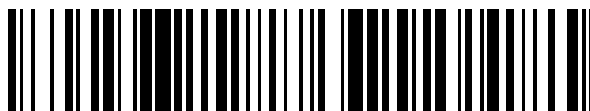


19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 706 656**

51 Int. Cl.:

**C09K 9/02** (2006.01)  
**G02B 5/23** (2006.01)  
**G02C 7/10** (2006.01)  
**G03C 1/73** (2006.01)  
**C07D 311/92** (2006.01)  
**C07D 498/10** (2006.01)  
**C07D 493/04** (2006.01)  
**C07D 495/04** (2006.01)  
**C07D 409/06** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **26.05.2004** **E 11001432 (1)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **31.10.2018** **EP 2357217**

54 Título: **Compuestos fotocromicos**

30 Prioridad:

**01.07.2003 US 484100 P**

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

**29.03.2019**

73 Titular/es:

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

72 Inventor/es:

**HE, MENG;**  
**KELLAR, TERRY A.;**  
**KUMAR, ANIL y**  
**BLAKBURN, FORREST R.**

74 Agente/Representante:

**VALLEJO LÓPEZ, Juan Pedro**

**ES 2 706 656 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

5 **Antecedentes**

Diversas realizaciones no limitantes descritas en el presente documento se refieren en general a compuestos fotocromicos. Otras realizaciones se refieren a dispositivos y elementos preparados usando los compuestos fotocromicos divulgados en la presente memoria.

10 Los compuestos fotocromicos convencionales tienen al menos dos estados, un primer estado que tiene un primer espectro de absorción y un segundo estado que tiene un segundo espectro de absorción que difiere del primer espectro de absorción y que son capaces de cambiar entre los dos estados en respuesta a al menos radiación actínica. Además, los compuestos fotocromicos convencionales pueden ser térmicamente reversibles. Es decir, los compuestos fotocromicos convencionales son capaces de cambiar entre un primer estado y un segundo estado en respuesta a al menos radiación actínica y volver de nuevo al primer estado en respuesta a energía térmica. Tal como se usa en el presente documento "radiación actínica" significa radiación electromagnética, tal como, pero sin limitación, radiación visible y ultravioleta que es capaz de provocar una respuesta. Más específicamente, los compuestos fotocromicos convencionales pueden sufrir una transformación en respuesta a radiación actínica de un isómero a otro, presentando cada isómero un espectro de absorción característico, y pueden volver de nuevo de forma adicional al primer isómero en respuesta a energía térmica (es decir, reversibles térmicamente). Por ejemplo, los compuestos fotocromicos térmicamente reversibles convencionales son en general capaces de cambiar de un primer estado, por ejemplo un "estado transparente", a un segundo estado, por ejemplo un "estado coloreado", en respuesta a radiación actínica y volver de nuevo al estado "transparente" en respuesta a energía térmica.

25 Los compuestos dicroicos son compuestos que son capaces de absorber uno de dos componentes polarizados del plano ortogonal de la radiación transmitida más fuertemente que el otro. Por lo tanto, los compuestos dicroicos son capaces de polarizar de forma lineal la radiación transmitida. Como se usa en el presente documento, "polarizar de forma lineal" significa limitar las vibraciones del vector eléctrico de las ondas de luz hacia una dirección o plano. Sin embargo, aunque los materiales dicroicos son capaces de absorber de forma preferente uno de los dos componentes polarizados del plano ortogonal de la radiación transmitida, si las moléculas del compuesto dicroico no están situadas o dispuestas de forma adecuada, no se conseguirá una polarización lineal neta de la radiación transmitida. Es decir, debido al posicionamiento aleatorio de las moléculas del compuesto dicroico, la absorción selectiva por las moléculas individuales se anulará entre sí de modo que no se consiga un efecto de polarización lineal neto o total. Por lo tanto, generalmente es necesario adecuar la posición o la disposición de las moléculas del compuesto dicroico con otro material para formar un elemento de polarización lineal convencional, tal como un filtro de polarización lineal o lentes para gafas de sol.

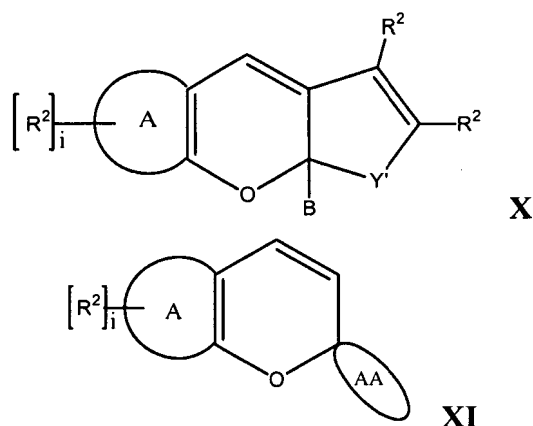
40 Al contrario de los compuestos dicroicos, generalmente no es necesario colocar o disponer las moléculas de los compuestos fotocromicos convencionales para formar un elemento fotocromico convencional. Por lo tanto, por ejemplo, los elementos fotocromicos convencionales, tales como lentes para gafas fotocromicas, pueden formarse, por ejemplo, mediante revestimiento por rotación de una solución que contiene un compuesto fotocromico convencional y un material "hospedador" sobre la superficie de la lente y curando de forma adecuada el revestimiento o capa resultante sin disponer el compuesto fotocromico en una orientación concreta. Además, incluso si las moléculas del compuesto fotocromico convencional estuvieran situadas o dispuestas de forma adecuada tal como se ha descrito anteriormente con respecto a los compuestos dicroicos, debido a que los compuestos fotocromicos convencionales no demuestran fuertemente dicroísmo, los elementos fabricados a partir de los mismos generalmente son fuertemente polarizantes de forma lineal.

50 Sería ventajoso proporcionar compuestos fotocromicos, tales como, pero sin limitación, compuestos fotocromicos térmicamente reversibles, que puedan exhibir propiedades fotocromicas y/o dicroicas útiles en al menos un estado y que pueden usarse en varias aplicaciones para conferir propiedades fotocromicas y/o dicroicas.

55 El documento US 5 395 567 A desvela compuestos espironaftopirano fotocromicos y el documento WO 96/04576 A desvela derivados de fenantropirano fotocromicos.

**Sumario de la invención**

60 La presente invención se refiere a un compuesto fotocromico no térmicamente reversible representado por una de Fórmula X y Fórmula XI:



tal como se define a continuación.

### 5 Breve descripción de distintas vistas de los dibujos

Diversas realizaciones no limitantes de la presente invención se entenderán mejor cuando se lean junto con los dibujos, en los que:

La **Fig. 1** muestra dos diferencias promedio del espectro de absorción obtenidas para un compuesto fotocromático de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento usando el MÉTODO DE CELDA.

### Descripción detallada

Tal como se usan en la presente memoria descriptiva y las reivindicaciones adjuntas, los artículos "un," "uno", "una", y "el", "la" incluyen referencias en plural, a menos que se limite de forma expresa e inequívoca a una referencia.

Además, aunque que los intervalos numéricos y parámetros que exponen el alcance amplio de la invención son aproximaciones, tal como se ha analizado anteriormente, los valores numéricos expuestos en la sección de Ejemplos se informan con la mayor precisión posible. Debería entenderse, sin embargo, que dichos valores numéricos contienen de forma inherente ciertos errores resultantes del equipo de medición y/o de las técnicas de medición.

Se describirán a continuación diversas realizaciones no limitantes de la invención. Una realización no limitante proporciona un compuesto fotocromático térmicamente no reversible, adaptado para tener al menos un primer estado y un segundo estado, en donde el compuesto fotocromático térmicamente reversible, tiene un intervalo de absorción media mayor de 2,3 en al menos un estado tal como se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA, que se describe con detalle más adelante. Además, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, el compuesto fotocromático térmicamente reversible, tiene un intervalo de absorción media mayor de 2,3 en un estado activado tal como se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA. Como se usa en el presente documento, la expresión "compuesto fotocromático" incluye compuestos fotocromáticos tanto térmicamente reversibles como no térmicamente reversibles (o fotorreversibles). Como se usa en el presente documento con respecto a los compuestos fotocromáticos, la expresión "estado activado" se refiere al compuesto fotocromático cuando se ha expuesto a suficiente radiación actínica para provocar que la al menos una porción del compuesto fotocromático cambie de estado. Además, como se usa en el presente documento, el término "compuesto" significa una sustancia formada por la unión de dos o más elementos, los componentes, ingredientes o partes e incluye, sin limitación, moléculas y macromoléculas (por ejemplo polímeros u oligómeros) formadas por la unión de dos o más elementos, los componentes, ingredientes o partes.

Hablando en general, el MÉTODO DE CELDA de medición del intervalo de absorción promedio de un compuesto fotocromático implica obtener un espectro de absorción para el compuesto fotocromático, en un estado activado o inactivado, en cada una de las dos direcciones de polarización ortogonales mientras que el compuesto fotocromático está al menos parcialmente alineado en un medio de cristal líquido alineado que está contenido dentro de un ensamblaje de celda. Más específicamente, el ensamblaje de celda comprende dos sustratos de vidrio opuestos que están separados 20 micrómetros +/- 1 micrómetro. Los sustratos se sellan a lo largo de dos bordes opuestos para formar la celda. La superficie interior de cada uno de los sustratos de vidrio se recubre con un revestimiento de poliimida, cuya superficie se ha ordenado al menos parcialmente por frotamiento. El alineamiento del compuesto fotocromático se consigue introduciendo el compuesto fotocromático y un medio de cristal líquido en el ensamblaje de celda y permitiendo que el medio de cristal líquido se alinee con la superficie de poliimida frotada. Debido a que el compuesto fotocromático está contenido dentro del medio de cristal líquido, el alineamiento del medio de cristal líquido provoca que el compuesto fotocromático se alinee. Se apreciará por los expertos en la materia que la elección del medio de cristal líquido y la temperatura usados durante el ensayo pueden afectar a la relación de absorción medida. En consecuencia, como se explicará con más detalle en los ejemplos, para los propósitos del MÉTODO DE CELDA, las

medidas de la relación de absorción se toman a temperatura ambiente (22,8 °C +/- 0,5 °C o mayor) (73 °F +/- 0,5 °F o mayor) y el medio de cristal líquido es Licristal® E7 (del cual se informa que es una mezcla de compuestos de cristal líquido de cianoterfenilo y cianobifenilo).

5 Una vez que el medio de cristal líquido y el compuesto fotocromático están alineados, el ensamblaje de celda se coloca en un banco óptico (el cual se describe con mayor detalle en los ejemplos). Para obtener la relación de absorción promedio en el estado activado, la activación del compuesto fotocromático-dicroico se logra exponiendo el compuesto fotocromático-dicroico a radiación UV durante un tiempo suficiente para alcanzar un estado saturado o casi saturado (es decir, un estado en el que las propiedades de absorción del compuesto fotocromático-dicroico no cambian sustancialmente durante el intervalo de tiempo durante el que se hacen las mediciones. Las mediciones de absorción se toman durante un periodo de tiempo (normalmente de 10 a 300 segundos) a intervalos de 3 segundos para luz que está linealmente polarizada en un plano perpendicular al banco óptico (denominado el plano o dirección de polarización a 0°) y luz que está linealmente polarizada en un plano que es paralelo al banco óptico (denominado el plano o dirección de polarización a 90°) en la siguiente secuencia: 0°, 90°, 90°, 0°, etc. La absorbancia de la luz linealmente polarizada por la celda se mide en cada intervalo de tiempo para todas las longitudes de onda probadas y se resta la absorbancia sin activar (es decir, la absorbancia de la celda con el material de cristal líquido y el compuesto fotocromático inactivado) durante el mismo intervalo de longitudes de onda para obtener espectros de absorción para el compuesto fotocromático en cada uno de los planos de polarización a 0° y 90° para obtener un espectro de absorción de diferencias promedio en cada plano de polarización para el compuesto fotocromático en el estado saturado o casi saturado.

20 Por ejemplo, con referencia a la Fig. 1, se muestra la diferencia promedio del espectro de absorción (indicada generalmente con 10) en un plano de polarización que se obtuvo para un compuesto fotocromático de acuerdo con una realización no limitante desvelada en el presente documento. El espectro de absorción promedio (indicado generalmente con 11) es la diferencia promedio del espectro de absorción obtenido para el mismo compuesto fotocromático en el plano de polarización ortogonal.

Basándose en la diferencia promedio de los espectros de absorción obtenida para el compuesto fotocromático, la relación de absorción promedio para el compuesto fotocromático se obtiene como sigue. La relación de absorción del compuesto fotocromático en cada longitud de onda en un intervalo predeterminado de longitudes de onda correspondiente a  $\lambda_{\text{máx-vis}} \pm 5$  nanómetros (indicada generalmente con 14 en la Fig. 1), en donde  $\lambda_{\text{máx-vis}}$  es la longitud de onda a la que el compuesto fotocromático tiene la mayor absorbancia promedio en cualquier plano, se calcula de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$AR_{\lambda_i} = Ab^{1_{\lambda_i}} / Ab^{2_{\lambda_i}} \quad \text{Ec. 1}$$

35 en la que,  $AR_{\lambda_i}$  es la relación de absorción en la longitud de onda  $\lambda_i$ ,  $Ab^{1_{\lambda_i}}$  es la absorción promedio a la longitud de onda  $\lambda_i$  en la dirección de polarización (es decir, 0° o 90°) que tiene la mayor absorbancia, y  $Ab^{2_{\lambda_i}}$  es la absorción promedio a la longitud de onda  $\lambda_i$  en la dirección de polarización restante. Como se ha analizado anteriormente, la "relación de absorción" se refiere a la relación de la absorbancia de radiación polarizada de forma lineal en un primer plano con la absorbancia de la misma longitud de onda de radiación polarizada de forma lineal en un plano ortogonal al primer plano, en donde el primer plano se toma como el plano con la mayor absorbancia.

45 La relación de absorción promedio ("AR") para el compuesto fotocromático se calcula entonces promediando las relaciones de absorción individuales obtenidas para las longitudes de onda dentro del intervalo predeterminado de longitudes de onda (es decir,  $\lambda_{\text{máx-vis}} \pm 5$  nanómetros) de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$AR = (\sum AR_{\lambda_i}) / n_i \quad \text{Ec. 2}$$

50 en la que, AR es el intervalo promedio de absorción para el compuesto fotocromático,  $AR_{\lambda_i}$  son los intervalos de absorción individuales (como se ha determinado anteriormente en la Eq. 1) para cada longitud de onda dentro del intervalo predeterminado de longitudes de onda (es decir,  $\lambda_{\text{máx-vis}} \pm 5$  nanómetros), y  $n_i$  es el número de relaciones de absorción individuales promediadas.

55 Como se ha analizado anteriormente, los compuestos fotocromáticos térmicamente reversibles convencionales están adaptados para cambiar de un primer estado a un segundo estado en respuesta a radiación actínica y para volver de nuevo al primer estado en respuesta a energía térmica. Más específicamente, los compuestos fotocromáticos térmicamente reversibles convencionales son capaces de transformarse de una forma isomérica (por ejemplo y sin limitación, una forma cerrada) a otra forma isomérica (por ejemplo y sin limitación, una forma abierta) en respuesta a radiación actínica, y pasar a la forma cerrada cuando se exponen a energía térmica. Sin embargo, como se ha analizado anteriormente, los compuestos fotocromáticos térmicamente reversibles convencionales generalmente no muestran fuertemente dicroísmo.

