos R<sup>34</sup> y R<sup>35</sup> juntos forman un anillo de 5 a 8 átomos de carbono y cada R<sup>33</sup> es independientemente en cada aparición alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o halógeno y p es un número entero 0, 1, 2 o 3; y amina espirobicíclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> sin sustituir, mono, o disustituida, o amina espirotríclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> sin sustituir, mono, y disustituida, en las que dichos sustituyentes son independientemente arilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>.

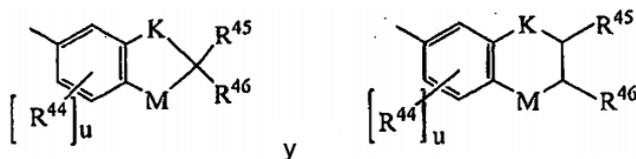
40 Además, en una realización particular con respecto al compuesto de Fórmula I, R<sup>18</sup> en cada aparición se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> sustituido, bromo, cloro, flúor, fenilo, fenilo sustituido, bencilo, bencilo sustituido, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, perhaloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, y amino. El sustituyente R<sup>18</sup> en cada aparición se puede seleccionar independientemente entre hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> sustituido, bromo, cloro, flúor, fenilo, bencilo, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, y amino. Por ejemplo, R<sup>18</sup> en cada aparición se puede seleccionar independientemente entre hidrógeno, metilo, etilo, bromo, cloro, flúor, metoxi, etoxi y CF<sub>3</sub>.

Con respecto a la Fórmula I, q es un número entero de 0 a 2; y s es un número entero de 0 a 3.

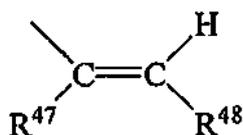
50

Los sustituyentes R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> son cada uno independientemente: hidrógeno; alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>; alilo; fenilo sustituido o sin sustituir; bencilo sustituido o sin sustituir; cloro; flúor; el grupo -C(=O)W, en el que W es hidrógeno, hidroxilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, los grupos arilo fenilo o naftilo sin sustituir, mono o disustituídos, fenoxi, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, amino, monoalquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, dialquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, fenilamino, fenilamino sustituido con mono o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o fenilamino sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; -OR<sup>37</sup>, en el que R<sup>37</sup> es alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, cloroalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fluoroalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alilo, o el grupo -CH(R<sup>38</sup>)Y<sup>m</sup>, en el que R<sup>38</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> e Y<sup>m</sup> es CN, CF<sub>3</sub>, o COOR<sup>39</sup>, en el que R<sup>39</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, o R<sup>37</sup> es el grupo, -C(=O)W', en el que W' es hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, los grupos arilo fenilo o naftilo sin sustituir, mono o disustituídos, fenoxi, fenoxi sustituido con mono, o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, amino, monoalquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, dialquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>amino, fenilamino, fenilamino sustituido con mono o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o fenilamino sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, en los que cada uno de dichos sustituyentes de dicho grupo fenilo, o naftilo son independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; o un fenilo monosustituido, teniendo dicho grupo fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en el que el sustituyente es: un resto de ácido dicarboxílico, un resto de diamina, un resto de amino alcohol, un resto de poliol, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>]<sub>k</sub>-, en el que t es un número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; o R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> forman juntos un grupo oxo, un grupo espiro-carbocíclico que contiene de 3 a 6 átomos de carbono, o un grupo espiro-heterocíclico que contiene de 1 a 2 átomos de oxígeno y de 3 a 6 átomos de carbono incluyendo el átomo de carbono espiránico, estando dichos grupos espiro-carbocíclico y espiro-heterocíclico condensados a 0, 1 o 2 anillos de benceno. Por lo general, R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> se seleccionan cada uno independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> sustituido, alqueno C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>, alqueno C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub> sustituido, alquino C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>, y alquino C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub> sustituido. Más específicamente, R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> se seleccionan cada uno independientemente entre metilo, etilo, propilo, butilo, pentilo y hexilo.

Los sustituyentes B y B' son cada uno independientemente: un grupo fenilo o arilo sin sustituir, mono, di, o trisustituido; 9-julolidinilo; o un grupo heteroaromático sin sustituir, mono o disustituido elegido entre piridilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benzotien-2-ilo, benzotien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, carbazoilo, benzopiridilo, indolinilo, y fluorenilo, en los que cada uno de los sustituyentes de fenilo, arilo y heteroaromático es cada uno independientemente: hidroxilo, un grupo -C(=O)R<sup>40</sup>, en el que R<sup>40</sup> es -OR<sup>41</sup>, -N(R<sup>42</sup>)R<sup>43</sup>, piperidino, o morfolino, en el que R<sup>41</sup> es alilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo, fenilo sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> o haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, dicho sustituyente halo es cloro, flúor, bromo o yodo, R<sup>42</sup> y R<sup>43</sup> son cada uno independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>, fenilo o fenilo sustituido, siendo los sustituyentes del fenilo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; un grupo sin sustituir o monosustituido elegido entre pirazolilo, imidazolilo, pirazolínilo, imidazolínilo, pirrolínilo, fenotiazínilo, fenoxazínilo, fenazínilo, y acridínilo, siendo cada uno de dichos sustituyentes alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo, o halógeno; un fenilo monosustituido, teniendo dicho fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en el que el sustituyente es: un resto de ácido dicarboxílico o derivado del mismo, un resto de diamina o derivado del mismo, un resto de amino alcohol o derivado del mismo, un resto de poliol o derivado del mismo, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>]<sub>k</sub>-, en el que t es un número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; un grupo representado por una de:



en las que K es -CH<sub>2</sub>- o -O-, y M es -O- o nitrógeno sustituido, con la condición de que cuando M es nitrógeno sustituido, K es -CH<sub>2</sub>-, siendo los sustituyentes del nitrógeno sustituido hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, o acilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, eligiéndose independientemente cada R<sup>44</sup> en cada aparición entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, hidroxilo, y halógeno, siendo cada R<sup>45</sup> y R<sup>46</sup> independientemente hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y u es un número entero que varía de 0 a 2; o un grupo representado por:



en el que R<sup>47</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y R<sup>48</sup> es un grupo sin sustituir, mono, o disustituido elegido entre naftilo, fenilo, furanilo, y tienilo, en el que los sustituyentes son alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, o halógeno. Además, B y B' tomados juntos pueden formar uno de un fluoren-9-ilideno, fluoren-9-ilideno mono, o disustituido, eligiéndose

independientemente cada uno de dichos sustituyentes de fluoren-9-ilideno entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y halógeno.

5 En una realización particular, B y B' se seleccionan cada uno independientemente entre fenilo y fenilo sustituido. Por ejemplo, B y B' se pueden seleccionar cada uno independientemente entre un fenilo sustituido con uno o más grupos seleccionados independientemente entre alcoxi, halógeno, amino, perhaloalcoxi, acilo, carboxi, y alcocixarbonilo. Más específicamente, B y B' se pueden seleccionar cada uno independientemente entre un fenilo sustituido con un grupo seleccionado entre, flúor, cloro, y CF<sub>3</sub>. Además, B y B' pueden ser cada uno independientemente 4-metoxifenilo.

10 Más específicamente, el compuesto de Fórmula I de la presente invención puede incluir, pero se limita a, un compuesto elegido entre:

15 3,3- bis-(4-metoxifenil)-7,12-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano;  
 3,3- bis-(4-metoxifenil)-7,10-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano;  
 3,3- difenil-7,12-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano; y  
 3,3- difenil-7,10-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano.

20 Como se usa en el presente documento, en la memoria descriptiva y en las reivindicaciones, la expresión "valor  $\sigma_p$  de Hammett" se refiere a una medida de la influencia electrónica, ya sea una influencia donadora de electrones o atractora de electrones, de un sustituyente unido a un carbono que participa en un sistema pi aromático que se transmite través del sistema de electrones pi polarizable, tal como, por ejemplo, un sistema de electrones pi aromático. El valor  $\sigma_p$  de Hammett es una medida relativa que compara la influencia electrónica del sustituyente en la posición para de un anillo de fenilo con la influencia electrónica de un hidrógeno sustituido en la posición para. Por lo general, para sustituyentes aromáticos en general, un valor  $\sigma_p$  de Hammett negativo es indicativo de un grupo o sustituyente que tiene una influencia donadora de electrones en un sistema de electrones pi (es decir, un grupo donador de electrones) y un valor  $\sigma_p$  de Hammett positivo es indicativo de un grupo o sustituyente que tiene una influencia atractora de electrones en un sistema de electrones pi (es decir, un grupo atractor de electrones).

30 Como se usa en el presente documento, la expresión "grupo donador de electrones" se puede definir como un grupo que dona densidad electrónica a un sistema pi, tal como, por ejemplo, a la estructura del núcleo de naftopirano condensado con indeno. Algunos ejemplos de un "grupo donador de electrones" pueden incluir un átomo unido directamente al sistema pi del material fotocromico, en el que el átomo tiene al menos un par de electrones no enlazante que es capaz de deslocalización en el sistema pi de la estructura del anillo aromático, y/o el grupo puede donar densidad electrónica al sistema pi mediante un efecto inductivo, tal como, por ejemplo, un sustituyente alquilo. Además, un "grupo donador de electrones", como se usa en el presente documento, se puede definir como un grupo que tiene un valor  $\sigma_p$  de Hammett negativo, cuando el grupo se une a un carbono que participa en un sistema pi aromático.