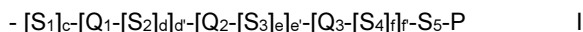
65 Tal como se ha analizado anteriormente, las realizaciones no limitantes del presente documento proporcionan un compuesto fotocromático térmicamente reversible que tiene una relación de absorción promedio mayor de 2,3 en al menos un estado tal como se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA. Por lo tanto, el compuesto fotocromático térmicamente reversible de acuerdo con la presente realización no limitante puede mostrar tanto

propiedades fotocromicas útiles como propiedades dicroicas útiles. Es decir, el compuesto fotocromico térmicamente reversible, el compuesto fotocromico puede ser un compuesto fotocromico-dicroico térmicamente reversible. Como se usa en el presente documento con respecto a los compuestos fotocromicos descritos en el presente documento, el término "fotocromico-dicroico" significa que presenta propiedades tanto fotocromicas como dicroicas en determinadas condiciones, siendo dichas propiedades detectables al menos con instrumentación.

De acuerdo con otras realizaciones no limitantes, los compuestos fotocromicos térmicamente reversibles pueden ser compuestos fotocromicos-dicroicos térmicamente reversibles que tienen una relación de absorción promedio que varía de 4 a 20, de 3 a 30 o de 2,5 a 50 en al menos un estado, tal como se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA. Se apreciará por los expertos en la materia que cuanto mayor sea la relación de absorción promedio del compuesto fotocromico, mayor será la polarización lineal del compuesto fotocromico. Por lo tanto, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, los compuestos fotocromicos térmicamente reversibles pueden tener cualquier relación de absorción promedio requerida para conseguir un nivel deseado de polarización lineal.

Otra realización no limitante proporciona un compuesto fotocromico térmicamente no reversible, que está libre de oxazinas y adaptado para tener al menos un primer estado y un segundo estado, en donde el compuesto fotocromico tiene una relación de absorción promedio de al menos 1,5 en al menos un estado, tal como se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA. Además, de acuerdo con esta realización no limitante, el promedio de la relación de absorción promedio puede variar de 1,5 a 50 en al menos un estado, tal como se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA.

Otras realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento proporcionan un compuesto fotocromico, que puede ser un compuesto fotocromico térmicamente reversible, que comprende: (a) al menos un grupo fotocromico (PC) elegido entre piranos, oxazinas y fúlgidos; y (b) al menos un agente de alargamiento unido a al menos un grupo fotocromico, en donde el agente de alargamiento (L) se representa por la siguiente Fórmula I (que se describe con detalle a continuación):



Como se usa en el presente documento, el término "unido" significa unido directamente o unido indirectamente a través de otro grupo. Por lo tanto, por ejemplo, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, L puede estar directamente unido a PC como un sustituyente sobre PC, o L puede ser un sustituyente sobre otro grupo (tal como un grupo representado por R<sup>1</sup> que se describe a continuación) que está directamente unido a PC (es decir, L está indirectamente unido a PC). Aunque sin limitarse al presente documento, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, L puede unirse al PC para extender o alargar el PC en un estado activado de modo que la relación de absorción del PC extendido (es decir, el compuesto fotocromico) se potencia en comparación con PC solo. Aunque sin limitarse al presente documento, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, la localización de la unión de L al PC puede seleccionarse de modo que L alargue el PC en al menos una de una dirección paralela a o una dirección perpendicular a un momento dipolar transicional teórico de la forma activada del PC. Como se usa en el presente documento, la expresión "momento dipolar transicional teórico" se refiere a la polarización dipolar transitoria creada por la interacción de la radiación electromagnética con la molécula. Véase, por ejemplo, IUPAC Compendium of Chemical Technology, 2<sup>a</sup> Ed., International Union of Pure and Applied Chemistry (1997).

Con referencia a la Fórmula I anterior, cada Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> y Q<sub>3</sub> pueden seleccionarse independientemente en cada ocasión entre: un grupo divalente escogido entre un grupo aromático no sustituido o sustituido, un grupo alicíclico no sustituido o sustituido, un grupo heterocíclico no sustituido o sustituido y mezclas de los mismos, en donde los sustituyentes se escogen entre: un grupo representado por P (como se expone a continuación), arilo, tiol, amida, mesógenos de cristal líquido, halógeno, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, poli(alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), amino, aminoalquileo (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), alquilamino C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, di-alquilamino (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, alqueno C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>, alquino C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>, alquil C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>-alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), alcoxycarbonilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, alquilcarbonilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, alquilcarbonato C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, arilcarbonato, acetilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>, cicloalcoxi C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>, isocianato, amido, ciano, nitro, un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub> de cadena lineal o ramificada que está mono-sustituido con ciano, halo, o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, o polisustituido con halo y un grupo representado por ua o más de las siguientes fórmulas: —M(T)<sub>(t-1)</sub> y —M(OT)<sub>(t-1)</sub>, en donde M se escoge de aluminio, antimonio, tantalio, titanio, circonio y silicio, T se elige de radicales organofuncionales, radicales de hidrocarburo organofuncionales, radicales de hidrocarburo alifático y radicales de hidrocarburo aromático, y t es la valencia de M. Tal como se usa en el presente documento, el prefijo "poli" significa al menos dos.

Tal como se ha analizado anteriormente, Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> y Q<sub>3</sub> pueden seleccionarse independientemente en cada ocasión entre un grupo divalente, tal como un grupo aromático no sustituido o sustituido, grupo heterocíclico no sustituido o sustituido y un grupo alicíclico no sustituido o sustituido. Ejemplos no limitantes de grupos aromático útiles incluyen: benzo, nafto, fenantro, bifenilo, tetrahidro nafto, terfenil y antraceno.

Tal como se usa en el presente documento, "grupo heterocíclico" significa un compuesto que tiene un anillo de átomos, en donde al menos un átomo que forma el anillo es distinto de los otros átomos que forman el anillo. Además, como se usa en el presente documento, el término grupo heterocíclico excluye específicamente grupos heterocíclicos fusionados. Los ejemplos no limitantes de grupos heterocíclicos adecuados entre los que se puede escoger Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> y

Q<sub>3</sub> incluyen: isosorbitol, diabenzofo, dibenzotieno, benzofo, benzotieno, tieno, furo, dioxino, carbazolo, antranililo, azepinilo, benzoxazolilo, diazepinilo, dioazlil, imidazolidinilo, imidazolilo, imidazolinilo, indazolilo, indoleninilo, indolinilo, indolizínilo, indolilo, indoxazinilo, isobenzazoilo, isoindolilo, isooxazolilo, isooxacilo, isopirroilo, isoquinolilo, isotiazolilo, morfolino, morfolinilo, oxadiazolilo, oxatiazolilo, oxatiacilo, oxatiolilo, oxatriazolilo, oxazolilo, piperazinilo, piperazilo, piperidilo, purinilo, piranopirrolo, pirazinilo, pirazolidinilo, pirazolinilo, pirazolilo, pirazilo, piridazinilo, piridazilo, piridilo, pirimidinilo, pirimidilo, piridenilo, pirrolidinilo, pirrolinilo, pirrolilo, quinolizínilo, quinuclidinilo, quinolilo, tiazolilo, triazolilo, triacilo, N-arilpiperazino, aziridino, arilpiperidino, tiomorfolino, tetrahidroquinolino, tetrahidroisoquinolino, pirrilo, aminas espirobicíclicas C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> mono o di-sustituida, o sin sustituir, y aminas espirotríclicas C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> mono o di-sustituida o sin sustituir.

10 Tal como se ha analizado anteriormente, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> y Q<sub>3</sub> pueden elegirse de amina espirobicíclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub> mono, o di-sustituida, y amina espirocíclica C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub>. Los ejemplos no limitantes de sustituyentes adecuados incluyen arilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> o fenil-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>). Ejemplos específicos no limitantes de aminas espirobicíclicas mono o di-sustituidas incluyen: 2-azabicyclo[2.2.1]hept-2-ilo; 3-azabicyclo[3.2.1]oct-3-ilo; 2-azabicyclo[2.2.2]oct-2-ilo; y 6-azabicyclo[3.2.2]nonan-6-ilo. Ejemplos específicos no limitantes de aminas tríclicas mono o di-sustituidas incluyen: 2-azatriciclo[3.3.1.1(3,7)]decan-2-ilo; 4-bencil-2-azatriciclo[3.3.1.1(3,7)]decan-2-ilo; 4-metoxi-6-metil-2-azatriciclo[3.3.1.1(3,7)]decan-2-ilo; 4-azatriciclo[4.3.1.1(3,8)]undecan-4-ilo; y 7-metil-4-azatriciclo[4.3.1.1(3,8)]undecan-4-ilo.

20 Ejemplos de grupos alicíclicos entre los que se puede escoger Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> y Q<sub>3</sub> incluyen, sin limitación, ciclohexilo, ciclopropilo, norbornenilo, decalinilo, adamantanilo, biciclooctano, per-hidrofluoreno y cubanilo.

Con referencia continuada a la Fórmula I, y cada S<sub>1</sub>, S<sub>2</sub>, S<sub>3</sub>, S<sub>4</sub> y S<sub>5</sub> se elige independientemente para cada aparición de una unidad de espaciador elegida de:

25 (1) -(CH<sub>2</sub>)<sub>g</sub>-, -(CF<sub>2</sub>)<sub>h</sub>-, -Si(CH<sub>2</sub>)<sub>g</sub>-, -(Si[(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>O])<sub>h</sub>-, en donde g se escoge independientemente en cada ocasión de 1 a 20; h se escoge de 1 a 16;  
 (2) -N(Z)-, -C(Z)=C(Z)-, -C(Z)=N-, -C(Z')-C(Z')-, en donde Z se selecciona independientemente en cada ocasión entre hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo y arilo y Z' se selecciona independientemente en cada ocasión entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo y arilo; y (3) -O-, -C(O)-, -C≡C-, -N=N-, -S-, -S(O)-, -S(O)(O)-, residuo alquilenos C<sub>1</sub>-C<sub>24</sub> de cadena lineal o ramificada, estando dicho residuo de alquilenos C<sub>1</sub>-C<sub>24</sub> sin sustituir, mono-sustituido por ciano o halo, o poli-sustituido por halo,

35 con la condición de que cuando dos unidades de espaciador que comprenden heteroátomos están unidas juntas, las unidades de espaciador se unan de manera que los heteroátomos no estén directamente unidos entre sí y cuando S<sub>1</sub> y S<sub>5</sub> están unidos a PC y P, respectivamente, está unidos de modo que dos heteroátomos no están directamente unidos entre sí. Tal como se usa en el presente documento, "heteroátomo" se refiere a átomos distintos a carbono o hidrógeno.

40 De acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, en la fórmula I, c, d, e, y f se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 1 a 20, ambos incluidos; y d', e' y f' se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de d' + e' + f sea al menos 1. De acuerdo con otras realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, c, d, e, y f se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 0 a 20, ambos incluidos, y d', e' y f' se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de d' + e' + f sea al menos 2. De acuerdo con aún otras realizaciones no limitantes que se desvelan en el presente documento, c, d, e, y f se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 0 a 20, ambos incluidos, y d', e' y f' se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de d' + e' + f sea al menos 3. De acuerdo con aún otras realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, c, d, e, y f se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 0 a 20, ambos incluidos, y d', e' y f' se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de d' + e' + f sea al menos 1.

Además, en la fórmula I, P pueden elegirse de entre: aziridinilo, hidrógeno, hidroxilo, arilo, alquilo, alcoxi, amino, alquilamino, alquilalcoxi, alcoxialcoxi, nitro, éter de polialquilo, alquil (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>), polietilenoxi, polipropilenoxi, etileno, acrilato, metacrilato, 2-cloroacrilato, 2-fenilacrilato, acriloilfenileno, acrilamida, metacrilamida, 2-cloroacrilamida, 2-fenilacrilamida, epoxi, isocianato, tiol, tióisocianato, éster del ácido itacónico, éter vinílico, ester vinílico, un derivado de estireno, siloxano, polímeros de cristal líquido de cadena principal y de cadena lateral, derivados de etilenimina, derivados de ácido maleico, derivados de ácido fumárico, derivados de ácido cinámico sin sustituir, derivados de ácido cinámico que están sustituidos con al menos uno de metilo, metoxi, ciano y halógeno, y grupos monovalentes y divalentes quirales y no quirales sustituidos o sin sustituir elegidos de radicales esteroides, radicales terpenoides, radicales alcaloides, y mezclas de los mismos, en donde los sustituyentes son elegidos independientemente de alquilo, alcoxi, amino, cicloalquilo, alquilalcoxi, fluoroalquilo, cianoalquilo, cianoalcoxi y mezclas de los mismos.

65 De acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, cuando P es un grupo polimerizable, el grupo polimerizable puede ser cualquier grupo funcional adaptado para participar en una reacción de

polimerización. Ejemplos no limitantes de reacciones de polimerización incluyen las descritas en la definición de "polimerización" en Hawley's Condensed Chemical Dictionary Thirteenth Edition. 1997, John Wiley & Sons, las páginas 901-902. Por ejemplo, aunque de manera no limitante en el presente documento, reacciones de polimerización incluyen: "polimerización de adición", en la que radicales libres son los agentes iniciadores que reaccionan con el doble enlace de un monómero mediante la adición a este sobre un lado al mismo tiempo que produce un nuevo electrón libre sobre el otro lado; "polimerización de condensación", en la que dos moléculas de reacción se combinan para formar una molécula más grande con la eliminación de una molécula pequeña, tal como una molécula de agua; y "polimerización de acoplamiento oxidativo". Además, ejemplos no limitantes de grupos polimerizables incluyen hidroxilo, acriloxi, metacriloxi, 2-(acriloxi)etilcarbamilo, 2-(metacriloxi)etilcarbamilo, isocianato, aziridina, alicarbonato y epoxi, por ejemplo, oxiranilmetilato.

De acuerdo con una realización específica, no limitante, P pueden elegirse de entre un polímero de cristal líquido de cadena principal o cadena lateral y un mesogeno de cristal líquido. Como se usa en el presente documento, el término "mesogeno" de cristal líquido se refiere a moléculas de cristal líquido tipo varilla o tipo disco rígidas. Además, tal como se usa en el presente documento la expresión "polímero de cristal líquido de cadena principal" se refiere a un polímero que tiene mesogenos de cristal líquido dentro de la estructura principal (es decir, la cadena principal) del polímero. Tal como se usa en el presente documento la expresión "polímero de cristal líquido de cadena lateral" se refiere a un polímero que tiene mesogenos de cristal líquido unidos al polímero en las cadenas laterales. Aunque sin limitarse al presente documento, en general, los mesogenos están fabricados de dos o más anillos aromáticos que restringen el movimiento de un polímero de cristal líquido. Ejemplos de mesogenos de cristal tipo varilla adecuados incluyen sin limitación: ésteres aromáticos sustituidos o sin sustituir, compuestos aromáticos lineales sustituidos o sin sustituir y terfenilos sustituidos o sin sustituir.

De acuerdo con otra realización específica, no limitante, P puede escogerse entre un radical de esteroide, por ejemplo y sin limitación, un compuesto colesterólico.

Como se ha analizado anteriormente, diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento proporcionan un compuesto fotocromático que comprende (a) un grupo fotocromático (PC) seleccionado entre piranos, oxazinas y fúlgidos y (b) al menos un agente de alargamiento (L) representado por la Fórmula I (anterior) unido a un PC. Según la presente invención, que se analizan a continuación en el presente documento con más detalle, PC es un grupo fotocromático, no térmicamente reversible. Como se usa en el presente documento, el término "no térmicamente reversible" significa adaptado para cambiar de un primer estado a un segundo estado en respuesta a radiación actínica y para volver de nuevo al primer estado en respuesta a radiación actínica.