40 Algunos grupos atractores de electrones adecuados para su uso junto con diversas realizaciones no limitantes del compuesto de Fórmula I descrito en el presente documento pueden tener un valor  $\sigma_p$  de Hammett que varía de aproximadamente 0,05 a aproximadamente 0,85, tal como de 0,05 a 0,75. Algunos grupos atractores de electrones adecuados pueden comprender, por ejemplo y sin limitación: nitro ( $\sigma_p = 0,81$ ), halógeno, tal como flúor ( $\sigma_p = 0,06$ ), cloro ( $\sigma_p = 0,23$ ), y bromo ( $\sigma_p = 0,23$ ); perfluoroalquilo (por ejemplo, -CF<sub>3</sub>,  $\sigma_p = 0,54$ ) o perfluoroalcoxi (por ejemplo, -OCF<sub>3</sub>,  $\sigma_p = 0,35$ ), donde la parte perfluoroalquilo del perfluoroalquilo o el perfluoroalcoxi puede comprender, por ejemplo, trifluorometilo u otras partes perfluoroalquilo que tienen la fórmula C<sub>n</sub>F<sub>2n+1</sub>, donde 'n' es un número entero de 1 a 10; ciano ( $\sigma_p = 0,66$ ); -OC(=O)R<sup>0</sup> (por ejemplo, -OC(=O)CH<sub>3</sub>,  $\sigma_p = 0,31$ ); -SO<sub>2</sub>X (por ejemplo, -SO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>,  $\sigma_p = 0,68$ ); o -C(=O)-X, donde X es hidrógeno (-CHO,  $\sigma_p = 0,22$ ), alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> (por ejemplo, -C(=O)CH<sub>3</sub>,  $\sigma_p = 0,50$ ), -OR<sup>1</sup> ( $\sigma_p \approx 0,4$ ), o -NR<sup>2</sup>R<sup>3</sup> (por ejemplo, -C(=O)NH<sub>2</sub>,  $\sigma_p = 0,36$ ), en los que cada uno de R<sup>0</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, y R<sup>3</sup> puede ser cada uno independientemente hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>, fenilo, fenilo monosustituido, fenilo disustituido, alquilenglicol, o polialquilenglicol, en el que los sustituyentes del fenilo pueden ser alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>. Algunos sustituyentes atractores de electrones adecuados adicionales que tienen valores  $\sigma_p$  de Hammett en el intervalo de aproximadamente 0,05 a aproximadamente 0,85 se exponen en "Section 9 Physicochemical Relationships" en Lange's Handbook of Chemistry, 15<sup>a</sup> ed. J.A. Dean, editor, McGraw Hill, 1999, pp 9,1-9,8. Los expertos en la materia entenderán que el subíndice "p", cuando se usa con respecto al valor  $\sigma$  de Hammett, se refiere al valor  $\sigma_p$  de Hammett que se mire cuando el grupo se localiza en la posición para de un anillo de fenilo de un sistema modelo, tal como un sistema modelo de ácido benzoico sustituido en para.

60 Como se ha mencionado previamente, el compuesto de la presente invención representado por la Fórmula I descrito con detalle anteriormente puede comprender un material fotocromico. Tal material fotocromico se puede usar en aquellas aplicaciones en las que se pueden emplear materiales fotocromicos, tales como, elementos ópticos, por ejemplo, un elemento oftálmico, un elemento de visualización, una ventana, un espejo, un elemento de celda de cristal líquido activo, o un elemento de celda de cristal líquido pasivo. Como se usa en el presente documento, el término "óptico" significa correspondiente o asociado al ojo y la vista. Como se usa en el presente documento, el término "visualización" significa la representación visible o legible por una máquina de información en palabras, números, símbolos, diseños o figuras. Algunos ejemplos no limitantes de elementos de visualización incluyen pantallas, monitores, y elementos de seguridad, tales como marcas de seguridad. Como se usa el presente documento, el

término "ventana" significa una abertura adaptada para permitir la transmisión de radiación a través de la misma. Algunos ejemplos no limitantes de ventanas incluyen parabrisas de aviones y automóviles, transparencias de automóviles y aviones, por ejemplo, techos en el T, luces laterales y posteriores, filtros, obturadores, y conmutadores ópticos. Como se usa el presente documento, el término "espejo" significa una superficie que refleja especularmente una gran refracción de la luz incidente. Como se usa el presente documento, la expresión "celda de cristal líquido" se refiere a una estructura que contiene un material de cristal líquido que es capaz de ordenarse. Un ejemplo no limitante de un elemento de celda de cristal líquido es un dispositivo de visualización de cristal líquido.

Los materiales fotocromáticos que comprenden el compuesto de Fórmula I de la presente invención se pueden usar en un elemento oftálmico, tal como, lentes correctoras, incluyendo lentes de visión individual o visión múltiple, que pueden ser lentes de visión múltiple segmentadas o no segmentadas (tales como, pero no limitadas a, lentes bifocales, lentes trifocales y lentes progresivas), lentes no correctoras, una lente de aumento, una lente protectora, una visera, gafas, y una lente para un instrumento óptico, tal como una lente de cámara o telescopio. En otras realizaciones no limitantes, los materiales fotocromáticos de la presente divulgación se pueden usar en películas y láminas de plástico, textiles, y revestimientos.

Además, se contempla que los materiales fotocromáticos que se desvelan en el presente documento se puedan usar cada uno solos, en combinación con otros materiales fotocromáticos, o en combinación con un material fotocromático convencional complementario apropiado (es decir, en composiciones fotocromáticas). Por ejemplo, los materiales fotocromáticos se pueden usar junto con materiales fotocromáticos convencionales que tienen la absorción máxima activada dentro del intervalo de aproximadamente 400 a aproximadamente 800 nanómetros. Además, los materiales fotocromáticos se pueden usar junto con un material fotocromático convencional complementario polimerizable o compatibilizado, tal como, por ejemplo, los que se desvelan en los documentos de Patente de Estados Unidos con números 6.113.814 (de la col. 2, línea 39 a la col. 8, línea 41), y 6.555.028 (de la col. 2, línea 65 a la col. 12, línea 56).

Como se ha discutido anteriormente, las composiciones fotocromáticas pueden contener una mezcla de materiales fotocromáticos. Por ejemplo, aunque no limitante en el presente documento, se pueden usar mezclas de materiales fotocromáticos para conseguir ciertos colores activados tales como un color gris casi neutro o un color pardo casi neutro. Véase, por ejemplo, el documento de Patente de Estados Unidos nº 5.645.767, de la col. 12, línea 66 a la col. 13, línea 19, que describe los parámetros que definen los colores gris y pardo neutros.

De ese modo, la presente invención proporciona una composición fotocromática que comprende un material orgánico, siendo dicho material orgánico al menos uno de un material polimérico, un material oligomérico y un material monomérico, y un material fotocromático de acuerdo con cualquiera de las realizaciones no limitantes expuestas anteriormente incorporado al menos a una parte del material orgánico. El material fotocromático se puede incorporar a una parte del material orgánico mediante al menos uno de mezcla y unión del material fotocromático con el material orgánico o un precursor del mismo. Como se usa el presente documento por referencia a la incorporación de materiales fotocromáticos a un material orgánico, los términos "mezcla" y "mezclado" significan que el material fotocromático se mezcla o entremezcla con al menos una parte del material orgánico, pero no se une al material orgánico. Además, como se usa en el presente documento por referencia a la incorporación de materiales fotocromáticos a un material orgánico, los términos "unión" o "unido" significan que el material fotocromático se une a una parte del material orgánico o un precursor del mismo.

Como se ha discutido anteriormente, las composiciones fotocromáticas que se desvelan en el presente documento pueden comprender un material orgánico elegido entre un material polimérico, un material oligomérico y/o un material monomérico. Algunos ejemplos de materiales poliméricos que se pueden usar pueden incluir, sin limitación: polímeros de monómeros de bis(carbonato de alilo); monómeros de dimetacrilato de dietilenglicol; monómeros de diisopropenil benceno; monómeros de dimetacrilato de bisfenol A etoxilado; monómeros de bis-metacrilato de etilenglicol; monómeros de bismetacrilato de poli(etilenglicol); monómeros de bismetacrilato de fenol etoxilado; monómeros de acrilato de alcohol polihídrico alcoxilado, tales como triacrilato de trimetilol propano etoxilado; monómeros de acrilato de uretano; monómeros de vinilbenceno; y estireno. Otros ejemplos no limitantes de materiales poliméricos adecuados incluyen polímeros de monómeros de acrilato y/o metacrilato polifuncionales, por ejemplo, mono, di o multifuncionales; poli(metacrilatos de alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), tales como poli(metacrilato de metilo); dimetacrilato de poli(oxialquileño); poli(metacrilatos de fenol alcoxilados); acetato de celulosa; triacetato de celulosa; acetato propionato de celulosa; acetato butirato de celulosa; poli(acetato de vinilo); poli(alcohol vinílico); poli(cloruro de vinilo); poli(cloruro de vinilideno); poliuretanos; poliuretanos; policarbonatos termoplásticos; poliésteres; poli(tereftalato de etileno); poliestireno; poli(α-metilestireno); copolímeros de estireno y metacrilato de metilo; copolímeros de estireno y acrilonitrilo; polivinilbutiral; y polímeros de dialilidipentaeritritol, particularmente copolímeros con monómeros de poliol (carbonato de alilo), por ejemplo, dietilenglicol bis(carbonato de alilo), y monómeros de acrilato, por ejemplo, acrilato de etilo, acrilato de butilo. También se contemplan copolímeros de los monómeros mencionados anteriormente, combinaciones, y mezclas de los polímeros y copolímeros mencionadas anteriormente con otros polímeros, por ejemplo, para formar productos de red interpretada.

Además, cuando se desea la transparencia de la composición fotocromática, el material orgánico puede ser un material polimérico transparente. Por ejemplo, el material polimérico puede ser un material polimérico ópticamente transparente preparado a partir de una resina de policarbonato termoplástica, tal como la resina derivada de bisfenol A y fosgeno,

que se comercializa con el nombre comercial LEXAN®; un poliéster, tal como el material comercializado con el nombre comercial, MYLAR®; un poli(metacrilato de metilo), tal como el material comercializado con el nombre comercial, PLEXIGLAS®; y polimerizados de un monómero de poliol(carbonato de alilo), especialmente dietilenglicol bis(carbonato de alilo), monómero que se comercializa con el nombre comercial CR-39®; y polímeros de poliurea-poliuretano (poliurea uretano), que se preparan, por ejemplo, por reacción de un oligómero de poliuretano y un agente de curado de diamina, comercializándose una composición para un polímero tal con el nombre comercial TRIVEX® de PPG Industries, Inc. Otros ejemplos no limitantes de materiales poliméricos adecuados incluyen polimerizados de copolímeros de un poliol (alilo carbonato), por ejemplo, dietilenglicol bis(carbonato de alilo), con otros materiales poliméricos copolimerizables, tales como, pero sin limitarse a: copolímeros con acetato de vinilo, copolímeros con un poliuretano que tiene una funcionalidad diacrilato terminal, y copolímeros con uretanos alifáticos, cuya parte terminal contiene grupos funcionales alilo o acrililo. Otros materiales poliméricos adecuados más incluyen, sin limitación, poli(acetato de vinilo), polivinilbutiral, poliuretano, poliuretanos, polímeros elegidos entre monómeros de dimetacrilato de dietilenglicol, monómeros de diisopropenil benceno, monómeros de dimetacrilato de bisfenol A etoxilado, monómeros de bismetacrilato de etilenglicol, monómeros de bismetacrilato de polietilenglicol, monómeros de bismetacrilato de fenol etoxilado y monómeros de triacrilato de trimetilol propano etoxilado, acetato de celulosa, propionato de celulosa, butirato de celulosa, acetato butirato de celulosa, poliestireno y copolímeros de estireno con metacrilato de metilo, acetato de vinilo y acrilonitrilo. El material polimérico puede incluir resinas ópticas comercializadas por PPG Industries, Inc. bajo la denominación CR®, tales como, por ejemplo, CR-307, CR-407, y CR-607.