De acuerdo con una realización específica, no limitante, en donde el grupo fotocromático comprende al menos dos PC, los PC pueden unirse entre sí mediante sustituyentes del grupo de enlace en los PC individuales. Por ejemplo, los PC pueden ser grupos fotocromáticos polimerizables o grupos fotocromáticos que están adaptados para ser compatibles con un material hospedador ("grupo fotocromático compatibilizado"). Los ejemplos no limitantes de grupos fotocromáticos polimerizables entre los que pueden seleccionarse los PC y que son útiles junto con diversas realizaciones desveladas en el presente documento se desvelan en la patente de los Estados Unidos 6.113.814. Los ejemplos no limitantes de grupos fotocromáticos compatibilizados entre los que pueden seleccionarse los PC y que son útiles junto con diversas realizaciones desveladas en el presente documento se desvelan en la patente de los Estados Unidos 6.555.028.

Otros grupos fotocromáticos adecuados y grupos fotocromáticos complementarios se describen en las patentes de los Estados Unidos 6.080.338 en la columna 2, línea 21 a la columna 14, línea 43; 6.136.968 en la columna 2, línea 43 a la columna 20, línea 67; 6.296.785 en la columna 2, línea 47 a la columna 31, línea 5; 6.348.604 en la columna 3, línea 26 a la columna 17, línea 15; 6.353.102 en la columna 1, línea 62 a la columna 11, línea 64; y 6.630.597 en la columna 2, línea 16 a la columna 16, línea 23.

Además, como se ha analizado anteriormente, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, el compuesto fotocromático que comprende el al menos un grupo fotocromático (PC) y el al menos un agente de alargamiento (L) representado por la Fórmula I (anterior) y unido al PC, puede ser un compuesto fotocromático-dicroico. Por ejemplo, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, el compuesto fotocromático puede ser un compuesto fotocromático-dicroico que tiene una relación de absorción promedio mayor de 2,3 en un estado activado tal como se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA (descrito anteriormente). De acuerdo con otras realizaciones no limitantes, el compuesto fotocromático puede ser un compuesto fotocromático-dicroico que tiene una relación de absorción promedio que varía de 4 a 20, de 3 a 30 o de 2,5 a 50 en un estado activado según se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA.

Además, junto con al menos un agente de alargamiento (L), los compuestos fotocromáticos de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento pueden comprender además al menos un grupo representado por R<sup>1</sup> que está unido directamente al PC. Además, aunque no es necesario, como se ha analizado anteriormente, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, el al menos un agente de alargamiento (L) puede unirse indirectamente al PC a través del al menos un grupo representado por R<sup>1</sup>. Es decir, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, L puede ser un sustituyente en al menos un grupo R<sup>1</sup> que está unido al PC.

De acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, R<sup>1</sup> puede seleccionarse independientemente en cada ocasión entre:

- 5 (i) hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alquilideno C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>, alquilidino C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>, vinilo, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alilo, halógeno y bencilo que está sin sustituir o monosustituido con al menos uno de alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;
- 10 (ii) fenilo que está monosustituido en la posición *para* con al menos un sustituyente seleccionado entre: alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>7</sub>, alquileo C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> de cadena lineal o ramificada, polioxialquileo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> de cadena lineal o ramificada, alquileo C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub> cíclico, fenileno, naftileno, fenileno sustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, mono o poliuretano de alquileo (C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>), mono o poliéster de alquileo (C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>), mono o policarbonato de alquileo (C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>), polisilanileno, polisiloxanileno y mezclas de los mismos, en donde el al menos un sustituyente está conectado con un grupo arilo de un material fotocromático;
- 15 (iii) -CH(CN)<sub>2</sub> y -CH(COOX<sub>1</sub>)<sub>2</sub>, en donde X<sub>1</sub> se selecciona entre al menos uno de un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> que está sin sustituir o monosustituido con fenilo, fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) que está monosustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y un grupo arilo que está sin sustituir, mono o disustituido, en donde cada sustituyente arilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;
- (iv) -CH(X<sub>2</sub>)(X<sub>3</sub>), en donde:

20 (A) X<sub>2</sub> se selecciona entre al menos uno de un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y un grupo arilo que está sin sustituir, mono o disustituido, en donde cada sustituyente arilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>; y

(B) X<sub>3</sub> se selecciona entre al menos uno de -COOX<sub>1</sub>, -COX<sub>1</sub>, -COX<sub>4</sub> y -CH<sub>2</sub>OX<sub>5</sub>, en donde:

25 (1) X<sub>4</sub> se selecciona entre al menos uno de morfolino, piperidino, amino que está sin sustituir, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> mono o di-sustituido y sin sustituir, grupo mono o disustituido escogido entre fenilamino y difenilamino, en donde cada sustituyente se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>; y

30 (2) X<sub>5</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno, -C(O)X<sub>2</sub>, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> que está sin sustituir o monosustituido con fenilo o alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) que está monosustituido con alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) y un grupo arilo que está sin sustituir, mono o disustituido, en donde cada sustituyente arilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

35 (v) un grupo arilo sin sustituir, mono-, di- o tri-sustituido, tal como fenilo, naftilo, fenantrilo o pirenilo; 9-julolidinilo; o un grupo heteroaromático sin sustituir, mono o disustituido escogido entre piridilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benzotien-2-ilo, benzotien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, carbazoilo, benzopiridilo, indolinilo y fluorenilo; en donde los sustituyentes se seleccionan independientemente en cada ocasión entre:

(A) un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior;

40 (B) -C(O)X<sub>6</sub>, en donde X<sub>6</sub> se selecciona entre al menos uno de: un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenoxi que está sin sustituir, mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, un grupo arilo que está sin sustituir, mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, un grupo amino que está sin sustituir, mono o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y un grupo fenilamino que está sin sustituir, mono o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

45 (C) arilo, haloarilo, cicloalquilarilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> y un grupo arilo que está mono o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

(D) alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, cicloalquiloalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), arilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), ariloxialquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), mono o dialquilaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), mono o di-alcoxiaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), haloalquilo y monoalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>);

50 (E) alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, cicloalcoxi C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, cicloalquiloalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), arilalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), ariloxialcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), mono o dialquilaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) y mono o dialcoxiaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>);

(F) amido, amino, mono o dialquilamino, diarilamino, piperazino, N-alquilpiperazino (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), N-arilpiperazino, aziridino, indolino, piperidino, morfolino, tiomorfolino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pirrolidilo, hidroxilo, acriloxi, metacriloxi y halógeno;

(G) -OX<sub>7</sub> y -N(X<sub>7</sub>)<sub>2</sub>, en donde X<sub>7</sub> se selecciona entre:

55 (1) un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, acilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) sustituido con monoalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) sustituido con monoalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>); alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</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>12</sub>), haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alilo, benzoilo, benzoilo monosustituido, naftoilo o naftoilo monosustituido, en donde cada uno de dichos sustituyentes benzoilo y naftoilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

60 (2) -CH(X<sub>8</sub>)X<sub>9</sub>, en donde X<sub>8</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>; y X<sub>9</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, -CN, -CF<sub>3</sub> o -COOX<sub>10</sub>, en donde X<sub>10</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

65 (3) -C(O)X<sub>6</sub>; y

(4) trialquilsililo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), trialcoxisililo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), dialquil (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-silil (alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) o dialcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-silil

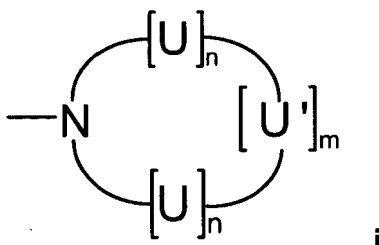


(alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>);

(H) -SX<sub>11</sub>, en donde X<sub>11</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, un grupo arilo que está si sustituir o mono o di sustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o halógeno;

5

(I) un anillo que contiene nitrógeno representado por la Fórmula i:



10

en donde:

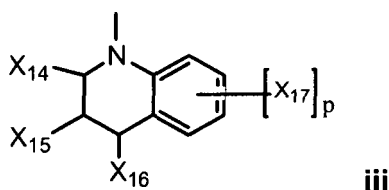
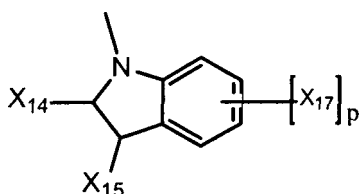
(1) n es un número entero seleccionado entre 0, 1, 2 y 3, con la condición de que si n es 0, U' es U y cada U se selecciona independientemente en cada ocasión entre -CH<sub>2</sub>-, -CH(X<sub>12</sub>)-, -C(X<sub>12</sub>)<sub>2</sub>-, -CH(X<sub>13</sub>)-, -C(X<sub>13</sub>)<sub>2</sub>- y -C(X<sub>12</sub>)(X<sub>13</sub>)-, en donde X<sub>12</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior y alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y X<sub>13</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, fenilo y naftilo y

15

(2) U' se selecciona entre U, -O-, -S-, -S(O)-, -NH-, -N(X<sub>12</sub>)- or -N(X<sub>13</sub>)-, y m es un número entero seleccionado entre 1, 2 y 3; y

20

(J) un grupo representado por una de las Fórmulas ii o iii:



25

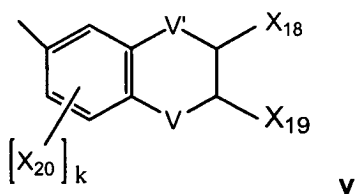
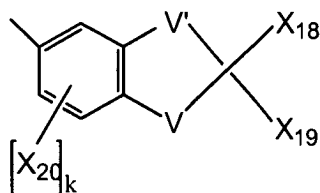
en donde X<sub>14</sub>, X<sub>15</sub>, y X<sub>16</sub> se escogen independientemente en cada ocasión entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo y naftilo o X<sub>14</sub> y X<sub>15</sub> juntos forman un anillo de 5 a 8 átomos de carbono; p es un número entero escogido entre 0, 1 o 2 y X<sub>17</sub> se selecciona independientemente en cada ocasión entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y halógeno;

30

(vi) un grupo sin sustituir o monosustituido seleccionado entre pirazolilo, imidazolilo, pirazolínilo, imidazolinilo, pirrolidinilo, fenotiazinilo, fenoxazinilo, fenazinilo y acridinilo, en donde cada sustituyente se escoge independientemente entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo, hidroxilo, amino y halógeno;

35

(vii) un grupo representado por una de las Fórmulas iv o v:



en donde

40

(A) V' se selecciona independientemente en cada fórmula entre -O-, -CH-, alquilenos C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> y cicloalquilenos C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>,

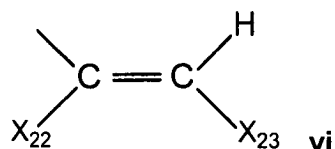
(B) V se selecciona independientemente en cada fórmula entre -O- o -N(X<sub>21</sub>)-, en donde X<sub>21</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y acilo C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>, siempre que si V es -N(X<sub>21</sub>)-, V' es -CH<sub>2</sub>-,

(C) X<sub>18</sub> y X<sub>19</sub> se seleccionan cada uno independientemente entre un agente de alargamiento L representado

por la Fórmula I anterior, hidrógeno y alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y

(D) k se escoge entre 0, 1 y 2 y cada X<sub>20</sub> se selecciona independientemente en cada ocasión entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, hidroxilo y halógeno;

5 (viii) un grupo representado por la Fórmula vi:



en donde

10 (A) X<sub>22</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidrógeno y alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y

15 (B) X<sub>23</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior o un grupo sin sustituir, mono o disustituido escogido entre naftilo, fenilo, furanilo y tienilo, en donde cada sustituyente se selecciona independientemente en cada ocasión entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y halógeno;

(ix) -C(O)X<sub>24</sub>, en donde X<sub>24</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I anterior, hidroxilo, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo que está sin sustituir o monosustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, amino que está sin sustituir, mono o disustituido con al menos uno de alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo, bencilo y naftilo;

20 (x) -OX<sub>7</sub> y -N(X<sub>7</sub>)<sub>2</sub>, en donde X<sub>7</sub> es como se ha expuesto anteriormente;

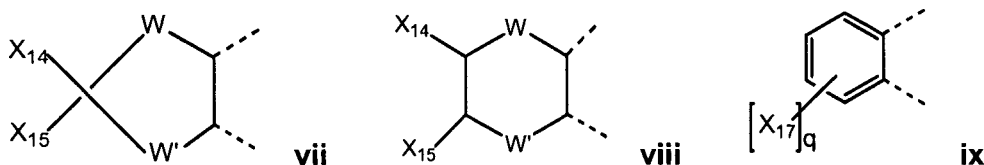
(xi) -SX<sub>11</sub>, en donde X<sub>11</sub> es como se ha expuesto anteriormente;

(xii) el anillo que contiene el nitrógeno representado por la Fórmula iv, que se ha expuesto anteriormente;

(xiii) el grupo representado por una de las Fórmulas v o vi, que se han expuesto anteriormente; y

(xiv) grupos R<sup>1</sup> inmediatamente adyacentes junto a un grupo representado por una de las Fórmulas vii, viii y ix:

25



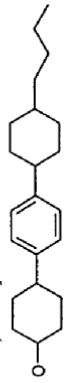
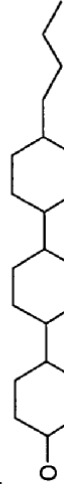
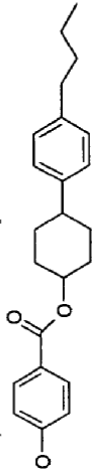
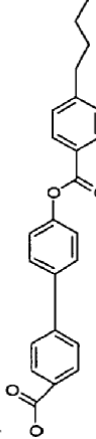
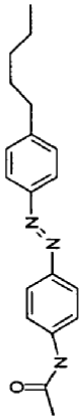
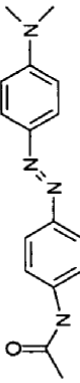
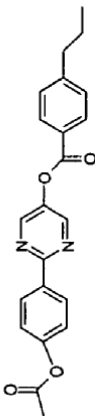
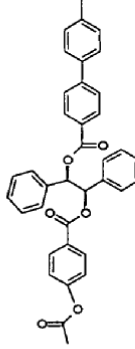
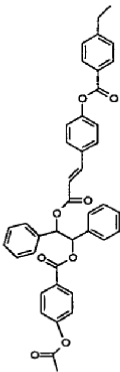
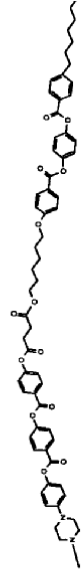
en donde

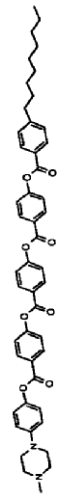
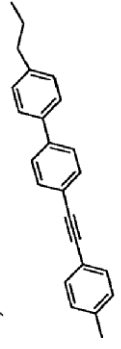
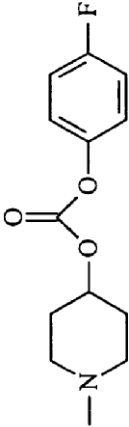
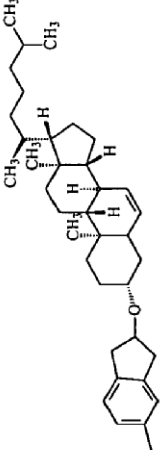
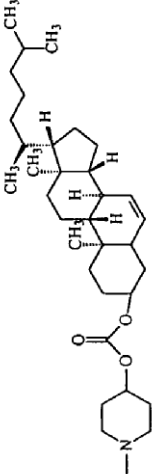
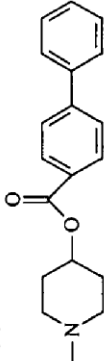
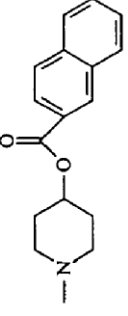
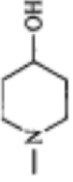
30 (A) W y W' se seleccionan independientemente en cada ocasión entre -O-, -N(X<sub>7</sub>)-, -C(X<sub>14</sub>)-, -C(X<sub>17</sub>)-, (en donde X<sub>7</sub>, X<sub>14</sub>, y X<sub>17</sub> son como se han expuesto anteriormente,