Además, el material orgánico puede ser un material polimérico elegido entre poli(carbonato), copolímeros de etileno y acetato de vinilo; copolímeros de etileno y alcohol vinílico; copolímeros de etileno, acetato de vinilo, y alcohol vinílico (tales como los que resultan de la saponificación parcial de copolímeros de etileno y acetato de vinilo); acetato butirato de celulosa; poli(uretano); poli(acrilato); poli(metacrilato); epoxis; polímeros funcionales de aminoplast; poli(anhídrido); poli(urea uretano); polímeros funcionales de N-alcoximetil(met)acrilamida; poli(siloxano); poli(silano); y combinaciones y mezclas de los mismos.

Además de lo expuesto anteriormente, la presente invención proporciona un artículo fotocromático que comprende un sustrato (tal como cualquiera de los materiales de sustrato óptico descritos anteriormente), y un material fotocromático de acuerdo con cualquiera de las realizaciones no limitantes discutidas anteriormente conectado o incorporado a una parte de sustrato. Como se usa en el presente documento, la expresión "conectado a" significa asociado, directa o indirectamente, a través de otro material o estructura. El artículo fotocromático de la presente invención puede ser un elemento óptico, por ejemplo, pero no limitado a, un elemento oftálmico, un elemento de visualización, una ventana, un espejo, un elemento de celda de cristal líquido activo, y un elemento de celda de cristal líquido pasivo. El artículo fotocromático puede ser un elemento oftálmico, por ejemplo, pero no limitado a, lentes correctoras, incluyendo lentes de visión individual o de visión múltiple, que pueden ser lentes de visión múltiple segmentadas o no segmentadas (tales como, pero no limitadas a, lentes bifocales, lentes trifocales y lentes progresivas), lentes no correctoras, una lente de aumento, una lente protectora, una visera, gafas, y una lente para un instrumento óptico.

Cuando el sustrato del artículo fotocromático comprende un material polimérico, el material fotocromático puede estar conectado al menos a una parte de sustrato por incorporación del material fotocromático al menos a una parte del material polimérico de sustrato, o al menos a una parte del material oligomérico o monomérico a partir de que se forma el sustrato. Por ejemplo, el material fotocromático se puede incorporar al material polimérico de sustrato mediante el método de moldeado *in situ*. Además o alternativamente, el material fotocromático se puede incorporar al menos a una parte del material polimérico del sustrato mediante embebido y el método de moldeado *in situ*, como se discute posteriormente.

Además, el material fotocromático se puede conectar al menos a una parte del sustrato del artículo fotocromático como parte de un revestimiento al menos parcial que se conecta al menos a una parte de un sustrato. En tal caso, el sustrato puede ser un sustrato polimérico o un sustrato inorgánico (tal como, pero no limitado a, un sustrato de vidrio). Además, el material fotocromático, que incluye el compuesto de Fórmula I de la presente invención) se puede incorporar al menos a una parte de la composición de revestimiento antes de la aplicación de la composición de revestimiento al sustrato o, alternativamente, se puede aplicar una composición de revestimiento al sustrato, fijarse al menos parcialmente y, después de esto, se puede embeber el material fotocromático en al menos una parte del revestimiento. Como se usa en el presente documento, los términos "fijar" y "fijación" incluyen, sin limitación, curado, polimerización, reticulación, enfriamiento, y secado.

Por ejemplo, el artículo fotocromático puede comprender un revestimiento al menos parcial de un material polimérico conectado al menos a una parte de una superficie del mismo. De acuerdo con esta realización no limitante, el material fotocromático se puede mezclar y/o unir al menos a una parte del material polimérico del revestimiento al menos parcial.

El revestimiento al menos parcial que comprende un material fotocromático se puede conectar directamente al sustrato, por ejemplo, mediante aplicación directa de una composición de revestimiento que comprende un material fotocromático al menos a una parte de una superficie del sustrato, y fijación al menos parcial de la composición de revestimiento. Además o alternativamente, el revestimiento al menos parcial que comprende un material fotocromático se puede conectar al sustrato, por ejemplo, a través de uno o más revestimientos adicionales. Por ejemplo, aunque no limitante

5 en el presente documento, se puede aplicar una composición de revestimiento adicional al menos a una parte de la superficie del sustrato, fijar al menos parcialmente, y a continuación se puede aplicar la composición de revestimiento que comprende un material fotocromico sobre el revestimiento adicional y fijar al menos parcialmente. Algunos métodos no limitantes de aplicación de composiciones de revestimiento a sustratos se discuten posteriormente en el presente documento.

10 Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos y películas adicionales que se pueden usar junto con los artículos fotocromicos que se desvelan en el presente documento incluyen revestimientos de imprimación o compatibilización; revestimientos protectores, incluyendo revestimientos de transición, revestimientos resistentes a la abrasión y otros revestimientos que protegen frente a los efectos de las reacciones químicas de polimerización y/o protegen frente al deterioro debido a las condiciones ambientales tales como humedad, calor, luz ultravioleta, oxígeno (por ejemplo, revestimientos de protección UV y revestimientos de barrera de oxígeno); revestimientos antirreflectores; revestimiento fotocromico convencional; y revestimientos polarizantes y películas extendidas polarizantes; y las combinaciones de los mismos.

15 Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos de imprimación o compatibilización que se pueden usar junto con diversas realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento incluyen revestimientos que comprenden agentes de acoplamiento, hidrolizados al menos parciales de agentes de acoplamiento, y mezclas de los mismos. Como se usa en el presente documento, "agente de acoplamiento" significa un material que tiene un grupo capaz de reaccionar, unirse y/o asociarse a un grupo sobre una superficie. Algunos agentes de acoplamiento de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento pueden incluir compuestos organometálicos tales como silanos, titanatos, circonatos, aluminatos, aluminatos de circonio, hidrolizados de los mismos y mezclas de los mismos. Como se usa en el presente documento, la expresión "hidrolizados al menos parciales de agentes de acoplamiento" significa que de algunos a la totalidad de los grupos del agente de acoplamiento están hidrolizados. Otros ejemplos no limitantes de revestimientos de imprimación que son adecuados para su uso junto con las diversas realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento incluyen los revestimientos de imprimación que se describen en el documento de Patente de Estados Unidos nº 6.025.026 de la col. 3, línea 3 a la col. 11, línea 40 y el documento de Patente de Estados Unidos nº 6.150.430 de la col. 2, línea 39 a la col. 7, línea 58.

20 Como se usa en el presente documento, la expresión "revestimiento de transición" significa un revestimiento que ayuda a crear un gradiente en las propiedades entre dos revestimientos. Por ejemplo, aunque no limitante en el presente documento, un revestimiento de transición puede ayudar a crear un gradiente en la dureza entre un revestimiento relativamente duro (tal como un revestimiento resistente a la abrasión) y un revestimiento relativamente blando (tal como un revestimiento fotocromico). Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos de transición incluyen películas delgadas basadas en acrilato curadas por radiación que se describen en el documento de Publicación de Solicitud de Patente de Estados Unidos 2003/0165686 en los párrafos [0079]-[0173].

25 Como se usa en el presente documento, la expresión "revestimiento resistente a la abrasión" se refiere a un material polimérico protector que demuestra una resistencia a la abrasión que es mayor que un material de referencia estándar, por ejemplo, un polímero hecho de monómero CR-39<sup>®</sup> disponible en PPG Industries, Inc, que se somete a ensayo en un método comparable al Método de Ensayo de la Norma ASTM F-735 para Resistencia a la Abrasión en Plásticos y Revestimientos Transparentes Usando el Método de Arena Oscilante. Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos resistentes a la abrasión incluyen revestimientos resistentes a la abrasión que comprenden organosilanos, organosiloxanos, revestimientos resistentes a la abrasión basados en materiales orgánicos tales como sílice, dióxido de titanio y/o dióxido de circonio, y revestimientos resistentes a la abrasión orgánicos del tipo que se pueden curar con luz ultravioleta.

30 Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos antirreflectores incluyen una monocapa, revestimientos de múltiples capas de óxidos metálicos, fluoruros metálicos, u otros materiales tales, que se pueden depositar sobre los artículos que se desvelan en el presente documento (o sobre películas de autosoporte que se aplican a los artículos), por ejemplo, a través de deposición al vacío, pulverización iónica, etc.

35 Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos fotocromicos convencionales incluyen, pero no se limitan a, revestimientos que comprenden materiales fotocromicos convencionales.

40 Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos polarizantes y películas extendidas polarizantes incluyen, pero no se limitan a, revestimientos (tales como los que se desvelan en el documento de Publicación de Solicitud de Patente de Estados Unidos nº 2005/0151926), y películas extendidas que comprenden compuestos dicroicos que se conocen en la técnica.

45 Como se discute en el presente documento, se puede formar un revestimiento o película al menos parcial adicional sobre el sustrato antes de la formación del revestimiento que comprende el material fotocromico sobre el sustrato. Por ejemplo, se puede formar un revestimiento de imprimación o compatibilización sobre el sustrato antes de aplicar la composición de revestimiento que comprende el material fotocromico. Además o alternativamente, se puede formar un revestimiento al menos parcial adicional sobre el sustrato después de formar el revestimiento que comprende el

material fotocromico sobre el sustrato, por ejemplo, como un revestimiento superior sobre el revestimiento fotocromico. Por ejemplo, se puede formar un revestimiento de transición sobre el revestimiento que comprende el material fotocromico, y se puede formar un revestimiento resistente a la abrasión sobre el revestimiento de transición.