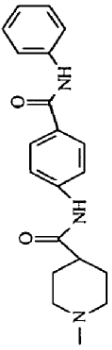
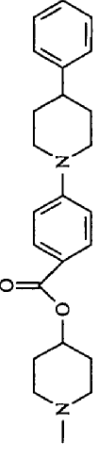
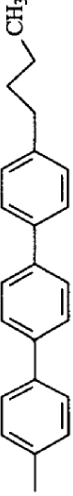
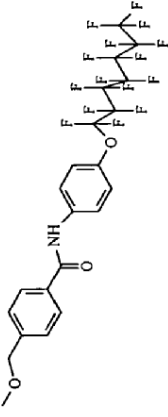

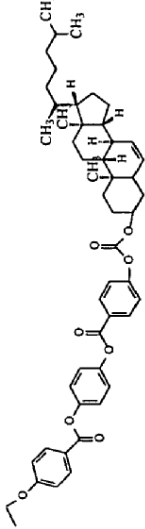
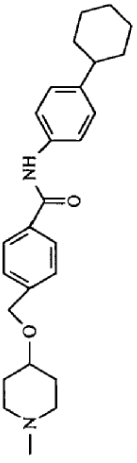
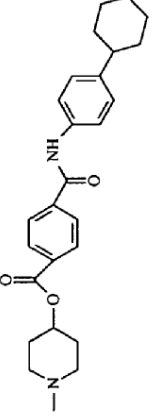
(B) X<sub>14</sub>, X<sub>15</sub> y X<sub>17</sub> son como se ha expuesto anteriormente y

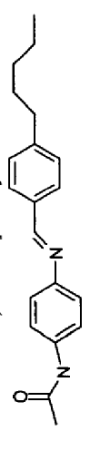

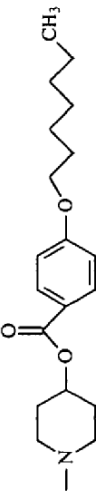
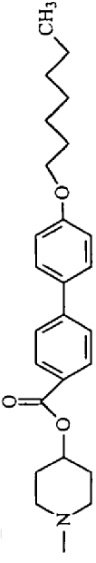
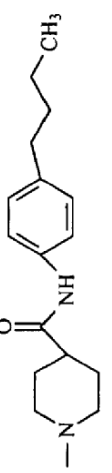
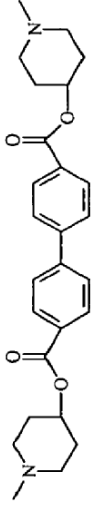
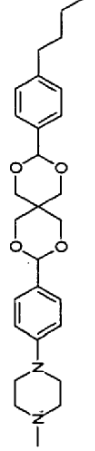
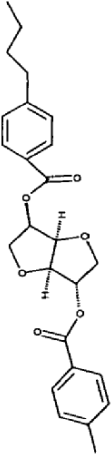
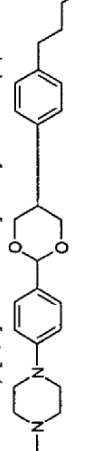
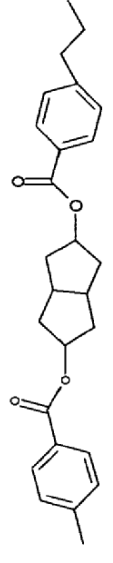
(C) q es un número entero seleccionado entre 0, 1, 2, 3 y 4.

35 De acuerdo con realizaciones no limitantes en donde el al menos un agente de alargamiento se selecciona entre uno de los siguientes compuestos enumerados (y representados gráficamente) a continuación en la Tabla I.

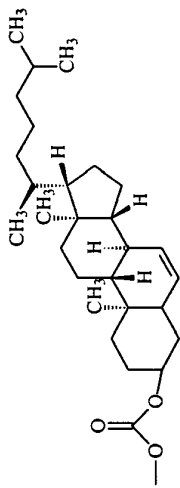
Tabla I:	
<p>(1) 4-[4-(4-butil-ciclohexil)-fenil]-ciclohexiloxi</p> 	<p>(2) 4*-butil-[1,1':4,1''terciclohexan-4-iloxi</p> 
<p>(3) 4-[4-(4-butil-fenil)-ciclohexiloxiacarbonil]-fenoxi</p> 	<p>(4) 4-(4-butil-benzoiloxi)-bifenil-4-carboniloxi</p> 
<p>(5) 4-(4-pentil-fenilazo)-fenilcarbamoilo</p> 	<p>(6) 4-(4-dimetilamino-fenilazo)-fenilcarbamoilo</p> 
<p>(7) éster de {4-[5-(4-propil-benzoiloxi)-pirimidin-2-il]-fenilo}</p> 	<p>(8) éster de {4-[2-(4'-metil-bifenil-4-carboniloxi)-1,2-difenil-etoxiacarbonil]-fenilo}</p> 
<p>(9) éster de [4-(1,2-difenil-2-{3-[4-(4-propil-benzoiloxi)-fenil]-acrililoxi}-etoxiacarbonil)-fenil]</p> 	<p>(10) 4-[4-(4-[3-(6-[4-(4-nonil-benzoiloxi)-fenoil]-fenoil)-hexiloxiacarbonil]-propioniloxi)-benzoiloxi]-benzoiloxi]-fenil]-piperazin-1-ilo</p> 

<p>(11) 4-[4-(4-[4-(4-nonil-benzoiloxi)-benzoiloxi]-benzoiloxi)-benzoiloxi]-fenilpiperazin-1-ilo</p> 	<p>(12) 4-(4'-propil-bifenil-4-iletinil)-fenilo</p> 
<p>(13) 4-(4-fluoro-fenoxicarboniloxi)-piperidin-1-ilo</p> 	<p>(14) 2-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxi]-indan-5-il</p> 
<p>(15) 4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-ilo</p> 	<p>(16) 4-(bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-ilo</p> 
<p>(17) 4-(naftalen-2-carboniloxi)-piperidin-1-ilo</p> 	<p>(18) 4-hidroxi-piperidin-1-ilo</p> 

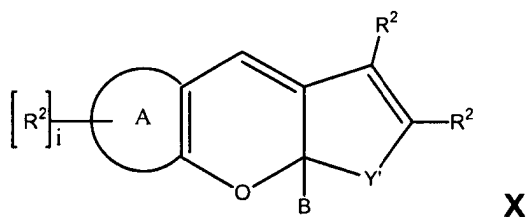
<p>(19) 4-(4-fenilcarbamoil-fenilcarbamoil)-piperidin-1-il</p> 	<p>(20) 4-(4-(4-fenilpiperidin-1-il)-benzoiiox)-piperidin-1-il</p> 
<p>(21) 4-butil[1,1',4',1''terfenil-4-il</p> 	<p>(22) 4-(4-pentadecafluoroheptiioxi-fenilcarbamoil)-benzoiiox</p> 
<p>(23) 4-(3-piperidin-4-il-propil)-piperidin-1-ilo</p> 	<p>(24) 4-(4-[4-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[aj]fenantren-3-iloxicarboniiox]-benzoiiox]-fenoiximetiolo</p> 
<p>(25) 4-[4-(4-ciclohexil-fenilcarbamoil)-benzoiiox]-piperidin-1-il</p> 	<p>(26) 4-[4-(4-ciclohexil-fenilcarbamoil)-benzoiiox]-piperidin-1-il</p> 

<p>(27) N-{4-[(4-pentil-bencilideno)-amino]-fenil}-acetamidilo</p> 	<p>(28) 4-(3-piperidin-4-il-propil)-piperidin-1-ilo</p> 
<p>(29) 4-(4-hexiloxi-benzoilo)-piperidin-1-il]</p> 	<p>(30) 4-(4'-hexiloxi-bifenil-4-carbonilo)-piperidin-1-ilo</p> 
<p>(31) 4-(4-butil-fenilcarbamoil)-piperidin-1-ilo</p> 	<p>(32) éster bis-[1-nombre del PC]-piperidin-4-lico] del ácido bifenil-4,4'-dicarboxílico</p> 
<p>(33) 4-(4-(9-(4-butilfenil)-2,4,8,10-tetraoxaspiro[5.5]undec-3-il)fenil)piperazin-1-ilo</p> 	<p>(34) 4-(6-(4-butilfenil)carbonilo-(4,8-dioxabicyclo[3.3.0]oct-2-il)oxicarbonil)fenil</p> 
<p>(35) 1-(4-[5-(4-butil-fenil)-[1,3]dioxan-2-il]-fenil]-4-metil-piperazin-1-ilo</p> 	<p>(36) 4-(7-(4-propilfenilcarbonilo)bicyclo[3.3.0]oct-2-il)oxicarbonil)fenilo</p> 

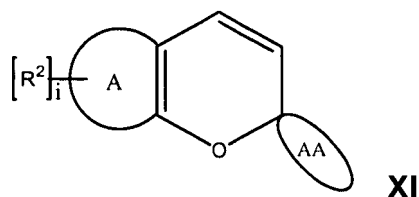
(37) 4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta]fenantren-3-iloxicarboniloxi



La presente invención proporciona un compuesto fotocromico no térmicamente reversible representado por una de Fórmula X y Fórmula XI:

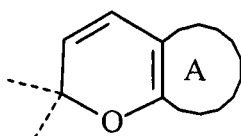


5

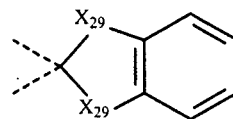


en donde:

- 10 (a) A se selecciona entre nafto, benzo, fenantro, fluoranteno, anteno, quinolino, tieno, furo, indolo, indolino, indeno, benzofuro, benzotieno, tiofeno, nafto indenocondensado, nafto heterociclocondensado y benzo heterociclocondensado;  
 (b) AA es un grupo representado por una de las Fórmulas xv y xvi:



**xv**



**xvi**

15

en donde X<sub>29</sub> se selecciona independientemente en cada ocasión entre -C(R'')(R'')-, -O-, -S- y -N(R'')-, en donde R se selecciona independientemente en cada ocasión entre hidrógeno, un alquilo sustituido o sin sustituir, cicloalquilo, arilalquilo o juntos forman cicloalquilo que está sustituido o sin sustituir; R se selecciona independientemente en cada ocasión entre un alquilo, arilo o arilalquilo que está sin sustituir o sustituido con al menos uno de:

20

- (i) -CH(CN)<sub>2</sub> o -CH(COOX<sub>1</sub>)<sub>2</sub> en donde X<sub>1</sub> es como se ha expuesto anteriormente;  
 (ii) -CH(X<sub>2</sub>)(X<sub>3</sub>), en donde X<sub>2</sub> y X<sub>3</sub> son como se han expuesto anteriormente;  
 (iii) -C(O)X<sub>24</sub>, en donde X<sub>24</sub> es como se ha expuesto anteriormente; y  
 (iv) halógeno, hidroxilo, éster o amina;

25

- (c) Y' se selecciona entre: -(Y<sub>1</sub>)C=C(Y<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(O)(O)- y -N(X<sub>7</sub>)-, en donde Y<sub>1</sub> y Y<sub>2</sub> juntos forman benzo, nafto, fenantro, furo, tieno, benzofuro, benzotieno e indolo; y X<sub>7</sub> es como se ha expuesto anteriormente;  
 (d) B es como se ha expuesto anteriormente;  
 (e) i es un número entero seleccionado entre 0 a 4 y cada R<sup>2</sup> se selecciona independientemente en cada ocasión entre los grupos R<sup>2</sup> expuestos anteriormente;

30

en donde el agente de alargamiento L se selecciona independientemente en cada ocasión de un compuesto representado por la Fórmula I.

35

Además, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, el compuesto fotocromico representado en cualquiera de las Fórmulas X o XI comprende al menos un agente de alargamiento (L) representado por la Fórmula I anterior. Como se ha analizado anteriormente, en la fórmula I, c, d, e, y f se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 1 a 20, ambos incluidos, y d', e' y f' se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de d' + e' + f' sea al menos 1. De acuerdo con otras realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, c, d, e, y f se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 0 a 20, ambos incluidos, y d', e' y f' se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de d' + e' + f' sea al menos 2. De acuerdo con aún otras realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, c, d, e, y f se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 0 a 20, ambos incluidos, y d', e' y f'

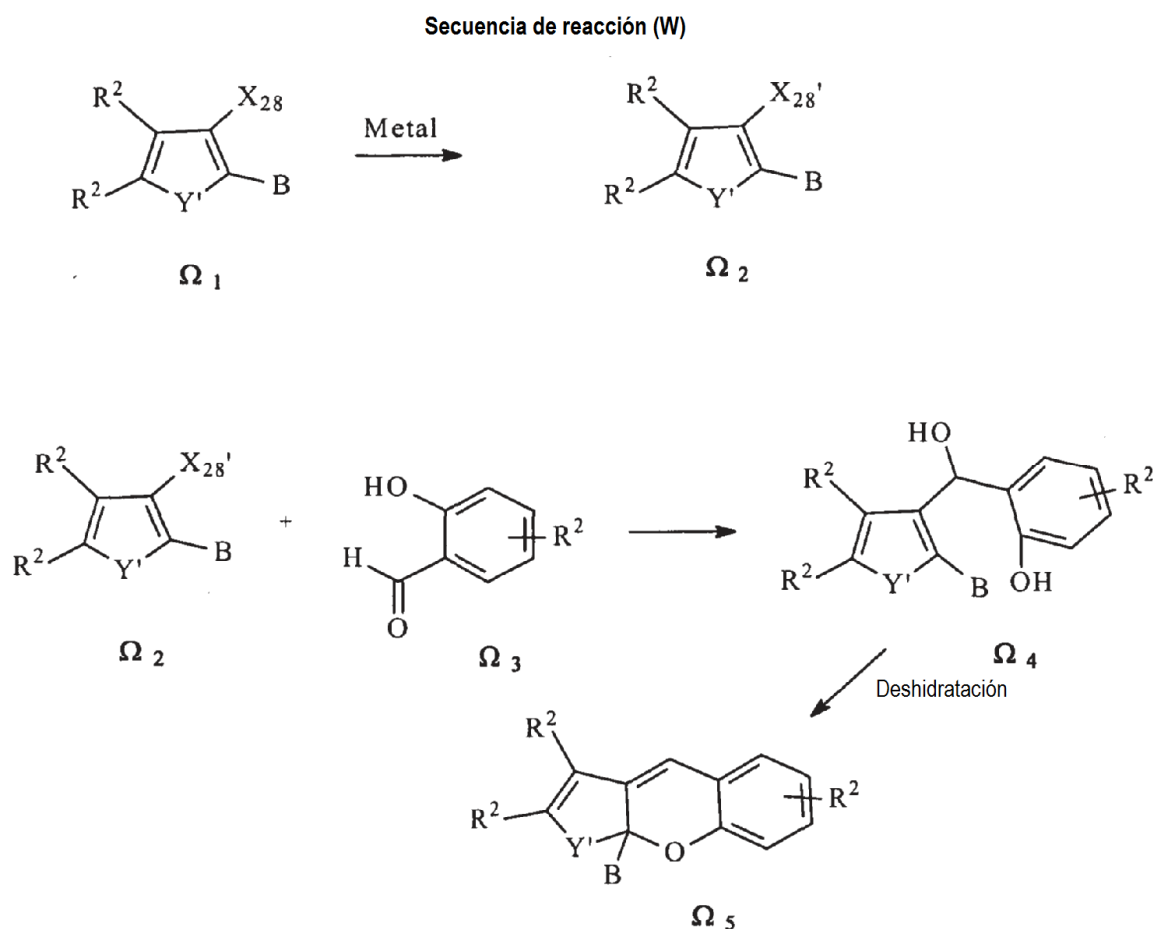
45



se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de  $d' + e' + f$  sea al menos 3. De acuerdo con aún otras realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento,  $c$ ,  $d$ ,  $e$ , y  $f$  se pueden escoger cada uno independientemente de un número entero que varía de 0 a 20, ambos incluidos, y  $d'$ ,  $e'$  y  $f'$  se pueden escoger cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que la suma de  $d' + e' + f$  sea al menos 1.