5 Por ejemplo, se proporciona un artículo fotocromico que comprende un sustrato (tal como, pero no limitado a, un sustrato de lente oftálmica planocóncava o planoconvexa), que comprende un revestimiento resistente a la abrasión sobre al menos una parte de una superficie del mismo; un revestimiento de imprimación o compatibilización sobre al menos una parte del revestimiento resistente a la abrasión; un revestimiento fotocromico que comprende un material fotocromico de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento sobre al menos una parte del revestimiento de imprimación o compatibilización; un revestimiento de transición sobre al menos una parte del revestimiento fotocromico; y un revestimiento resistente a la abrasión sobre al menos una parte del revestimiento de transición. Además, el artículo fotocromico también puede comprender, por ejemplo, un revestimiento antirreflector que se conecta a una superficie de sustrato y/o un revestimiento o película polarizante que se conecta a una superficie del sustrato.

15 No se discutirán los métodos no limitantes de preparación de composiciones fotocromicas y artículos fotocromicos, tales como elementos ópticos. Una realización no limitante proporciona un método de preparación de una composición fotocromica, comprendiendo el método incorporar un material fotocromico al menos a una parte de un material orgánico. Algunos métodos no limitantes de incorporación de materiales fotocromicos a un material orgánico incluyen, por ejemplo, mezcla del material fotocromico en una solución o fundido de un material polimérico, oligomérico, o monomérico, y posteriormente fijación al menos parcial del material polimérico, oligomérico, o monomérico (con o sin unión del material fotocromico al material orgánico); y embebido del material fotocromico en el material orgánico (con o sin unión del material fotocromico al material orgánico).

25 Otra realización no limitante proporciona un método de preparación de un artículo fotocromico que comprende conectar un material fotocromico de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes discutidas anteriormente, al menos a una parte de un sustrato. Por ejemplo, si el sustrato comprende un material polimérico, el material fotocromico se puede conectar al menos a una parte del sustrato mediante al menos uno del método de moldeado *in situ* y/o mediante embebido. Por ejemplo, en el método de moldeado *in situ*, el material fotocromico se puede mezclar con una solución o fundido polimérico, u otra solución o mezcla oligomérica y/o monomérica, que se funde posteriormente en un molde que tiene una forma deseada y se fija al menos parcialmente para formar el sustrato. Opcionalmente, el material fotocromico se puede unir a una parte del material polimérico de sustrato, por ejemplo, mediante copolimerización con un precursor monomérico del mismo. En el método de embebido, el material fotocromico se puede difundir en el material polimérico del sustrato después de que se forme, por ejemplo, por inmersión de un sustrato en una solución que contiene el material fotocromico, con o sin calentamiento. A continuación, aunque no se requiere, el material fotocromico se puede unir con el material polimérico.

30 Otras realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento proporcionan un método de preparación de un elemento óptico que comprende conectar un material fotocromico al menos a una parte de un sustrato mediante al menos uno de fundido en molde, revestimiento y laminación. Por ejemplo, de acuerdo con una realización no limitante, en la que el sustrato comprende un material polimérico, el material polimérico se puede conectar al menos a una parte de un sustrato mediante fundido en molde. De acuerdo con esta realización no limitante, una composición de revestimiento que comprende el material fotocromico, que puede ser una composición de revestimiento líquida o una composición de revestimiento en polvo, se aplica a la superficie de un molde y se fija al menos parcialmente. Después de esto, se funde una solución o fundido de polímero, o una solución o mezcla oligomérica o monomérica, sobre el revestimiento y se fija al menos parcialmente. Después de la fijación, el sustrato revestido se retira del molde. Algunos ejemplos no limitantes de revestimientos en polvo en los que se pueden emplear los materiales fotocromicos de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento se exponen en el documento de Patente de Estados Unidos nº 6.068.797 de la col. 7, línea 50 a la col. 19, línea 42.

40 Además, cuando el sustrato comprende un material polimérico o un material inorgánico tal como vidrio, el material fotocromico se puede conectar al menos a una parte de un sustrato por revestimiento. Algunos ejemplos no limitantes de métodos de revestimiento adecuados incluyen revestimiento por rotación, revestimiento por pulverización (por ejemplo, usando un revestimiento líquido o en polvo), revestimiento por cortina, revestimiento mediante rodillos, revestimiento mediante rotación y pulverización, sobremoldeado, y las combinaciones de los mismos. Por ejemplo, el material fotocromico se puede conectar al sustrato mediante sobremoldeado. De acuerdo con esta realización no limitante, una composición de revestimiento que comprende el material fotocromico (que puede ser una composición de revestimiento líquida o una composición de revestimiento en polvo como se ha discutido previamente) se puede aplicar a un molde y a continuación se puede colocar el sustrato del molde de modo que el sustrato contacte con el revestimiento haciendo que se extienda sobre al menos una parte de la superficie del sustrato. Después de esto, la composición de revestimiento se puede fijar al menos parcialmente y el sustrato revestido se puede retirar del molde. Alternativamente, el sobremoldeado se puede realizar colocando el sustrato en un molde de modo que se defina una región abierta entre el sustrato y en molde, y a continuación inyectando una composición de revestimiento que comprende el material fotocromico en la región abierta. Después de esto, la composición de revestimiento se puede fijar al menos parcialmente y el sustrato revestido se puede retirar del molde.

Además o alternativamente, se puede aplicar una composición de revestimiento (con o sin un material fotocromico) a un sustrato (por ejemplo, mediante cualquiera de los métodos anteriores), la composición de revestimiento se puede fijar al menos parcialmente y, a continuación, se puede embeber un material fotocromico (como se ha discutido previamente) en la composición de revestimiento.

5 Además, cuando el sustrato comprende un material polimérico o un material inorgánico tal como vidrio, el material fotocromico se puede conectar al menos a una parte del sustrato por laminación. De acuerdo con esta realización no limitante, una película que comprende el material fotocromico se puede adherir o conectar de otro modo a una parte del sustrato, con o sin un adhesivo y/o la aplicación de calor y presión. Después de esto, si se desea, se puede aplicar un segundo sustrato sobre el primer sustrato y los dos sustratos se pueden laminar conjuntamente (es decir, mediante la aplicación de calor y presión) para formar un elemento en el que la película que comprende el material fotocromico se interpone entre los dos sustratos. Algunos métodos de formación de películas que comprenden un material fotocromico pueden incluir, por ejemplo y sin limitación, combinar un material fotocromico con una solución polimérica o una solución o mezcla oligomérica, fundir o extruir una película a partir del mismo y, si fuera necesario, fijar al menos parcialmente la película. Además o alternativamente, se puede formar una película (con o sin un material fotocromico) y embeber en el material fotocromico (como se ha discutido anteriormente).

Además, la presente invención contempla el uso de diversas combinaciones de los métodos anteriores para formar artículos fotocromicos. Por ejemplo, y sin limitación en el presente documento, se puede conectar un material fotocromico a un sustrato por incorporación a un material orgánico a partir del que se forma el sustrato (por ejemplo, usando el método de moldeado *in situ* y/o embebido) y, a continuación, se puede conectar un material fotocromico (que puede ser igual o diferente del material fotocromico mencionado anteriormente) a una parte del sustrato usando los métodos de fundido en molde, revestimiento y/o laminación discutidos anteriormente.

Además, los expertos en la materia entenderán que las composiciones y artículos fotocromicos que se desvelan en el presente documento pueden comprender además otros aditivos que ayuden en el procesamiento y/o rendimiento de la composición o artículo. Algunos ejemplos no limitantes de tales aditivos incluyen fotoiniciadores, iniciadores térmicos, inhibidores de polimerización, disolventes, estabilizadores de luz (tales como, pero no limitados a, absorbentes de luz ultravioleta y estabilizadores de luz, tales como estabilizadores de luz de amina impedida (HALS)), estabilizadores térmicos, agentes de liberación de molde, agentes de control de la reología, agentes de nivelado (tales como, pero no limitados a, tensioactivos), secuestradores de radicales libres, promotores de adhesión (tales como diacrilato de hexanodiol y agentes de acoplamiento), y las combinaciones y las mezclas de los mismos.

De acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, los materiales fotocromicos descritos en el presente documento se pueden usar en cantidades (o proporciones) de modo que el material orgánico o sustrato al que se incorporan o conectan de otro modo los materiales fotocromicos exhiba propiedades ópticas deseadas. Por ejemplo, la cantidad y los tipos de materiales fotocromicos se pueden seleccionar de modo que el material orgánico o el sustrato pueda ser transparente o incoloro cuando el material fotocromico esté en la forma cerrada (es decir, en el estado de colorado o desactivado) y pueda exhibir un color resultante deseado cuando el material fotocromico esté en la forma abierta (es decir, cuando se activa por radiación actínica). La cantidad precisa del material fotocromico que se va a utilizar en las diversas composiciones y artículos fotocromicos descritos en el presente documento no es crítica con la condición de que se use una cantidad suficiente para producir el efecto deseado. Se debería entender que la cantidad particular del material fotocromico usado puede depender de diversos factores, tales como, pero sin limitarse a, las características de absorción del material fotocromico, el color y la intensidad de color deseados después de la activación, y el método usado para incorporar o conectar el material fotocromico al sustrato. Aunque no limitante en el presente documento, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento, la cantidad del material fotocromico que se incorpora a un material orgánico puede variar de un 0,01 a un 40 por ciento en peso basado en el peso del material orgánico.

A continuación se ilustran diversas realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento en los siguientes ejemplos no limitantes.

### Ejemplos

La Parte 1 describe la preparación de los Ejemplos 1-4 y los Ejemplos Comparativos (CE) 1-2. La Parte 2 describe el ensayo de las propiedades fotocromicas de los Ejemplos y los Ejemplos Comparativos.

Parte 1 - Preparación de los Ejemplos 1-4 y los Ejemplos Comparativos 1-2

#### EJEMPLO 1

##### Etapa 1

Se pesó t-butoxido potásico (26,4 gramos) en un matraz de reacción de 2 litros equipado con un agitador mecánico, colocado en una atmósfera de nitrógeno y se añadieron 1200 mililitros (ml) de tolueno seguido de 3,3'-bistrifluorometil-benzofenona (50 gramos). La mezcla de reacción se agitó mecánicamente y se calentó a 50 °C.