Por lo tanto, por ejemplo, en cualquiera de las Fórmulas X o XI, "i" puede ser al menos 1 y al menos uno de los grupos  $R^2$  puede ser un agente de alargamiento L. Además o como alternativa, el compuesto fotocromico puede comprender al menos un grupo  $R^2$  que está sustituido con un agente de alargamiento L. Además, aunque de manera no limitante en el presente documento, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, el agente de alargamiento (L) puede unirse a un grupo fotocromico en cualquier posición disponible de manera que L extienda o alargue el grupo fotocromico en un estado activado de manera que la relación de absorción del grupo fotocromico extendido (es decir, el compuesto fotocromico) se potencia en comparación con el grupo fotocromico no extendido. Por lo tanto, por ejemplo y sin limitación, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes en donde el compuesto fotocromico se representa por la Fórmula X, L puede unirse directamente al grupo pirano, por ejemplo, en donde  $i$  es al menos 1 y  $R^2$  es L o puede unirse directamente al grupo pirano, por ejemplo, como un sustituyente en un grupo  $R^2$  o B de forma que L extienda el grupo pirano en un estado activado de forma que la relación de absorción del compuesto fotocromico se aumenta en comparación con el grupo pirano sin extender. Además, por ejemplo y sin limitación, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes en donde el compuesto fotocromico se representa por la Fórmula XI, L puede unirse directamente al grupo pirano, por ejemplo, en donde  $i$  es al menos 1 y  $R^2$  es L o puede unirse directamente al grupo pirano, por ejemplo, como un sustituyente en un grupo  $R^2$  o el grupo AA de manera que L extienda el grupo pirano en un estado activado de manera que la relación de absorción del compuesto fotocromico se aumenta en comparación con el grupo pirano sin extender.

Por ejemplo, aunque de manera no limitante en el presente documento, una secuencia general de reacción para formar un compuesto fotocromico no térmicamente reversible representado por la Fórmula X anterior (en donde A es benzo) es como sigue:



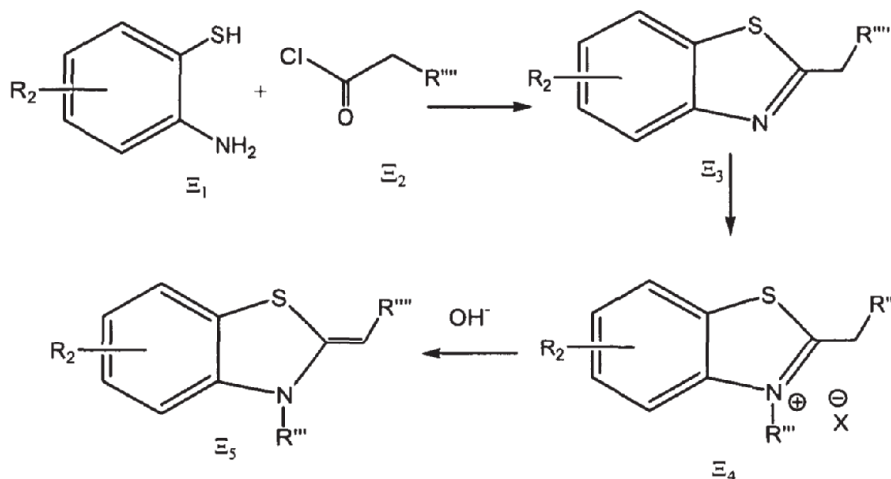
En la Parte 1 de la Secuencia de reacción W,  $X_{28}$  es un halógeno tal como Br, I y Cl; y el metal se selecciona entre Li, Mg, Zn y Sn; y  $X_{28}'$  es una sal metálica, tal como:  $LiX_{28}$ ,  $MgX_{28}$ ,  $ZnX_{28}$  y  $SnX_{28}$ . Además, en la Parte A de la Secuencia de reacción W, el compuesto B y halógeno sustituido representado por la Fórmula  $\Omega_1$  se hace reaccionar con un metal

en una reacción de intercambio de metal-halógeno en un disolvente similar a éter tal como, pero sin limitación, tetrahidrofurano para producir el compuesto metalizado representado por la Fórmula  $\Omega_2$ .

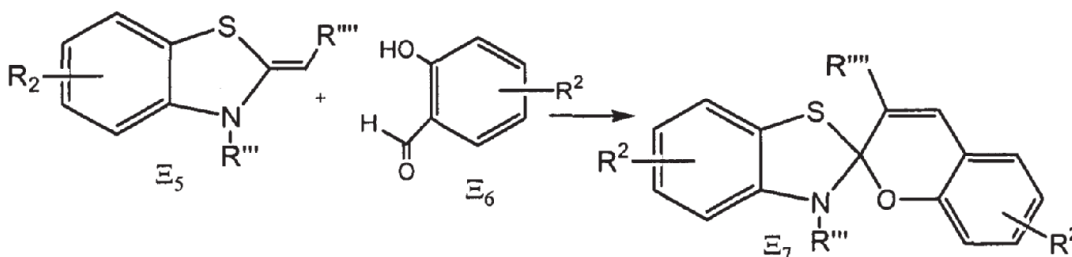
- 5 En la Parte 2 de la Secuencia de reacción W, el compuesto metalizado representado por la Fórmula  $\Omega_2$  se hace reaccionar con un derivado de salicilaldehído sustituido con  $R^2$  (representado por la Fórmula  $\Omega_3$ ) en un disolvente similar a éter (tal como, pero sin limitación, tetrahidrofurano) para producir el compuesto diol representado por la Fórmula  $\Omega_4$ . Posteriormente, el compuesto diol representado por la Fórmula  $\Omega_4$  se deshidrata con agentes de deshidratación, tales como aunque no de forma limitativa, sulfato de magnesio, sulfato sódico,  $P_2O_5$ , tamices moleculares, ácidos p-tolueno sulfónicos para producir el compuesto fotocromico no térmicamente reversible de acuerdo con una realización no limitante desvelada en el presente documento y representada por la Fórmula  $\Omega_5$ .
- 10 Además, como se ha analizado anteriormente con respecto a la Fórmula X, al menos un grupo  $R^2$  en el compuesto fotocromico representado por la Fórmula  $\Omega_5$ , puede ser un agente de alargamiento  $L_1$  o al menos un grupo  $R^2$ , B o Y' puede comprender un grupo que está sustituido con un agente de alargamiento L.
- 15 Por ejemplo, aunque de manera no limitante en el presente documento, una secuencia de reacción general para formar un compuesto fotocromico no térmicamente reversible representado por la Fórmula XI anterior es como sigue:

Secuencia de reacción (X)

Parte 1



Parte 2



- 20 En la Parte 1 de la Secuencia de reacción X, un ortoaminotiofenol representado por la Fórmula  $\Xi_1$  se condensa con un ácido clorhídrico representado por la Fórmula  $\Xi_2$ , en donde  $R'''$  se escoge de hidrógeno, un alquilo sustituido o sin sustituir, cicloalquilo y arilalquilo, en un disolvente tal como, pero sin limitación, cloroformo para formar el derivado benzotiazol representado por la Fórmula  $\Xi_3$ . El derivado benzotiazol representado por la Fórmula  $\Xi_3$  se hace reaccionar con un haluro de alquilo, tosilato o metilsulfonato, con o sin disolventes, para formar la sal cuaternaria de benzotiazolio representada por la Fórmula  $\Xi_4$ . La sal cuaternaria de benzotiazolio representada por la Fórmula  $\Xi_4$  se hace reaccionar después con una base, tal como amina o hidróxido (que se muestra) para dar el derivado de benzotiazolina representado por la Fórmula  $\Xi_5$ .

- 30 En la Parte 2 de la Secuencia de reacción X, el derivado de benzotiazolina representado por la Fórmula  $\Xi_5$  se condensa con un derivado salicilaldehído sustituido con  $R^2$  (representado por la Fórmula  $\Xi_6$ ) para producir el compuesto fotocromico no térmicamente reversible de acuerdo con una realización no limitante desvelada en el presente documento y representada por la Fórmula  $\Xi_7$ . Como se ha analizado anteriormente con respecto a la Fórmula XI

anterior, en el compuesto fotocromico representado por la Fórmula  $\Xi_7$ , al menos un grupo  $R^2$  puede ser un agente de alargamiento L (representado por la Fórmula I anterior) o puede ser un grupo sustituido con un agente de alargamiento L.

5 Otra realización no limitante proporciona un compuesto fotocromico seleccionado entre:

- (a) 3-fenil-3-(4-(4-piperidinopiperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (b) 3-fenil-3-(4-(4-bencilpiperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (c) 3-fenil-3-(4-(4-(3-piperidin-4-il-propil)piperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 10 (d) 3-fenil-3-(4-(4-(3-(1-(2-hidroxi-etil)piperidin-4-il)propil)piperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (e) 3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazina)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (b) 3-fenil-3-(4-(4-bencilpiperazina)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 15 (b) 3-fenil-3-(4-(4-hexiloximetil piperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (h) 3-fenil-3-(4-(4-(4-butirilfenilcarbamoil)-piperidin-1-il)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (i) 3-fenil-3-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (j) 3-fenil-3-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-([1,4']bipiperidinil-1''-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 20 (k) 3-fenil-3-(4-([1,4']bipiperidinil-1'-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-([1,4']bipiperidinil-1'-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (l) 3-fenil-3-(4-([1,4']bipiperidinil-1'-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-bencilpiperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (m) 3-fenil-3-(4-([1,4']bipiperidinil-1'-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(piperadin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 25 (n) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (o) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 30 (p) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexiloxi-benzoiloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (g) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (r) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4'-octiloxi-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 35 (s) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (t) 3-fenil-3-(4-(4-pirrolidinilfenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 40 (u) 3-fenil-3-(4-(1-hidroxipiperidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (v) 3-fenil-3-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 45 (w) 3-fenil-3-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (x) 3-fenil-3-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 50 (y) 3-fenil-3-(4-(4-(bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-4-(4-(bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 55 (z) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarbonil]-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (aa) 3-fenil-3-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperadin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 60 (bb) 3-fenil-3-(4-(4-fluorobenzoiloxi)-piperadin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (cc) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-3-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperadin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 65 (dd) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-hexilbenzoiloxi-piperadin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;

- (ee) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (ff) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarbonil]-piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 5 (gg) 3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)-4-oxo-butanoil)-piperazina-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (hh) 3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-fluorobenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 10 (ii) 3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-bifenilcarboniloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (jj) 3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4'-octiloxi-bifenil-4-carboniloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (kk) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexiloxifenilcarboniloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 15 (ll) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-[17-(1,5-Dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-fenil)-piperidin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (mm) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)-fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 20 (nn) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (oo) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(2-fluorobenzoiloxi)benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 25 (pp) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(4-fluorobenzoiloxi)benzoiloxi)-fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (qq) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (rr) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)-benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 30 (ss) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hexilbenzoiloxi)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (tt) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (uu) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)benzoiloxi)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 35 (vv) 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)-benzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (ww) 3-fenil-3-(4-(4-metoxifenil)-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(3-fenilprop-2-inoiloxi)fenil)piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 40 (xx) 3-fenil-3-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenilpiperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (yy) 3-fenil-3-(4-(4'-octiloxibifenil-4-carboniloxi)-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(fenil)-piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (zz) 3-fenil-3-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(3-(4-hexilbenzoiloxifenil)piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 45 (aaa) 3-(4-metoxifenil)-3-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)fenil)-13-etil-13-hidroxi-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (bbb) 3-fenil-3-{4-(pirrolidin-1-il)fenil}-13-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxi]-13-etil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 50 (ccc) 3-fenil-3-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il)-fenil)-13-etil-13-hidroxi-6-metoxi-7-{4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- 55 (ddd) 3-fenil-3-{4-(pirrolidin-1-il)fenil}-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(3-fenil-3-{4-(pirrolidin-1-il)fenil}-13,13-dimetil-6-metoxi-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano-7-il)-piperadin-1-il)oxicarbonil)fenil)fenil)caboniloxi)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;
- (eee) 3-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-3-fenil-7-metoxicarbonil-3H-nafto[2,1-b]pirano;
- 60 (fff) 3-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-3-fenil-7-hidroxicarbonil-3H-nafto[2,1-b]pirano;
- (ggg) 3-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-3-fenil-7-(4-fenil-(fen-1-oxi)carbonil)-3H-nafto[2,1-b]pirano;
- (hhh) 3-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-3-fenil-7-(N-(4-(4-dimetilamino)fenil)diazenil)fenil)carbamoil-3H-nafto[2,1-b]pirano;
- (iii) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-benzofuro[3',2':7,8]benzo[b]pirano;
- 65 (jjj) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-benzotieno[3',2':7,8]benzo[b]pirano;
- (kkk) 7-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-

- ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi}-2-fenil-2-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-6-metoxicarbonil-2H-benzo[b]pirano;  
 (lll) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-9-hidroxi-8-metoxicarbonil-2H-nafto[1,2-b]pirano;  
 (mmm) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-9-hidroxi-8-(N-(4-butil-fenil))carbamoil-2H-nafto[1,2-b]pirano;  
 5 (nnn) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-9-hidroxi-8-(N-(4-fenil)fenil)carbamoil-2H-nafto[1,2-b]pirano;  
 (ooo) 1,3,3-trimetil-6'-(4-etoxicarbonil)-piperidin-1-il)-espiro[indoline-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 (ppp) 1,3,3-trimetil-6'-(4-[N-(4-butilfenil)carbamoil]-piperidin-1-il)-espiro[indoline-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 (qqq) 1,3,3-trimetil-6'-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)-espiro[indoline-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 10 (rrr) 1,3,3-trimetil-6'-(4-(4-hidroxifenil)piperazin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 (sss) 1,3,3,5,6-pentametil-7'-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-y)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 (ttt) 1,3-dietil-3-metil-5-metoxi-6'-(4-(4'-Hexiloxi-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 (uuu) 1,3-dietil-3-metil-5-[4-(4-pentadecafluoroheptiloxi-fenilcarbamoil)-benziloxi]-6'-(4-(4'-hexiloxi-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 15 (vvv) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-5-carbometoxi-8-(N-(4-fenil)fenil)carbamoil-2H-nafto[1,2-b]pirano;  
 (www) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-5-carbometoxi-8-(N-(4-fenil)fenil)carbamoil-2H-fluoanteno[1,2-b]pirano;  
 20 (xxx) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-5-carbometoxi-11-(4-{17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi}fenil)-2H-fluoanteno[1,2-b]pirano;  
 (yyy) 1-(4-carboxibutil)-6-(4-(4-propilfenil)carboniloxi)fenil)-3,3-dimetil-6'-(4-etoxicarbonil)-piperidin-1-il)-espiro[(1,2-dihidro-9H-dioxolano[4',5':6,7]indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 25 (zzz) 1-(4-carboxibutil)-6-(4-(4-propilfenil)carboniloxi)fenil)-3,3-dimetil-7'-(4-etoxicarbonil)-piperidin-1-il)-espiro[(1,2-dihidro-9H-dioxolano[4',5':6,7]indolina-2,3'-3H-nafto[1,2-b][1,4]oxazina];  
 (aaaa) 1,3-dietil-3-metil-5-(4-{17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi}fenil)-6'-(4-(4'-hexiloxi-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina];  
 30 (bbbb) 1-butil-3-etil-3-metil-5-metoxi-7'-(4-(4'-Hexiloxi-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[1,2-b][1,4]oxazina];  
 (cccc) 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-5-metoxicarbonil-6-metil-2H-9-(4-(4-propilfenil)carboniloxi)fenil)(1,2-dihidro-9H-dioxolano[4',5':6,7]nafto[1,2-b]pirano;  
 (dddd) 3-(4-metoxifenil)-3-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)fenil)-13-etil-13-hidroxi-6-metoxi-7-(4-(4-propilfenil)carboniloxi)fenil)-[1,2-dihidro-9H-dioxolano[4',5':6,7]]indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 35 (eeee) 3-fenil-3-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)fenil)-13-etil-13-hidroxi-6-metoxi-7-(4-(4-hexilfenil)carboniloxi)fenil)-[1,2-dihidro-9H-dioxolano[4',5':5,6]]indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;  
 (ffff) 4-(4-((4-ciclohexilideno-1-etil-2,5-dioxopirrolin-3-ilideno)etil)-2-tienil)fenil-(4-propil)benzoato;  
 40 (gggg) 4-(4-((4-adamantan-2-ilideno-1-(4-(4-hexilfenil)carboniloxi)fenil)-2,5-dioxopirrolin-3-ilideno)etil)-2-tienil)fenil-(4-propil)benzoato;  
 (hhhh) 4-(4-((4-adamantan-2-ilideno-2,5-dioxo-1-(4-(4-(4-propilfenil)piperazinil)fenil)pirrolin-3-ilideno)etil)-2-tienil)fenil (4-propil)benzoato;  
 (iiii) 4-(4-((4-adamantan-2-ilideno-2,5-dioxo-1-(4-(4-(4-propilfenil)piperazinil)fenil)pirrolin-3-ilideno)etil)-1-metilpirrol-2-il)fenil (4-propil)benzoato;  
 45 (jjjj) 4-(4-((4-adamantan-2-ilideno-2,5-dioxo-1-(4-{17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi}fenil)pirrolin-3-ilideno)etil)-1-metilpirrol-2-il)fenil (4-propil)benzoato;  
 (kkkk) 4-(4-metil-5,7-dioxo-6-(4-(4-(4-propilfenil)piperazinil)fenil)espiro[8,7a-dihidrotiafeno[4,5-f]isoindole-8,2'-adamantano]-2-il)fenil (4-propil) fenil benzoato;  
 50 (llll) N-(4-{17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi}fenil-6,7-dihidro-4-metil-2-fenilespiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimide-7,2-triciclo[3.3.1]decano);  
 (mmmm) N-cianometil-6,7-dihidro-2-(4-(4-(4-propilfenil)piperazinil)fenil)-4-metilespiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimide-7,2-triciclo[3.3.1]decano);  
 55 (nnnn) N-feniletil-6,7-dihidro-2-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)fenil-4-metilespiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimide-7,2-triciclo[3.3.1]decano);  
 (oooo) N-feniletil-6,7-dihidro-2-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)fenil-4-ciclopropilespiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimide-7,2-triciclo[3.3.1]decano);  
 (pppp) N-feniletil-6,7-dihidro-2-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)fenil-4-ciclopropilespiro(5,6-benzo[b]furodicarboxiimide-7,2-triciclo[3.3.1]decano);  
 60 (qqqq) N-cianometil-6,7-dihidro-4-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)fenil-2-fenilespiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimide-7,2-triciclo[3.3.1]decano);  
 (rrrr) N-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarbonil-6,7-dihidro-2-(4-metoxifenil)fenil-4-metilespiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimida-7,2-triciclo[3.3.1]decano);  
 65 (ssss) N-cianometil-2-(4-(6-(4-butilfenil)carboniloxi-(4,8-dioxabicciclo[3.3.0]oct-2-il))oxicarbonil)fenil-6,7-dihidro-4-

ciclopropilspiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimida-7,2-triciclo[3.3.1.1]decano);  
 (tttt) 6,7-dihidro-N-metoxicarbonilmetil-4-(4-(6-(4-butilfenil)carboniloxi-(4,8-dioxabicyclo[3.3.0]oct-2-  
 il))oxicarbonil)fenil-2-fenilspiro(5,6-benzo[b]tiofenedicarboxiimida-7,2-triciclo[3.3.1.1]decano);  
 (uuuu) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(6-(4-(4-(4-  
 5 nonilfenilcaboniloxi)fenil)oxicarbonil)fenoxi)hexiloxi)benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indenol[2',3':3,4]nafto[1,2-  
 b]pirano; y  
 (vvvv) 3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(6-(4-(4-(4-  
 10 nonilfenilcaboniloxi)fenil)oxicarbonil)fenoxi)hexiloxi)benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indenol[2',3':3,4]nafto[1,2-  
 b]pirano; y  
 (wwww) 3-fenil-3-(4-pirrolidinilfenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(6-(4-(4-(4-  
 15 nonilfenilcaboniloxi)fenil)oxicarbonil)fenoxi)hexiloxi)fenil)piperazin-1-il)indenol[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

Los compuestos fotocromicos térmicamente reversibles de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes  
 15 desveladas en el presente documento puede usarse en diversas aplicaciones para proporcionar propiedades  
 fotocromicas y/o dicroicas.

Una realización no limitante proporciona un artículo fotocromico que comprende un material hospedador orgánico y  
 una cantidad fotocromica del compuesto fotocromico que comprende al menos un grupo fotocromico seleccionado  
 20 entre piranos, oxazinas y fúlgidos; y (b) al menos un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I y unido  
 al al menos un grupo fotocromico, conectado a al menos una parte del material hospedador orgánico. Como se usa  
 en el presente documento, el término "conectado a" significa en contacto directo con un objeto o contacto indirecto  
 con un objeto a través de una o más estructuras o materiales diferentes, al menos uno de los cuales está en contacto  
 25 directo con el objeto. Además, de acuerdo con esta realización no limitante, el compuesto fotocromico puede  
 conectarse a al menos una parte del material hospedador por incorporación en el material hospedador o por aplicación  
 sobre el material hospedador, por ejemplo, como parte de un revestimiento o capa.

Los ejemplos no limitantes de materiales hospedadores orgánicos que pueden usarse junto con diversas realizaciones  
 no limitantes desveladas en el presente documento incluyen materiales poliméricos, por ejemplo, homopolímeros y  
 30 copolímeros, preparados a partir de los monómeros y mezclas de monómeros desvelados en la patente de los Estados  
 Unidos 5.962.617 y en la patente de los Estados Unidos 5.658.501 desde la columna 15, línea 28 a columna 16, línea  
 17. Por ejemplo, dichos materiales poliméricos pueden ser materiales poliméricos termoplásticos o termoestables,  
 pueden ser transparentes u ópticamente transparentes y pueden tener cualquier índice de refracción requerido. Los  
 ejemplos no limitantes de dichos monómeros y polímeros desvelados incluyen: monómeros de poliol(alil carbonato),  
 35 por ejemplo, carbonatos de alil diglicol tales como bis(alil carbonato) de dietilenglicol, cuyo monómero se comercializa  
 con el nombre comercial CR-39 de PPG Industries, Inc.; polímeros de poliurea-poliuretano (poliurea-uretano), que se  
 preparan, por ejemplo, por la reacción de un prepolímero de poliuretano y un agente de curación de diamina, una  
 composición para dicho polímero se comercializa con la marca comercial TRIVEX de PPG Industries, Inc.; monómero  
 de carbonato terminado con poliol(met)acrilolilo; monómeros de dimetacrilato de dietilenglicol; monómeros de  
 40 metacrilato de fenol etoxilado; monómeros de diisopropenil benceno; monómeros de triacrilato de propano trimetilol  
 etoxilado; monómeros de bismetacrilato de etilenglicol; monómeros de bismetacrilato de poli(etilenglicol); monómeros  
 de acrilato de uretano; poli(dimetilacrilato de bisfenol A etoxilado); poli(acetato de vinilo); poli(alcohol de vinilo);  
 poli(cloruro de vinilo); poli(cloruro de vinilideno); polietileno; polipropileno; poliuretanos; politiuretanos; policarbonatos  
 45 termoplásticos, tales como resina unida a carbonato derivada de bisfenol A y fosgeno, comercializándose uno de  
 dichos materiales con el nombre comercial LEXAN; poliésteres, tales como el material comercializado con el nombre  
 comercial MYIAR; tereftalato de poli(etileno); polivinil butiral; metacrilato de poli(metilo), tal como el material  
 comercializado con el nombre comercial PLEXIGLAS y los polímeros preparados por reacción de isocianatos  
 polifuncionales con politioles o monómeros de poliepisulfuro, ya sea homopolimerizados o co y/o terpolimerizados con  
 50 politioles, poliisocianatos, poliisotiocianatos y monómeros opcionalmente etilénicamente insaturados o monómeros de  
 vinilo que contienen halogenados aromáticos. También se contemplan copolímeros de dichos monómeros y mezclas  
 de los polímeros y copolímeros descritos con otros polímeros, por ejemplo, para formar copolímeros en bloque o  
 productos de red interpenetrantes.

De acuerdo con una realización no limitante específica, el material hospedador orgánico se selecciona entre  
 poliacrilatos, polimetacrilatos, polimetacrilatos de alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), polioxi(metacrilatos de alquilenol), poli(metacrilatos  
 55 de fenol alcoxilado), acetato de celulosa, triacetato de celulosa, propionato acetato de celulosa, butirato acetato de  
 celulosa, poli(acetato de vinilo), poli(alcohol de vinilo), poli(cloruro de vinilo), poli(cloruro de vinilideno),  
 poli(vinilpirrolidona), poli((met)acrilamida), poli(dimetil acrilamida), poli(metacrilato de hidroxietilo), poli(ácido  
 (met)acrilico), policarbonatos termoplásticos, poliésteres, poliuretanos, politiuretanos, poli(tereftalato de etileno),  
 60 poliestireno, poli(alfa metilestireno), copoli(metilmecacrilato de estireno), copoli(estireno acrilonitrilo), polivinilbutiral y  
 polímeros de miembros del grupo que consiste en monómeros poliol(alil carbonato), monómeros monofuncionales de  
 acrilato, monómeros monofuncionales de metacrilato, monómeros polifuncionales de acrilato, monómeros  
 polifuncionales de metacrilato, monómeros de dimetacrilato de dietilenglicol, monómeros de diisopropenil benceno,  
 monómeros de alcohol polihídrico alcoxilados y monómeros de dialilideno pentaeritritol.  
 De acuerdo con otra realización no limitante específica, el material hospedador orgánico es un homopolímero o un  
 65 copolímero de un monómero o monómeros seleccionados entre acrilatos, metacrilatos, metacrilato de metilo, bis-  
 metacrilato de etilenglicol, dimetacrilato de bisfenol A etoxilado, acetato de vinilo, vinilbutiral, uretano, tiuretano, bis(alil

carbonato) de dietilenglicol, dimetacrilato de dietilenglicol, diisopropenil benceno y triacrilato de trimetilol propano etoxilado.

Además, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento, el material  
 5 hospedador orgánico puede formar un elemento óptico o una parte del mismo. Los ejemplos no limitantes elementos  
 ópticos incluyen elementos oftálmicos, elementos de visualización, ventanas y espejos. Como se usa en el presente  
 documento, el término "óptico" significa que pertenece o está asociado con la luz y/o la visión. Por ejemplo, aunque  
 de manera no limitante en el presente documento, de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes, el elemento o  
 10 dispositivo óptico puede seleccionarse entre elementos y dispositivos oftálmicos, elementos y dispositivos de  
 visualización, ventanas, espejos y elementos y dispositivos pasivos de celdas de cristal líquido.

Como se usa en el presente documento, el término "oftálmico" significa que pertenece o está asociado con el ojo y la  
 visión. Los ejemplos no limitantes de elementos oftálmicos incluyen lentes correctivas y no correctivas, incluyendo las  
 15 lentes de visión sencilla o de visión múltiple, que pueden ser lentes de visión múltiple segmentadas o no segmentadas  
 (tales como, pero sin limitación, lentes bifocales, lentes trifocales y lentes progresivas), así como otros elementos  
 usados para corregir, proteger o mejorar (cosméticamente o de otro modo) la visión, incluyendo sin limitación, lentes  
 de contacto, lentes intraoculares, lentes de aumento y lentes o visores protectores. Como se usa en el presente  
 documento el término "visualización" significa la representación visible o legible por máquinas de la información en  
 20 palabras, números, símbolos, diseños o dibujos. Los ejemplos no limitantes de elementos y dispositivos de  
 visualización incluyen pantallas, monitores y elementos de seguridad, incluyendo sin limitación, marcas de seguridad  
 y marcas de autenticación. Como se usa en el presente documento, el término "ventana" significa una abertura para  
 permitir la transmisión de radiación a través de la misma. Los ejemplos no limitantes de ventanas incluyen  
 transparencias para automóviles y para aeronaves, filtros, obturadores, e interruptores ópticos. Como se usa en el  
 presente documento, el término "espejo" significa una superficie que refleja de forma especular una gran fracción de  
 25 luz incidente.

Por ejemplo, en una realización no limitante, el material hospedador orgánico es un elemento oftálmico y más  
 particularmente, es una lente oftálmica.

Además, se contempla que los compuestos fotocromáticos desvelados en el presente documento puedan usarse solos  
 30 o junto con al menos otro compuesto fotocromático orgánico complementario que tiene al menos una absorción máxima  
 activada dentro del intervalo de 300 nm a 1000 nm, ambos incluidos (o sustancias que lo contengan). Por ejemplo, el  
 compuesto fotocromático desvelado en el presente documento puede combinarse con al menos otro compuesto  
 fotocromático orgánico de manera que la combinación del compuesto fotocromático, cuando se activa, muestra un tono  
 35 deseado. Ejemplos no limitantes de compuestos fotocromáticos orgánicos convencionales incluyen los piranos  
 fotocromáticos, oxazinas, fúlgidos y fulgimidas indicados anteriormente. Otros compuestos fotocromáticos  
 complementarios incluyen, por ejemplo, ditizonatos metálicos fotocromáticos, por ejemplo ditizonato de mercurio, que  
 se describen en la patente de los Estados Unidos n.º 3.361.706.

Por ejemplo, se contempla que los compuestos fotocromáticos desvelados en el presente documento puedan usarse  
 40 solos o junto con otro compuesto fotocromático orgánico convencional (como se ha analizado anteriormente), en  
 cantidades o proporciones tales que el material hospedador orgánico en el cual se incorporan los compuestos  
 fotocromáticos, o sobre el cual se aplican los materiales hospedadores orgánicos, puede mostrar un color o colores  
 deseados, ya se encuentre en un estado activado o en un estado "blanqueado". De este modo, la cantidad de  
 45 compuestos fotocromáticos usados no es crítica siempre que esté presente una cantidad suficiente para producir el  
 efecto fotocromático deseado. Como se usa en el presente documento, la expresión "cantidad fotocromática" se refiere a  
 la cantidad del compuesto fotocromático necesaria para producir el efecto fotocromático deseado.

Otra realización no limitante proporciona un artículo fotocromático que comprende un sustrato y un revestimiento al  
 50 menos parcial de una composición de revestimiento que tiene una cantidad fotocromática de un compuesto fotocromático  
 que comprende (a) al menos un grupo fotocromático seleccionado entre piranos, oxazinas y fúlgidos; y (b) al menos un  
 agente de alargamiento L representado por la Fórmula I y unido al al menos un grupo fotocromático, conectado con al  
 menos una porción de al menos una superficie del mismo del sustrato. Además, aunque de manera no limitante en el  
 presente documento, al menos una porción del revestimiento al menos parcial puede estar al menos parcialmente  
 55 configurado. Como se usa en el presente documento, el término "configurado" significa fijado en una orientación  
 deseada.