Se añadió succinato de dimetilo (28,7 gramos) a la mezcla de reacción durante un período de 30 minutos. La mezcla de reacción se volvió viscosa y se añadieron 100 ml de tolueno para diluir la mezcla de reacción. La mezcla de reacción se calentó a 70 °C durante 4 horas. Después de enfriar a temperatura ambiente, la mezcla de reacción se vertió en 1000 ml de agua y se descartó la fase de tolueno. La fase acuosa se extrajo con dietil éter (2 x 700 ml) para retirar los productos neutros, y a continuación la fase acuosa se acidificó con ácido clorhídrico concentrado. Se obtuvo un líquido aceitoso de color amarillo a partir de la fase acuosa, y se extrajo con 2 x 600 ml de cloruro de metileno. Las fases orgánicas se combinaron, se lavaron con solución saturada de NaCl (1 x 700 ml) y se secaron sobre sulfato sódico anhidro. La retirada del disolvente por evaporación rotatoria produjo 65 gramos de una mezcla de los ácidos (E y Z) 4,4-(bis (3-trifluorometilfenil))-3-metoxicarbonil-3-butenoico en forma de un aceite de color amarillo pardusco. Este material no se purificó más y se usó directamente en la siguiente etapa.

#### Etapa 2

Se añadieron el producto de la Etapa 1 (mezcla de los isómeros E y Z del ácido 4,4-(bis (3-trifluorometilfenil))-3-metoxicarbonil-3-butenoico, 65 gramos) y acético anhídrido (250 ml) a un matraz de reacción. La mezcla de reacción se calentó a reflujo durante 6 horas en una atmósfera de nitrógeno. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente y posteriormente el exceso de acético anhídrido se retiró por evaporación rotatoria para producir 68,6 gramos de 1-(3-trifluorometilfenil)-2-metoxicarbonil-4-acetoxi-7-trifluorometil naftaleno. El producto se usó sin purificación adicional en la siguiente reacción.

#### Etapa 3

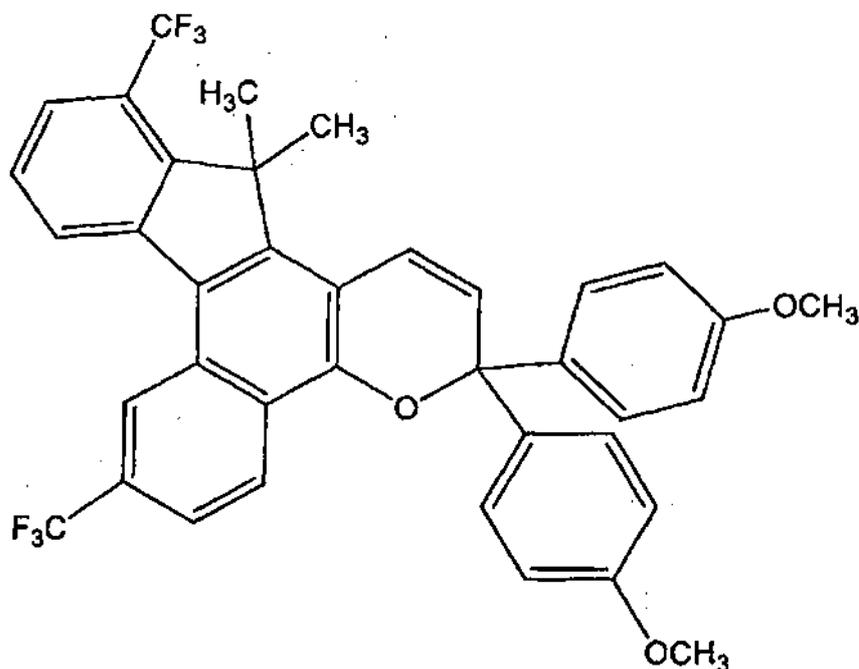
Se combinaron el producto de la Etapa 2 (1-(3-trifluorometilfenil)-2-metoxicarbonil-4-acetoxi-7-trifluorometil naftaleno, 68,6 gramos) y 400 ml de metanol en un matraz de reacción. Se añadieron 12 ml de ácido clorhídrico concentrado al matraz de reacción, y se calentó a reflujo durante una noche en una atmósfera de nitrógeno. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente y a continuación a 0 °C. Se obtuvieron cristales de color blanco del producto deseado (1-(3-trifluorometilfenil)-2-metoxicarbonil-4-hidroxi-7-trifluorometil naftaleno), y posteriormente se retiraron por filtración y secaron al vacío para obtener 31,17 gramos de producto. Este material no se purificó adicionalmente, sino que se usó directamente en la siguiente etapa.

#### Etapa 4

Se añadió el producto de la Etapa 3 (1-(3-trifluorometilfenil)-2-metoxicarbonil-4-hidroxi-7-trifluorometil naftaleno, 31 gramos) a un matraz de reacción que contenía 250 ml de tetrahydrofurano. La mezcla resultante se agitó a temperatura ambiente en una atmósfera de nitrógeno. Se añadió gota a gota una solución de cloruro de metil magnesio (98,8 ml de una solución 3 M en tetrahydrofurano) durante treinta minutos. La mezcla de reacción de color amarillo resultante se calentó a la temperatura de reflujo durante 4 horas. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente, se vertió en 500 ml de solución saturada de NaCl, y a continuación se neutralizó con ácido clorhídrico concentrado hasta acidez. La mezcla se extrajo con dos porciones de 300 ml de éter, y las porciones orgánicas se combinaron y se lavaron con 700 ml de solución saturada de NaCl. La fase orgánica se secó sobre sulfato sódico anhidro y se concentró por evaporación rotatoria. El aceite de color pardo resultante (31 gramos) se transfirió a un recipiente de reacción (equipado con un purgador Dean-Stark) que contenía 200 ml de xileno al que se añadieron 1,5 gramos de ácido para-tolueno sulfónico. La mezcla de reacción se calentó a reflujo durante 4 horas y se enfrió. El xileno se retiró mediante evaporación rotatoria para obtener un aceite de color pardusco. El análisis por TLC indicó 2 productos. El aceite de color pardusco se purificó por cromatografía en columna ultrarrápida sobre una columna de gel de sílice usando una mezcla de hexano, cloruro de metileno y acetato de etilo (70/25/5) como eluyente. La mancha superior (menos polar) fue 2,8-bistrifluorometil-7,7-dimetil-5-hidroxi-7H-benzo[C]fluoreno (obtenidos 14,4 gramos después de combinar las fracciones) mientras que la segunda mancha (más polar) fue 2,10-bistrifluorometil-7,7-dimetil-5-hidroxi-7H-benzo[C]fluoreno (obtenidos 6,6 gramos después de combinar las acciones).

#### Etapa 5

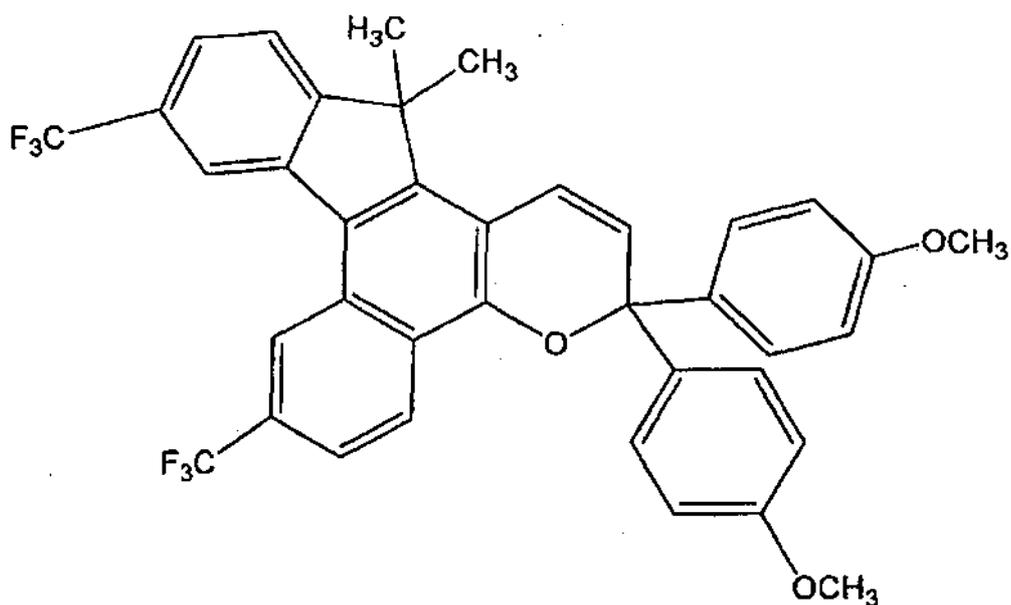
Se combinaron el producto menos polar de la Etapa 4 (2,8-bistrifluorometil-7,7-dimetil-5-hidroxi-7H-benzo[C]fluoreno, 2,73 gramos), 1,1-bis-(4-metoxifenil)-2-propin-1-ol (2,34 gramos), 12 gotas de ácido metano sulfónico y 250 ml de cloruro de metileno en un matraz de reacción y se agitaron durante una noche en una atmósfera de nitrógeno. La mezcla de reacción se lavó cuidadosamente con una mezcla de 250 ml de una solución saturada de bicarbonato sódico y 250 ml de agua. La fase orgánica se separó, se secó sobre sulfato sódico, y se concentró por evaporación rotatoria para obtener un sólido de color pardo. Este sólido de color pardo se purificó por cromatografía en columna ultrarrápida sobre una columna de gel de sílice usando una mezcla de hexano y cloruro de metileno (70/30) como eluyente para producir 2,0 gramos de un sólido de color blanquecino. El espectro de RMN mostró que el producto tenía una estructura consistente con 3,3-bis-(4-metoxifenil)-7,12-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano como se representa mediante la siguiente fórmula gráfica.