Por ejemplo, de acuerdo con la realización no limitante anteriormente mencionada, la composición de revestimiento  
 puede seleccionarse entre, sin limitación, composiciones de revestimiento poliméricas, pinturas y tintas. Además,  
 60 además de los compuestos fotocromáticos desvelados en el presente documento, las composiciones de revestimiento  
 de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes pueden comprender además al menos otros compuestos  
 fotocromáticos orgánicos convencionales que tienen al menos un máximo de absorción activado dentro del intervalo de  
 300 nm a 1000 nm, ambos incluidos.

Los ejemplos no limitantes de sustratos adecuados a los que se puede aplicar la composición de revestimiento que  
 65 comprende la cantidad fotocromática de los compuestos fotocromáticos incluyen vidrio, mampostería, tejidos, cerámicas,  
 metales, madera, papel y materiales orgánicos poliméricos. Los ejemplos no limitantes de materiales orgánicos

poliméricos adecuados se han expuesto anteriormente.

Otras realizaciones no limitantes más proporcionan elementos ópticos que comprenden un sustrato y un revestimiento al menos parcial que comprende al menos un compuesto fotocromático que comprende (a) al menos un grupo fotocromático seleccionado entre piranos, oxazinas y fúlgidos; y (b) al menos un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I y unido al al menos un grupo fotocromático, conectado a al menos una porción del sustrato. Los ejemplos no limitantes de elementos ópticos incluyen, elementos oftálmicos, elementos de visualización, ventanas y espejos. Por ejemplo, de acuerdo con una realización no limitante, el elemento óptico es un elemento oftálmico y el sustrato es un sustrato oftálmico seleccionados entre lentes correctoras y no correctoras, lentes parcialmente formadas y preformas de lentes.

Aunque sin limitarse al presente documento, los elementos ópticos de acuerdo con diversas realizaciones no limitantes desveladas en el presente documento pueden comprender cualquier cantidad del compuesto fotocromático necesaria para conseguir las propiedades ópticas deseadas, tales como aunque no de forma limitativa, propiedades fotocromáticas y propiedades dicroicas.

Otros ejemplos no limitantes de sustratos que son adecuados para su uso junto con las realizaciones no limitantes anteriores incluyen sustratos no teñidos, sustratos teñidos, sustratos fotocromáticos, sustratos fotocromáticos teñidos, sustratos de polarización lineal, sustratos de polarización circular, sustratos de polarización elíptica y sustratos reflectantes. Como se usa en el presente documento en referencia a los sustratos el término "no teñido" significa sustratos que están esencialmente libres de adiciones de agentes colorantes (tales como, pero sin limitación, tintes convencionales) y que tienen un espectro de absorción para radiación visible que no varía significativamente en respuesta a radiación actínica. Además, en referencia a los sustratos, el término "teñido" significa sustratos que tienen un agente colorante añadido (tal como, pero sin limitación, tintes convencionales) y un espectro de absorción para radiación visible que no varía significativamente en respuesta a radiación actínica.

Como se usa en el presente documento el término "polarización lineal", en referencia a sustratos, se refiere a sustratos que están adaptados para polarizar linealmente la radiación (es decir, confinar las vibraciones del vector eléctrico de ondas de luz en una dirección). Como se usa en el presente documento el término "polarización circular" en referencia a los sustratos se refiere a sustratos que están adaptados para polarizar circularmente la radiación. Como se usa en el presente documento el término "polarización elíptica" en referencia a sustratos se refiere a sustratos que están adaptados para polarizar elípticamente la radiación. Como se usa en el presente documento con el término "fotocromático", en referencia a sustratos, se refiere a sustratos que tienen un espectro de absorción para radiación visible que varía en respuesta a al menos radiación actínica y que es reversible térmicamente. Además, como se usa en el presente documento en referencia a sustratos, la expresión "fotocromáticamente teñido" significa sustratos que contienen un agente colorante añadido así como un compuesto fotocromático y que tienen un espectro de absorción para radiación visible que varía en respuesta a al menos radiación actínica y es reversible térmicamente. Por lo tanto, por ejemplo, en una realización no limitante, el sustrato fotocromático teñido puede tener un primer color característico del agente colorante y un segundo color característico de la combinación del agente colorante y el compuesto fotocromático cuando se expone a radiación actínica.

Una realización no limitante específica proporciona un elemento óptico que comprende un sustrato y un revestimiento al menos parcial que comprende al menos un compuesto fotocromático que comprende (a) al menos un grupo fotocromático seleccionado entre piranos, oxazinas y fúlgidos; y (b) al menos un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I y unido al al menos un grupo fotocromático conectado a al menos una porción del sustrato. Además, de acuerdo con esta realización no limitante, el al menos un compuesto fotocromático reversible térmicamente puede ser un compuesto dicroico fotocromático que tiene una relación de absorción promedio mayor de 2,3 en un estado activado según se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA.

Tal como se ha analizado anteriormente, los elementos ópticos de acuerdo con distintas realización no limitantes desveladas en el presente documento pueden ser elementos de visualización, tal como, pero sin limitación, pantallas, monitores y elementos de seguridad. Por ejemplo, una realización no limitante proporciona un elemento de visualización que comprende un primer sustrato que tiene una primera superficie, un segundo sustrato que tiene una segunda superficie, en donde la segunda superficie del segundo sustrato está em frente y separada de la primera superficie del primer sustrato de tal forma que se define un espacio; y un material fluido que comprende al menos un compuesto fotocromático que comprende a) al menos un grupo fotocromático seleccionado entre piranos, oxazinas y fúlgidos; y (b) al menos un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I y unido al al menos un grupo fotocromático situado dentro del hueco definido entre la primera superficie del primer sustrato y la segunda superficie del segundo sustrato. Además, el al menos un compuesto fotocromático puede ser un compuesto fotocromático dicroico que tiene una relación de absorción promedio mayor de 2,3 en un estado activado según se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA.

Además, de acuerdo con esta realización no limitante, los sustratos primero y segundo pueden seleccionarse independientemente entre sustratos no teñidos, sustratos teñidos, sustratos fotocromáticos, sustratos fotocromáticos teñidos, sustratos de polarización lineal, sustratos de polarización circular, sustratos de polarización elíptica y sustratos reflectantes.



- Otra realización no limitante proporciona un elemento de seguridad que comprende un sustrato y al menos un compuesto fotocromico que comprende (a) al menos un grupo fotocromico seleccionado entre piranos, oxazinas y fúlgidos; y (b) al menos un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I y unido al al menos un grupo fotocromico conectado a al menos una porción del sustrato. Los ejemplos no limitantes de elementos de seguridad incluyen marcas de seguridad y marcas de autentificación que se conectan a al menos una porción del sustrato, tales como y sin limitación: tarjetas de acceso y pases, por ejemplo, entradas, insignias, tarjetas de identificación o membresía, tarjetas de débito, etc.; instrumentos negociables e instrumentos no negociables, por ejemplo, letras de cambio, cheques, bonos, billetes, certificados de depósito, certificados de acciones, etc.; documentos gubernamentales, por ejemplo, monedas, licencias, tarjetas de identificación, tarjetas de beneficio, visados, pasaportes, certificados oficiales, escrituras, etc.; bienes de consumo, por ejemplo, software, discos compactos ("CD"), discos de video digital ("DVD"), accesorios, electrónica de consumo, artículos deportivos, coches, etc.; tarjetas de crédito; y etiquetas para mercancías, etiquetas y envases.
- Aunque sin limitarse al presente documento, de acuerdo con esta realización no limitante, el elemento de seguridad puede conectarse a al menos una porción de un sustrato seleccionado entre un sustrato transparente y un sustrato reflectante. Como alternativa, de acuerdo con ciertas realizaciones no limitantes en donde se requiere un sustrato reflectante, si el sustrato no es reflectante o suficientemente reflectante para la aplicación prevista, puede aplicarse primero un material reflectante a al menos una porción del sustrato antes de que la marca de seguridad se aplique al mismo. Por ejemplo, puede aplicarse un revestimiento de aluminio reflectante a la al menos una porción del sustrato antes de la formación del elemento de seguridad sobre el mismo. Más aún, el elemento de seguridad puede conectarse a al menos una porción de un sustrato seleccionado entre sustratos no teñidos, sustratos teñidos, sustratos fotocromicos, sustratos fotocromicos teñidos, sustratos de polarización lineal, sustratos de polarización circular y sustratos de polarización elíptica.
- Además, de acuerdo con la realización no limitante anteriormente mencionada, el al menos compuesto fotocromico puede ser un compuesto fotocromico dicroico térmicamente reversible que tiene una relación de absorción promedio mayor de 2,3 en el estado activado según se determina de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA.
- Además, el elemento de seguridad de acuerdo con la realización no limitante anteriormente mencionada comprende uno o más revestimientos adicionales o láminas para formar un elemento de seguridad reflectante multicapa con características dependientes del ángulo de visión según se describe en la patente de los Estados Unidos 6.641.874.
- Los artículos fotocromicos y los elementos ópticos descritos anteriormente pueden formarse por métodos conocidos en la técnica. Aunque sin limitarse al presente documento, se contempla que los compuestos fotocromicos desvelados en el presente documento pueden conectarse a un sustrato u hospedador por incorporación en el material hospedador o aplicación sobre el hospedador o sustrato, tal como en forma de un revestimiento.
- Por ejemplo, el compuesto fotocromico dicroico puede incorporarse en un material hospedador orgánico por disolución o dispersión del compuesto fotocromico dentro del material hospedador, por ejemplo, fundición *in situ* añadiendo el compuesto fotocromico al material hospedador monomérico antes de la polimerización, embebiendo el compuesto fotocromico dentro del material hospedador por inmersión del material hospedador en una solución caliente del compuesto fotocromico o por transferencia térmica. Como se usa en el presente documento el término "embeber" incluye la permeación del compuesto fotocromico solo en el material hospedador, la transferencia asistida por solvente del compuesto fotocromico en un polímero poroso, la transferencia de fase de vapor y otros métodos de transferencia.
- Además, el compuesto fotocromico desvelado en el presente documento puede aplicarse al material hospedador orgánico u otro sustrato como parte de una composición de revestimiento (como se ha analizado) o una lámina que comprende un compuesto fotocromico. Como se usa en el presente documento el término "revestimiento" significa una película de soporte derivada de una composición fluida, que puede tener o no un espesor uniforme. Como se usa en el presente documento, el término "lámina" significa una película preformada que tiene un espesor generalmente uniforme y capaz de autosustentarse.
- Los métodos no limitantes de aplicación de composiciones de revestimiento que comprenden los compuestos fotocromicos desvelados en el presente documento incluyen los métodos conocidos en la técnica para aplicar revestimientos, tal como, revestimiento por centrifugado, revestimiento por pulverización, revestimiento por pulverización y centrifugado, recubrimiento con cortina, recubrimiento de flujo, revestimiento por inmersión, moldeo por inyección, fundición, revestimiento con rodillo, revestimiento con alambre y sobremoldeado. De acuerdo con una realización no limitante, se aplica un revestimiento que comprende el compuesto fotocromico a un molde y el sustrato se forma sobre la superficie del revestimiento (es decir sobremoldeado). Además, o como alternativa, primero puede aplicarse una composición de revestimiento sin el compuesto fotocromico al sustrato o material hospedador orgánico usando cualquiera de las técnicas anteriormente mencionadas y posteriormente embeberse con el compuesto fotocromico como se ha descrito anteriormente.
- Los métodos no limitantes para la aplicación de láminas que comprenden el compuesto fotocromico desvelado en el presente documento a un sustrato incluyen, por ejemplo, al menos uno de: laminación, fusión, fundición en molde y

unión adhesiva de la lámina polimérica a la al menos una porción del sustrato. Como se usa en el presente documento, la fundición en molde incluye diversas técnicas de fundición, tales como, pero sin limitación: sobremoldeado, en donde la lámina se coloca en un molde y el sustrato se forma (por ejemplo por fundición) sobre al menos una porción del sustrato; y moldeo por inyección, en donde el sustrato se forma alrededor de la lámina. Además, se contempla que el compuesto fotocromático puede aplicarse a la lámina como un revestimiento, incorporado en la lámina por embebimiento o por otros métodos adecuados, ya sea antes o después de aplicar la lámina al sustrato.

Además, tal como se ha analizado anteriormente, los compuestos fotocromáticos desvelados en el presente documento pueden incorporarse o aplicarse solos o en combinación con al menos otro compuesto fotocromático orgánico convencional, el cual también puede aplicarse o incorporarse en los materiales hospedadores y sustratos tal como se ha descrito anteriormente.

### Ejemplos

Diversas realizaciones desveladas en el presente documento se ilustrarán ahora en los siguientes ejemplos no limitantes.

#### Ejemplo 1

##### Etapa 1

Se le añadieron 4-fluorobenzofenona (64,5 g) y dimetilsulfóxido anhidro (DMSO) (200 ml) a un matraz de reacción en una atmósfera de nitrógeno. Se añadió 1-fenilpiperazina (36,2 g) y la suspensión se calentó a 180 °C. Después de 2 horas, se retiró el calor y la mezcla se vertió en 4 litros de agua. El precipitado se recogió por filtración al vacío, se lavó con agua, se secó al vacío y se recristalizó en acetona/metanol. Los datos de la CG/EM mostraron que el producto resultante (55 g, 89 % de rendimiento), recuperado en forma de cristales de color blanquecino, tiene una estructura consistente con 4-(4-fenilpiperazin-1-il)benzofenona.

##### Etapa 2

Se le añadieron 4-(4-fenilpiperazin-1-il)benzofenona (55 g) de la Etapa 1 y dimetilformamida (DMF) (300 ml, saturado con acetileno) a un matraz de reacción. Se añadió una suspensión de acetiluro de sodio (64 g de una suspensión del 18 por ciento en tolueno, obtenida por Aldrich) a la mezcla con agitación. Después de 20 minutos, la reacción se vertió en una mezcla agitada de agua desionizada (3 l) y hexanos (500 ml). El sólido formado se recogió por filtración al vacío y se secó al vacío. Un espectro RMN mostró que el producto final (59 g, 99,7 % de rendimiento), un polvo de color blanquecino, tenía una estructura consistente con 1-fenil-1-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil-prop-2-in-1-ol.

##### Etapa 3

Se añadieron N-fenilpiperazina (31,3 g, 187 milimol (mmol)), 2,3-dimetoxi-7,7-dimetil-7H-benzo[c]fluoren-5-ol (40 g, 125 mmol) y THF (200 ml) a un matraz de fondo redondo de 2 litros equipado con un burbujeador y agitado magnéticamente a temperatura ambiente. Se añadió lentamente una solución de metil litio 1,6 M en etil éter (234 ml, 375 mmol) a la mezcla con un embudo de goteo en una atmósfera de nitrógeno. Se observaron desprendimiento de gas y ebullición del disolvente y se eliminaron del matraz por destilación 200 ml del disolvente. La mezcla restante se calentó a reflujo durante 10 horas y después se vertió en 400 ml de agua. Se añadió ácido clorhídrico (HCl) (3 N) a la mezcla con agitación hasta que se obtuvo un valor de pH de 4-6. Después, se añadió acetato de etilo (300 ml) a la mezcla. El precipitado cristalino se recogió por filtración al vacío. La capa orgánica se separó, se secó y se concentró. El aceite resultante se cristalizó mediante la adición de acetato de etilo y se recogió por filtración al vacío. Los sólidos recuperados se combinaron y se lavaron con acetona. Se obtuvieron como producto cristales de color blanco (45,7 g). Se caracterizó por RMN y EM que el producto tiene una estructura consistente con 7,7-dimetil-2-(4-fenilpiperazin-1-il)-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoren-5-ol.