## EJEMPLO 2

### 5 Etapa 1

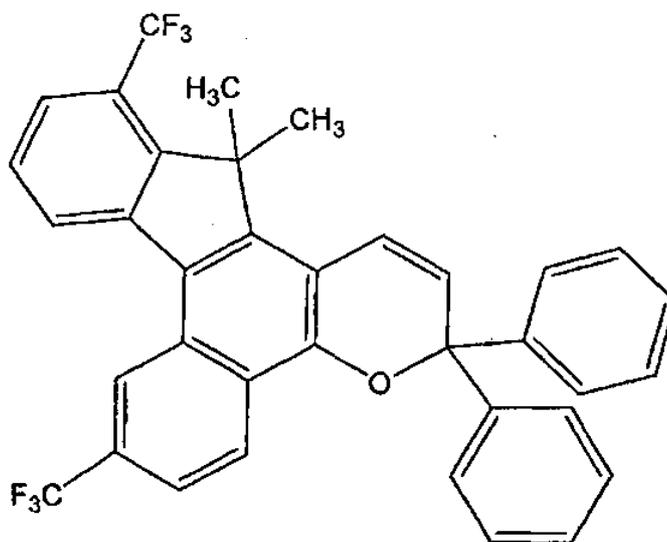
Se combinaron el producto más polar del Ejemplo 1, Etapa 4 (2,10-bis(trifluorometil-7,7-dimetil-5-hidroxi-7H-benzo[C]fluoreno, 2,6 gramos), 1,1-bis-(4-metoxifenil)-2-propin-1-ol (2,26 gramos), 14 gotas de ácido metano sulfónico y 250 ml de cloruro de metileno en un matraz de reacción y se agitaron durante una noche en una atmósfera de nitrógeno. La mezcla de reacción se lavó cuidadosamente con una mezcla de 250 ml de una solución saturada de bicarbonato sódico y 250 ml de agua. La fase orgánica se separó, se secó sobre sulfato sódico, y se concentró por evaporación rotatoria para obtener un sólido de color pardo. Este sólido de color pardo se purificó por cromatografía en columna ultrarrápida sobre una columna de gel de sílice usando una mezcla de hexano y acetato de etilo (80/20) como eluyente para producir 1,5 gramos de un sólido de color blanquecino. El espectro de RMN mostró que el producto tenía una estructura consistente con 3,3-bis-(4-metoxifenil)-7,10-bis(trifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano como se representa mediante la siguiente fórmula gráfica.



EJEMPLO 3Etapa 1

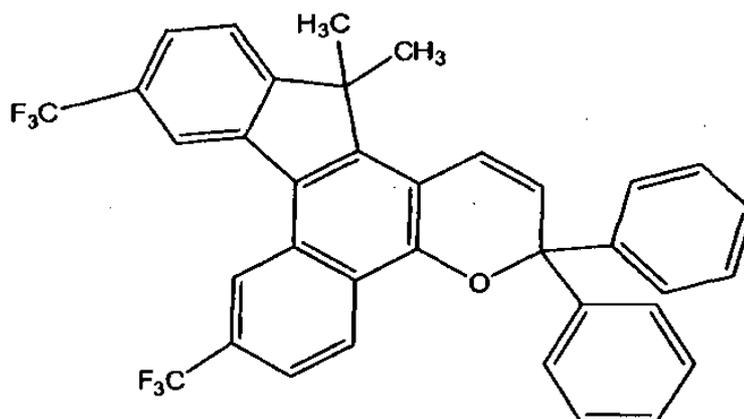
5 Se combinaron el producto menos polar del Ejemplo 1, Etapa 4 (2,8-bistrifluorometil-7,7-dimetil-5-hidroxi-7H-benzo[C]fluoreno, 4,07 gramos), 1,1-difenil-2-propin-1-ol (2,14 gramos), 10 gotas de ácido trifluoroacético, 5 gotas de ácido metano sulfónico y 200 ml de cloruro de metileno en un matraz de reacción y se agitaron durante 4 horas en una atmósfera de nitrógeno. La mezcla de reacción se lavó cuidadosamente con una mezcla de 100 ml de una solución saturada de bicarbonato sódico y 100 ml de agua. La fase orgánica se separó, se secó sobre sulfato sódico, y se concentró por evaporación rotatoria para obtener un sólido de color pardo. Este sólido de color pardo se purificó por cristalización en dietil éter para producir 4,3 gramos de un sólido de color blanco. El espectro de RMN mostró que el producto tenía una estructura consistente con 3,3-difenil-7,12-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano como se representa mediante la siguiente fórmula gráfica.

15

EJEMPLO 4Etapa 1

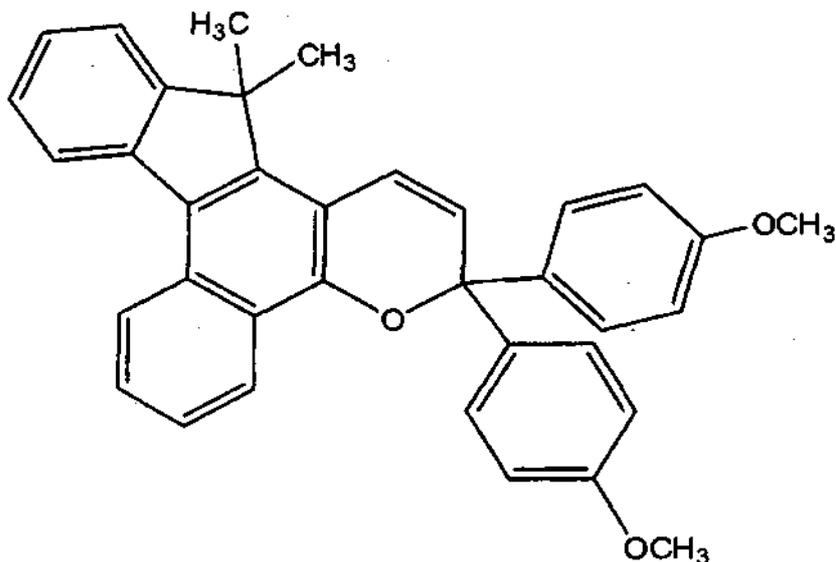
20 Se combinaron el producto más polar del Ejemplo 1, Etapa 4 (2,10-bistrifluorometil-7,7-dimetil-5-hidroxi-7H-benzo[C]fluoreno, 1,95 gramos), 1,1-difenil-2-propin-1-ol (1,02 gramos), 10 gotas de ácido trifluoroacético, 4 gotas de ácido metano sulfónico y 1250 ml de cloruro de metileno en un matraz de reacción y se agitaron durante 2 horas en una atmósfera de nitrógeno. La mezcla de reacción se lavó cuidadosamente con una mezcla de 100 ml de una solución saturada de bicarbonato sódico y 100 ml de agua. La fase orgánica se separó, se secó sobre sulfato sódico, y se concentró por evaporación rotatoria para obtener un sólido de color pardo. Este sólido de color pardo se purificó por cristalización en una mezcla 1:1 de dietil éter y hexano para producir 2,1 gramos de un sólido de color blanco. El espectro de RMN mostró que el producto tenía una estructura consistente con 3,3-difenil-7,10-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano como se representa mediante la siguiente fórmula gráfica.

30



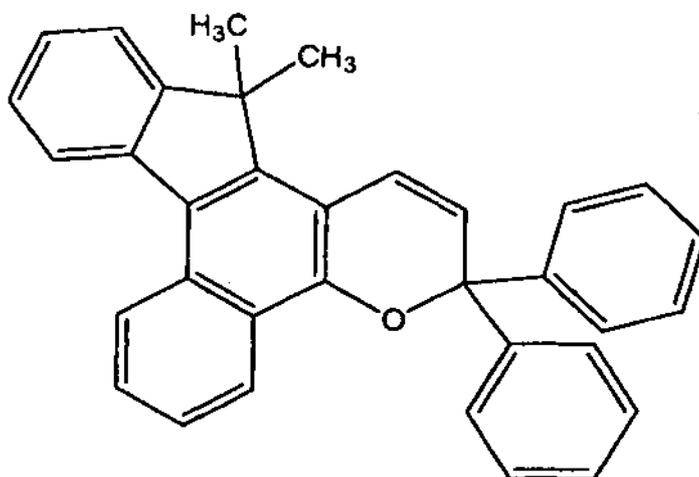
## Ejemplo Comparativo 1 (CE-1)

Se preparó CE-1 siguiendo la divulgación del documento de Patente de Estados Unidos nº 5.645.767, y se informa que es 3,3-bis-(4-metoxifenil)-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano como se representa mediante la siguiente fórmula gráfica.



## Ejemplo Comparativo 2 (CE-2)

Se preparó CE-2 siguiendo la divulgación del documento de Patente de Estados Unidos nº 5.645.767, y se informa que es 3,3-difenil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano como se representa mediante la siguiente fórmula gráfica.



## Parte 2 - Ensayo de Propiedad Fotocrómica

## Parte 2A - Preparación del Cuadrado de Ensayo

El ensayo se llevó a cabo con los compuestos que se describen en los Ejemplos 1-4, y CE 1-2 de la siguiente manera. Se añadió una cantidad de compuesto calculada para proporcionar una solución  $1,5 \times 10^{-3}$  molal a un matraz que contenía 50 g de una mezcla de monómero de 4 partes de dimetacrilato de bisfenol A etoxilado (BPA 2EO DMA), 1 parte de dimetacrilato de poli(etilenglicol) 600, y un 0,033 por ciento en peso de 2,2'-azobis(2-metil propionitrilo) (AIBN). Cada compuesto se disolvió en la mezcla de monómero con agitación y calentamiento moderado, si fuera necesario. Después de obtener una solución transparente, la muestra se desgasificó en un horno de vacío durante 5-10 minutos a 25 torr. Usando una jeringa, la muestra se vertió en un molde de lámina plana que tenía una dimensión interna de 2,2 mm +/- 0,3 mm x 6 pulgadas (15,24 cm) x 6 pulgadas (15,24 cm). El molde se cerró herméticamente y se colocó en un horno programable con flujo de aire horizontal para aumentar la temperatura de 40 °C a 95 °C durante un intervalo de 5 horas, la temperatura se mantuvo al 95 °C durante 3 horas, se redujo a 60 °C durante un intervalo de 2

horas y a continuación se mantuvo a 60 °C durante 16 horas. Después del curado, el molde se abrió, y la lámina de polímero se cortó en cuadrados de ensayo de 2 pulgadas (5,1 cm) usando una sierra de hoja de diamante.

#### Parte 2B - Ensayo de Respuesta

5 Antes del ensayo de respuesta en el banco óptico, los cuadrados del ensayo fotocromático de la Parte 2A se expusieron a luz ultravioleta a 365 nm durante aproximadamente 30 minutos a una distancia de aproximadamente 14 cm desde la fuente para hacer que el material fotocromático se transformara desde la forma de estado fundamental a una forma de estado activado, y a continuación se colocaron en un horno a 75 °C durante aproximadamente 20 minutos para permitir que el material fotocromático volviera de nuevo a la forma de estado fundamental. A continuación los cuadrados del ensayo se enfriaron a temperatura ambiente, se expusieron a iluminación de habitación fluorescente durante al menos 2 horas, y a continuación se mantuvieron cubiertos (es decir, en un entorno oscuro) durante al menos 2 horas antes del ensayo en un banco óptico mantenido a 23 °C (73 °F). El banco estaba equipado con una lámpara de arco de xenón de 300 vatios, un obturador con control a distancia, un filtro KG2 de Melles Griot que modifica las longitudes de onda de UV e IR y que actúa como un dissipador de calor, filtro(s) de densidad neutra y un portamuestras, situado dentro de un baño de agua, en el que se insertó el cuadrado a someter a ensayo. Se hizo pasar un haz de luz colimado desde una lámpara de tungsteno a través del cuadrado con un ángulo pequeño (aproximadamente 30°) perpendicular al cuadrado. Después de pasar a través del cuadrado, la luz de la lámpara de tungsteno se dirigió a una esfera de captación, en la que se mezcló la luz, y a un espectrómetro S2000 de Ocean Optics en el que se recogió el espectro del haz de medida y se analizó. La  $\lambda_{\text{máx-vis}}$  es la longitud de onda del espectro visible en la que se produce la absorción máxima de la forma en el estado activado del compuesto fotocromático en un cuadrado de ensayo. La longitud de onda  $\lambda_{\text{máx-vis}}$  se determinó mediante ensayo de los cuadrados de ensayo fotocromáticos en un espectrómetro Varian Cary 300 de UV-Visible; también se puede calcular a partir del espectro obtenido con el espectrómetro S2000 en el banco óptico.

25 Los resultados se enumeran en la Tabla I. El Ejemplo Comparativo 1 tiene una estructura similar y se debería comparar con los Ejemplos 1 y 2. El Ejemplo Comparativo 2 tiene una estructura similar y se debería comparar con los Ejemplos 3 y 4.

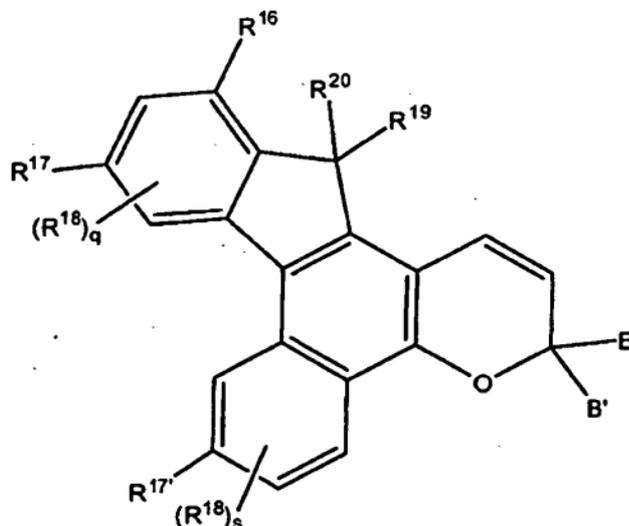
30

TABLA 1 - Resultados del ensayo de rendimiento fotocromático

Ejemplo nº	$\lambda_{\text{máx-vis}}$ (nm)	$\Delta\text{DO}$ en saturación	$T_{1/2}$ (s)
1	562	0,11	11
2	565	0,15	16
3	531	0,55	53
4	536	0,72	80
CE 1	561	0,78	129
CE 2	532	1,50	723

## REIVINDICACIONES

1. Un compuesto de Fórmula I



Fórmula I

5

en la que,

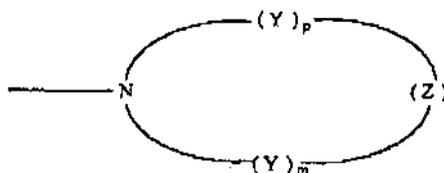
10

$R^{16}$ ,  $R^{17}$  y  $R^{17'}$  se seleccionan cada uno independientemente entre un grupo atractor de electrones que tiene un valor  $\sigma_p$  de Hammett de 0,05 a 0,85, con la condición de que uno de  $R^{16}$  y  $R^{17}$  sea hidrógeno.

15

$R^{18}$  es independientemente en cada aparición: hidrógeno; halógeno; alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>; fenilo sustituido o sin sustituir; -OR<sup>29</sup> o -OC(=O)R<sup>29</sup>, en donde R<sup>29</sup> es hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> o cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, y dichos sustituyentes del fenilo son alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; un fenilo monosustituido, teniendo dicho fenilo un sustituyente localizado en la posición para, siendo el sustituyente: un resto de ácido dicarboxílico, un resto de diamina, un resto de amino alcohol, un resto de poliol, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>k</sub>]-, en donde t es el número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromico; -N(R<sup>30</sup>)R<sup>31</sup>, en donde R<sup>30</sup> y R<sup>31</sup> son cada uno independientemente hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>, fenilo, naftilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benzotien-2-ilo, benzotien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, benzopiridilo, fluorenilo, alquilarilo C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>, bicicloalquilo C<sub>4</sub>-C<sub>20</sub>, tricicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>20</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, en donde dicho grupo arilo es fenilo o naftilo, o R<sup>30</sup> y R<sup>31</sup> se juntan con el átomo de nitrógeno para formar un anillo de hetero-bicicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub> o un anillo de hetero-tricicloalquilo C<sub>4</sub>-C<sub>20</sub>; un anillo que contiene nitrógeno representado por la siguiente fórmula gráfica IVA:

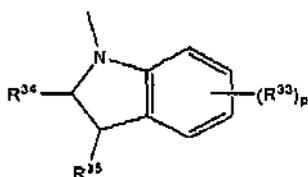
25



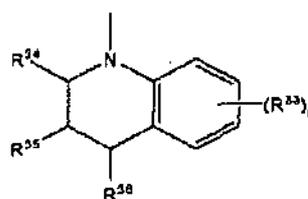
IVA

30

en la que cada -Y- se elige independientemente en cada aparición entre -CH<sub>2</sub>-, -CH(R<sup>32</sup>)-, -C(R<sup>32</sup>)<sub>2</sub>-, -CH(arilo)-, -C(arilo)<sub>2</sub>- y -C(R<sup>32</sup>)(arilo)-, y Z es Y-, -O-, -S-, -S(O)-, -SO<sub>2</sub>-, -NH-, -N(R<sup>32</sup>)- o -N(arilo)-, en donde cada R<sup>32</sup> es independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o hidroxialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cada arilo es independientemente fenilo o naftilo, m es un número entero 1, 2 o 3 y p es un número entero 0, 1, 2 o 3 y cuando p es 0, Z es -Y-; un grupo representado por una de las siguientes fórmulas gráficas IVB o IVC:



IVB



IVC

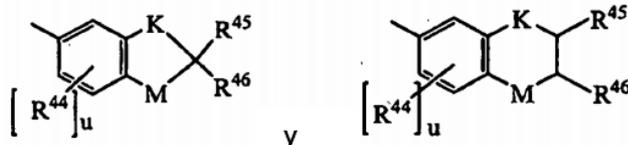
en las que R<sup>34</sup>, R<sup>35</sup> y R<sup>36</sup> son cada uno independientemente hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo o naftilo, o los grupos R<sup>34</sup> y R<sup>35</sup> juntos forman un anillo de 5 a 8 átomos de carbono y cada R<sup>33</sup> es independientemente en cada aparición alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o halógeno y p es un número entero 0, 1, 2 o 3; y amina espirocíclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> sin sustituir, mono o disustituída, o amina espirocíclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> sin sustituir, mono y disustituída, en donde dichos sustituyentes son independientemente arilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>;

q es un número entero de 0 a 2;

s es un número entero de 0 a 3;

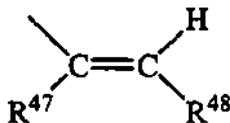
R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> son cada uno independientemente: hidrógeno; alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>; alilo; fenilo sustituido o sin sustituir; bencilo sustituido o sin sustituir; cloro; flúor; el grupo -C(=O)W, en donde W es hidrógeno, hidroxilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, los grupos arilo fenilo o naftilo sin sustituir, mono o disustituídos, fenoxi, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, amino, monoalquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> amino, dialquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> amino, fenilamino, fenilamino sustituido con mono o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o fenilamino sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; -OR<sup>37</sup>, en el que R<sup>37</sup> es alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, cloroalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fluoroalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alilo o el grupo -CH(R<sup>38</sup>)Y", en el que R<sup>38</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> e Y" es CN, CF<sub>3</sub> o COOR<sup>39</sup>, en el que R<sup>39</sup> es hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, o R<sup>37</sup> es el grupo -C(=O)W' en el que W' es hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, los grupos arilo fenilo o naftilo sin sustituir, mono o disustituídos, fenoxi, fenoxi sustituido con mono o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenoxi sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, amino, monoalquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> amino, dialquil C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> amino, fenilamino, fenilamino sustituido con mono o dialquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, o fenilamino sustituido con mono o dialcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, en donde cada uno de dichos sustituyentes del grupo fenilo o naftilo son independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; o un fenilo monosustituido, teniendo dicho fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en donde el sustituyente es: un resto de ácido dicarboxílico, un resto de diamina, un resto de amino alcohol, un resto de poliol, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>i</sub>]<sub>k</sub>-, en donde t es un número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; o R<sup>19</sup> y R<sup>20</sup> juntos forman un grupo oxo, un grupo espiro-carbocíclico que contiene de 3 a 6 átomos de carbono, o un grupo espiro-heterocíclico que contiene de 1 a 2 átomos de oxígeno y de 3 a 6 átomos de carbono incluyendo el átomo de carbono espiránico, estando dichos grupos espiro-carbocíclico y espiro-heterocíclico condensados a 0, 1 o 2 anillos de benceno; y

B y B' son cada uno independientemente: un grupo fenilo o arilo sin sustituir, mono, di o trisustituido; 9-julolidinilo; o un grupo heteroaromático sin sustituir, mono o disustituido elegido entre piridilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benztien-2-ilo, benztien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, carbazoilo, benzopiridilo, indolinilo y fluorenilo, en donde cada uno de los sustituyentes de fenilo, arilo y heteroaromático es cada uno independientemente: hidroxilo, un grupo -C(=O)R<sup>40</sup>, en el que R<sup>40</sup> es -OR<sup>41</sup>, -N(R<sup>42</sup>)R<sup>43</sup>, piperidino, o morfolino, en el que R<sup>41</sup> es alilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo, fenilo sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilo sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, fenilalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> sustituido con monoalcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> alquilo C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> o haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, dicho sustituyente halo es cloro, flúor, bromo o yodo, R<sup>42</sup> y R<sup>43</sup> son cada uno independientemente alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>, fenilo o fenilo sustituido, siendo los sustituyentes del fenilo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>; un grupo sin sustituir o monosustituido elegido entre pirazolilo, imidazolilo, pirazolinilo, imidazolinilo, pirrolinilo, fenotiazinilo, fenoxazinilo, fenazinilo y acridinilo, siendo cada uno de dichos sustituyentes alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo o halógeno; un fenilo monosustituido, teniendo dicho fenilo un sustituyente localizado en la posición para, en donde el sustituyente es: un resto de ácido dicarboxílico o derivado del mismo, un resto de diamina o derivado del mismo, un resto de amino alcohol o derivado del mismo, un resto de poliol o derivado del mismo, -CH<sub>2</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>t</sub>- o -[O-(CH<sub>2</sub>)<sub>i</sub>]<sub>k</sub>-, en donde t es un número entero 2, 3, 4, 5 o 6 y k es un número entero de 1 a 50, estando el sustituyente conectado a un grupo arilo de otro material fotocromático; un grupo representado por una de:



en las que K es -CH<sub>2</sub>- o -O-, y M es -O- o nitrógeno sustituido, con la condición de que cuando M es nitrógeno sustituido, K es -CH<sub>2</sub>-, siendo los sustituyentes del nitrógeno sustituido hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o acilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>,

eligiéndose independientemente cada  $R^{44}$  en cada aparición entre alquilo  $C_1-C_{12}$ , alcoxi  $C_1-C_{12}$ , hidroxilo y halógeno, siendo cada  $R^{45}$  y  $R^{46}$  independientemente hidrógeno o alquilo  $C_1-C_{12}$ , y  $u$  es un número entero que varía de 0 a 2; o un grupo representado por:



5

en donde  $R^{47}$  es hidrógeno o alquilo  $C_1-C_{12}$ , y  $R^{48}$  es un grupo sin sustituir, mono o disustituido elegido entre naftilo, fenilo, furanilo y tienilo, en donde los sustituyentes son alquilo  $C_1-C_{12}$ , alcoxi  $C_1-C_{12}$  o halógeno; o

10 B y B' tomados juntos forman uno de un fluoren-9-ilideno, fluoren-9-ilideno mono o disustituido, eligiéndose independientemente cada uno de dichos sustituyentes de fluoren-9-ilideno entre alquilo  $C_1-C_{12}$ , alcoxi  $C_1-C_{12}$  y halógeno.

2. El compuesto de la reivindicación 1, en el que

15 i)  $R^{16}$ ,  $R^{17}$  y  $R^{17'}$  se seleccionan cada uno independientemente entre flúor, cloro, bromo, haloalquilo, haloalcoxi, ciano, nitro, sulfonilo, sulfonato,  $-OC(=O)R^0$  o  $-C(=O)-X$ , en el que X es hidrógeno, alquilo  $C_1-C_6$ ,  $-OR^1$  o  $-NR^2R^3$ , en donde  $R^0$ ,  $R^1$ ,  $R^2$  y  $R^3$  son cada uno independientemente hidrógeno, alquilo  $C_1-C_6$ , cicloalquilo  $C_5-C_7$ , fenilo, fenilo monosustituido, fenilo disustituido, alquilenglicol o polialquilenglicol, en donde dichos sustituyentes del fenilo mono

20 ii)  $R^{16}$ ,  $R^{17}$  y  $R^{17'}$  se seleccionan cada uno independientemente entre haloalquilo  $C_1-C_4$ , cloro, flúor, ciano, nitro,  $-OC(=O)R^0$  o  $-C(=O)-X$ , en el que X es  $-OR^1$  en donde  $R^0$  y  $R^1$  son cada uno independientemente alquilo  $C_1-C_4$ ; o

iii)  $R^{16}$ ,  $R^{17}$  y  $R^{17'}$  se seleccionan cada uno independientemente entre  $CF_3$ ,  $CF_2CF_3$ , cloro, flúor, ciano, nitro, acetilo, propionilo, metoxicarbonilo y etoxicarbonilo; o

iv)  $R^{16}$  es hidrógeno; o

25 v)  $R^{17}$  es hidrógeno.

3. El compuesto de la reivindicación 1, en el que

30 (i)  $R^{19}$  y  $R^{20}$  se seleccionan cada uno independientemente entre alquilo  $C_1-C_6$ , alquilo  $C_1-C_6$  sustituido, alquenilo  $C_2-C_6$ , alquenilo  $C_2-C_6$  sustituido, alquinilo  $C_2-C_6$  y alquinilo  $C_2-C_6$  sustituido; o

(ii)  $R^{19}$  y  $R^{20}$  se seleccionan cada uno independientemente entre metilo, etilo, propilo, butilo, pentilo y hexilo.

4. El compuesto de la reivindicación 1, en el que

35 (i)  $R^{18}$  en cada aparición se selecciona independientemente entre alquilo  $C_1-C_6$ , alquilo  $C_1-C_6$  sustituido, bromo, cloro, flúor, fenilo, fenilo sustituido, bencilo, bencilo sustituido, alcoxi  $C_1-C_6$ , perhaloalquilo  $C_1-C_6$  y amino; o

(ii)  $R^{18}$  en cada aparición se selecciona independientemente entre hidrógeno, alquilo  $C_1-C_4$ , alquilo  $C_1-C_4$  sustituido, bromo, cloro, flúor, fenilo, bencilo, alcoxi  $C_1-C_4$ , haloalquilo  $C_1-C_4$  y amino; o

40 (iii) en donde  $R^{18}$  en cada aparición se selecciona independientemente entre hidrógeno, metilo, etilo, bromo, cloro, flúor, metoxi, etoxi y  $CF_3$ .

5. El compuesto de la reivindicación 11, en el que B y B' se seleccionan cada uno independientemente entre

45 (i) fenilo y fenilo sustituido; o

(ii) fenilo sustituido con uno o más grupos seleccionados independientemente entre alcoxi, halógeno, amino, perhaloalcoxi, acilo, carboxi y alcoxycarbonilo; o

(iii) entre fenilo sustituido con un grupo seleccionado entre alcoxi  $C_1-C_4$ , flúor, cloro y  $CF_3$ ; o

(iv) B y B' son 4-metoxifenilo.

50 6. El compuesto de la reivindicación 1 elegido entre:

3,3-bis-(4-metoxifenil)-7,12-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano;

3,3-bis-(4-metoxifenil)-7,10-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano;

3,3-difenil-7,12-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano; y

55 3,3-difenil-7,10-bistrifluorometil-13,13-dimetil-3H,13H-indeno[2,1-f]nafto[1,2-b]pirano.

7. El compuesto de la reivindicación 1, en el que dicho compuesto es un compuesto fotocromico.

8. Una composición fotocromica que comprende el compuesto de la reivindicación 7 y opcionalmente al menos un compuesto fotocromico distinto, en donde dicha composición comprende:

60

- (a) un compuesto fotocromico individual;  
 (b) una mezcla de compuestos fotocromicos;  
 (c) un material que comprende al menos un compuesto fotocromico;  
 (d) un material al que se une quimicamente al menos un compuesto fotocromico;  
 5 (e) material (c) o (d) que comprende además un revestimiento para evitar básicamente el contacto del al menos un compuesto fotocromico con materiales externos;  
 (f) un polímero fotocromico; o  
 (g) mezclas de los mismos.
- 10 9. Una composición fotocromica que comprende al menos un compuesto de la reivindicación 7 incorporado al menos a una parte de un material orgánico, siendo dicho material orgánico un material polimérico, un material oligomérico, un material monomérico o una mezcla o una combinación de los mismos y  
 opcionalmente al menos un aditivo elegido entre colorantes, antioxidantes, aditivos de mejora cinética, fotoiniciadores,  
 15 iniciadores térmicos, inhibidores de polimerización, disolventes, estabilizadores de luz, estabilizadores térmicos, agentes de liberación de molde, agentes de control de la reología, agentes de nivelado, secuestradores de radicales libres y promotores de adhesión.
- 20 10. La composición fotocromica de la reivindicación 9, en la que dicho material polimérico comprende policarbonato, poliamida, poliimida, poli(met)acrilato, alqueno policíclico, poliuretano, poli(urea)uretano, politiouretano, politio(urea)uretano, poliol(carbonato de alilo), acetato de celulosa, diacetato de celulosa, triacetato de celulosa, acetato propionato de celulosa, acetato butirato de celulosa, polialqueno, polialquileno-acetato de vinilo, poli(acetato de vinilo), poli(alcohol vinílico), poli(cloruro de vinilo), poli(vinilformal), poli(vinilacetal), poli(cloruro de vinilideno), poli(tereftalato de etileno), poliéster, polisulfona, poliolefina, copolímeros de los mismos y/o mezclas de los mismos.
- 25 11. Un artículo fotocromico que comprende un sustrato y un compuesto fotocromico de acuerdo con la reivindicación 7 conectado al menos a una parte de un sustrato.
- 30 12. El artículo fotocromico de la reivindicación 11 que comprende un elemento óptico, siendo dicho elemento óptico al menos uno de un elemento oftálmico, un elemento de visualización, una ventana, un espejo y material de envasado, en donde el elemento oftálmico comprende preferentemente lentes correctoras, lentes no correctoras, lentes de contacto, lentes intraoculares, lentes de aumento, lentes protectoras o visores.
- 35 13. El artículo fotocromico de la reivindicación 11 en el que el sustrato comprende un material polimérico y el material fotocromico se incorpora al menos a una parte del material polimérico, en donde el material fotocromico se mezcla preferentemente con al menos una parte del material polimérico, se une al menos a una parte del material polimérico, y/o se embebe en al menos una parte del material polimérico.
- 40 14. El artículo fotocromico de la reivindicación 11 en donde el artículo fotocromico comprende un revestimiento o una película conectados al menos a una parte del sustrato, comprendiendo dichos revestimiento o película el material fotocromico y opcionalmente al menos un revestimiento o una película al menos parciales adicionales elegidos entre revestimientos o películas fotocromicos, revestimientos o películas antirreflectores, revestimientos o películas linealmente polarizantes, revestimientos o películas de transición, revestimientos o películas de imprimación, revestimientos o películas adhesivos, revestimientos o películas reflectores, revestimientos o películas antivaho, revestimientos o películas de barrera de oxígeno, revestimientos o películas absorbentes de luz ultravioleta y  
 45 revestimientos o películas protectores.
15. El artículo fotocromico de la reivindicación 14 en el que dicho sustrato se forma a partir de materiales orgánicos, materiales inorgánicos o combinaciones de los mismos.