##### Etapa 4

Se añadieron 1-fenil-1-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil-prop-2-in-1-ol (1,84 g, 5 mmol) de la Etapa 2, 7,7-dimetil-2-(4-fenilpiperazin-1-il)-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoren-5-ol de la Etapa 3 (1,5 g, 3,33 mmol), tamices moleculares de 3 Å (2 g) y cloroformo (80 ml) a un matraz de 250 ml equipado con un embudo de goteo y se agitó a temperatura ambiente. Se añadió gota a gota una solución de ácido trifluoroacético en cloroformo (0,3 M, 4 ml) al matraz de reacción a través del embudo de goteo. Se obtuvo un color gris. La mezcla de reacción resultante se calentó a reflujo durante 8 horas. Se retiraron los tamices moleculares por filtración sobre un lecho de Celite. La solución de cloroformo se lavó con una solución acuosa saturada de bicarbonato sódico, se secó sobre sulfato de magnesio y se concentró. El recuperado en bruto se purificó por cromatografía ultrarrápida sobre gel de sílice (eluyente: acetato de etilo/hexanos al 20/80 %). El sólido recuperado se purificó adicionalmente por disolución en  $\text{CHCl}_3$  y precipitación en metanol para proporcionar un sólido de color gris (2,1 g). Se identificó por RMN que el producto final tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenilpiperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

**Ejemplo 2**

Se siguieron los procedimientos de la Etapa 1, Etapa 2 y Etapa 4 del Ejemplo 1 excepto en que en la Etapa 1, se usó 1,4-piperidinopiperidina en lugar de 1-fenilpiperazina y en la Etapa 4, se usó 7,7-dimetil-7H-benzo[c]fluoren-5-ol en lugar de 7,7-dimetil-2-(4-fenilpiperazin-1-il)-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoren-5-ol. El producto final recuperado era un sólido de color azul. Un espectro de RMN mostró que el producto final tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(4-piperidinopiperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

**Ejemplo 3****Etapa 1**

Se añadió 2,3-Dimetoxi-5-hidroxi-7H-benzo[C]fluoren-7-ona, el producto de la Etapa 5 del Ejemplo 14 de la Patente de los EE.UU. 6.296.785 (50:13 g, 0,164 mol) y THF (500 ml) a un matraz equipado con un burbujeador con una atmósfera de nitrógeno y se agitó a temperatura ambiente. Se añadió lenta y cuidadosamente una solución del 25 por ciento en peso de cloruro de etilmagnesio en THF (124 ml, 0,36 mol) causando la evolución de gas. La adición se completó en 30 minutos. La reacción fue exotérmica y hizo hervir el THF. Después de 10 minutos, se añadió una solución de agua de 3 N de HCl lentamente con agitación vigorosa hasta que se obtuvo una mezcla ligeramente ácida. Se añadió una solución de bicarbonato sódico acuoso saturado. La capa orgánica se separó y la capa acuosa se extrajo con acetato de etilo. Las soluciones orgánicas recuperadas se combinaron, se secaron sobre sulfato de magnesio y se concentraron. Los cristales se precipitaron durante la evaporación del disolvente. Se añadió cloroformo para ayudar con la cristalización. El producto se recogió mediante filtración al vacío como cristales blancos (47,7 g). Un espectro de RMN mostró que el producto tenía una estructura consistente con 7-etil-2,3-dimetoxi-7H-benzo[c]fluoreno-5,7-diol.

**Etapa 2**

N-fenilpiperazina (7,23 g, 44,6 mmol), se añadió 7-etil-2,3-dimetoxi-7H-benzo[c]fluoreno-5,7-diol (10 g, 30 mmol) de la Etapa 1 y THF (200 ml) a un matraz y se agitó magnéticamente a temperatura ambiente con una atmósfera de nitrógeno. Se añadió lentamente una solución de metil litio 1,6 M en etil éter (93 ml, 149 mmol) a la mezcla con un embudo de goteo. Una cantidad de 100 ml de los disolventes se destiló del matraz. La mezcla restante se refluyó durante 2 días. La mezcla de reacción resultante se vertió en un matraz que contenía agua (200 ml), acidificó a pH 4 mediante la adición de 3 N de HCl. Se añadió etil acetato (100 ml) a la mezcla y el precipitado cristalino resultante se recogió mediante filtración al vacío, se lavó con agua y acetona y se secó al aire. Se recuperaron como producto cristales de color blanco (6,77 g). Un espectro de RMN mostró que el producto resultante tenía una estructura consistente con 7-etil-3-metoxi-2-(4-fenilpiperazin-1-il)-7H-benzo[c]fluoreno-5,7-diol.

**Etapa 3**

Se siguió el procedimiento de la Etapa 4 del Ejemplo 1 excepto en que se usó 1-fenil-1-(4-(4-hidroxipiperidin-1-il)-fenil)-prop-2-in-1-ol del Ejemplo 6 en lugar de 1-fenil-1-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-prop-2-in-1-ol y se usó 7-etil-3-metoxi-2-(4-fenilpiperazin-1-il)-7H-benzo[c]fluoreno-5,7-diol en lugar de 7,7-dimetil-2-(4-fenilpiperazin-1-il)-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoren-5-ol. Un espectro RMN mostró que el producto resultante, un sólido de color negro, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(4-hidroxipiperidin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-fenilpiperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;

**Etapa 4**

Se añadió el producto de la Etapa 3 (0,5 g, 0,66 mmol), 4-hexilbenzoilcloruro (0,42 g, 1,9 mmol) y piridina (10 ml) a un matraz de reacción y se agitó a temperatura ambiente durante 4 horas. La mezcla resultante se vertió en un vaso de precipitados que contenía 100 ml de agua. El precipitado resultante se disolvió en cloroformo, se secó sobre sulfato de magnesio, se concentró y se cromatografió ultrarrápidamente sobre gel de sílice usando como un eluyente: 2/8 (volumen/volumen) etil acetato/hexanos. El sólido recuperado se purificó adicionalmente por disolución en CHCl<sub>3</sub> y precipitación en metanol para proporcionar un sólido de color negro (0,44 g). Un espectro RMN mostró que el producto final tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperidin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-fenilpiperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

**Ejemplo 4****Etapa 1**

Se siguió el procedimiento del Ejemplo 1 salvo que en la Etapa 1, se usó pirrolidina en lugar de 1-fenilpiperazina y en la Etapa 3, se usó 4-hidroxipiperidina en lugar de 1-fenilpiperazina. Un espectro RMN mostró que el producto final, recuperado en forma de cristales de color púrpura, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hidroxipiperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

**Etapa 2**

Se añadió 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hidroxi-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano de la Etapa 1 (1,5 g, 2,3 mmol), ácido 4,4'-bifenildicarboxílico (0,27 g, 1,1 mmol), dicitclohexil carbodiimida (0,48 g, 2,3 mmol), 4-(dimetilamino)-piridina (0,03 g, 0,23 mmol) y diclorometano (40 ml) a un matraz y se calentó a reflujo durante 36 horas. El sólido producido se retiró por filtración y la solución restante se concentró. El producto en bruto sólido resultante se purificó por cromatografía ultrarrápida (3/7 acetato de etilo/hexanos, relación de volumen). El sólido recuperado se purificó adicionalmente por disolución en CHCl<sub>3</sub> y precipitación en metanol. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido de color púrpura (0,47 g), tenía una estructura consistente con éster bis-{1-[6-metoxi-13,13-dimetil-3-fenil-3-(4-pirrolidin-1-il)-fenil]-3H,13H-indeno[2',3':3,4]nafta[1,2-b]piran-7-il]-piperidin-4-il} del ácido bifenil-4,4'-dicarboxílico.

### Ejemplo 5

#### Etapa 1

Se siguieron los procedimientos de la Etapa 1, Etapa 2 y Etapa 3 del Ejemplo 7 excepto en que se usó 4-hidroxi-piperidina en lugar de N-fenilpiperazina en la Etapa 2 y se usó 1-fenil-1-(4-(4-hidroxi-piperidin-1-il)-fenil)-prop-2-in-1-ol (un intermediario de la Etapa 1 del Ejemplo 4) en lugar de 1-fenil-1-(4-(4-hidroxi-piperidin-1-il)-fenil)-prop-2-in-1-ol en la Etapa 3. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido de color púrpura, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-pirrolidinofenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-hidroxi-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano.

#### Etapa 2

Se añadió una mezcla de 3-fenil-3-(4-pirrolidinofenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-hidroxi-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano de la Etapa 1 (4,0 g, 6 mmol) y tetrahidrofurano (THF) (200 ml) a un matraz de reacción y se agitó a temperatura ambiente en una atmósfera de nitrógeno. Se añadió una solución de 2 M de amida de diisopropilo de litio en una mezcla de disolventes de THF y hexanos disponible en ACROS Organics (12 ml, 24 mmol) mediante una jeringa. Se añadió cloroformo de colesterol (2,7 g, 6 mmol) a -78 °C y la mezcla resultante se templó a temperatura ambiente y se agitó durante media hora a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se vertió en agua (1500 ml), acidificó con 3 N de HCl seguido por neutralización del exceso de ácido mediante solución de agua de bicarbonato sódico saturado, extrajo con etil acetato, se secó sobre sulfato de magnesio, se concentró y se cromatografió ultrarrápidamente usando 3:7 (volumen/volumen) de etil acetato:hexanos como el eluyente. Se obtuvieron dos productos, que se corresponden con un mono-aducto y un di-aducto respectivamente. Un RMN mostró que el producto de di-aducto (0,666 g) tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxi]-13-etil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

### Ejemplo 6

El procedimiento del Ejemplo 3 se siguió excepto en que se usó 4-hidroxi-piperidina en lugar de N-fenilpiperazina en la Etapa 2 y se usó cloroformo de colesterol en lugar de hexilbenzoicloruro en la Etapa 4. Un espectro RMN mostró que el producto resultante, un sólido blanquecino, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-{4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il}-fenil)-13-etil-13-hidroxi-6-metoxi-7-{4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il}-)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

### Ejemplo 7

#### Etapa 1

Se añadió ácido 4-hidroxi-benzoico (45 g, 0,326 mol), ácido dodecilbencenosulfónico (2 gotas) y etil éster (500 ml) a un matraz de equipado con un embudo de goteo y se agitó a temperatura ambiente. Se añadió dihidropirano puro (DHP)(35 ml, 0,39 mol) a gotas a través del embudo de goteo dentro de un intervalo de 30 minutos y se formó un precipitado cristalino de color blanco. La suspensión resultante se agitó durante la noche y el precipitado se recogió por filtración al vacío. Se recuperó un producto sólido de color blanco (41 g). Un espectro RMN mostró que el producto resultante tenía una estructura consistente con ácido 4-(2-tetrahidro-2H-piranoxi)benzoico.

#### Etapa 2

Se añadió 4-Hidroxi-piperidina (19,5 g, 0,193 mol), 2,3-dimetoxi-7,7-dimetil-7H-benzo[c]fluoren-5-ol (41,17 g, 0,128 mol) y THF (300 ml) a un matraz de fondo redondo de 2 litros equipado con un burbujeador y agitado magnéticamente a temperatura ambiente. Se añadió lentamente una solución de 3 M metil Grignard en THF (171 ml, 0,514 mmol) a la mezcla con un embudo de goteo en una atmósfera de nitrógeno. La mezcla resultante se concentró en un aceite

viscoso. El aceite viscoso se mantuvo con reflujo y se agitó durante 5 días. La cromatografía de capa fina mostró que había 2 productos presentes en la reacción. La mezcla de reacción resultante se vertió en un vaso de precipitados que contenía agua (1000 ml), se neutralizó con HCl (3 N) a un valor de pH de 4-6, se extrajo con etil acetato y se cromatografió ultrarrápidamente usando 2:8 (volumen/volumen) de etil acetato:hexanos como el eluyente. Ambos

5 productos se recogieron y obtuvieron como sólidos de color blanco. Un espectro de RMN mostró que el producto principal tenía una estructura consistente con 7,7-dimetil-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoreno-2,5-diol y el producto menor tenía una estructura consistente con 7,7-dimetil-3-metoxi-3-(4-hidroxipiperadin-1-il)-7H-benzo[c]fluoreno-5-ol.

### Etapa 3

10 Se añadió 7,7-Dimetil-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoreno-2,5-diol de la Etapa 1 (5,1 g), 1-fenil-1-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-prop-2-in-1-ol (5,1 g), piridinio p-toluenosulfonato (0,2 g), trimetil ortoformato (4 g) y cloroformo (100 ml) a un matraz de reacción y se agitó a temperatura ambiente durante el fin de semana. La mezcla de reacción se concentró a continuación y se cromatografió ultrarrápidamente usando 2:8 (volumen/volumen) de etil acetato:hexanos como el

15 eluyente. Se recuperó un sólido de color gris (9,1 g). Un espectro RMN mostró que el producto resultante tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(4-pirrolidinilfenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-hidroxi-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano.

### Etapa 4

20 Se usó el procedimientos de la Etapa 2 del Ejemplo 4 excepto en que la reacción se realizó a temperatura ambiente, se usó ácido 4-(2-tetrahidro-2H-piranoxi)benzoico de la Etapa 1 en lugar de ácido 4,4'-bifenildicarboxílico, se usó 3-fenil-3-(4-(4-pirrolidinilfenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-hidroxi-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano de la Etapa 3 en lugar de 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hidroxipiperadin-1-il)indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano

25 y no se usó la cromatografía ultrarrápida sobre gel de sílice para la purificación del producto. El producto se purificó mediante una técnica de disolución en cloroformo seguido por precipitación de metanol. Un espectro RMN mostró que el producto resultante, un sólido de color azul, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(2-tetrahidro-2H-piranoxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano.

### Etapa 5

30 Se añadió 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(2-tetrahidro-2H-piranoxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano, el producto de la Etapa 4 (5 g, 6,5 mmol), p-toluenosulfonato de piridinio (0,16 g, 0,65 mmol), etil acetato (100 ml) y metanol (20 ml) a un matraz de reacción y se reflujo durante 24 horas. La mezcla de reacción resultante se extrajo con agua, se secó sobre sulfato de magnesio, se concentró y se cromatografió ultrarrápidamente usando 3/7 (volumen/volumen) de etil acetato:hexano como el eluyente. Un espectro RMN mostró que el producto resultante, un sólido de color azul (4,4 g), tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hidroxibenzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano.

35

### Etapa 6

40 Se usó el procedimiento de la Etapa 4 y Etapa 5 de este ejemplo excepto en que se usó el producto de la Etapa 5 de este Ejemplo, 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hidroxibenzoiloxi)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano, en lugar de 3-fenil-3-(4-(4-pirrolidinilfenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-hidroxi-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano. Un espectro RMN mostró que el producto resultante, un sólido de color azul, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hidroxibenzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano.

45

### Etapa 7

50 Se usó el procedimiento de la Etapa 4 y Etapa 5 de este Ejemplo excepto en que se usó el producto de la Etapa 6 de este Ejemplo, 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hidroxibenzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano, en lugar de 3-fenil-3-(4-(4-pirrolidinilfenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-hidroxi-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano. Un espectro RMN mostró que el producto resultante, un sólido de color azul, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hidroxibenzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano.

55

### Etapa 8

60 Se usó el procedimientos de la Etapa 4 del Ejemplo 3 excepto en que se usó el producto de la Etapa 7, 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hidroxibenzoiloxi)benzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano, en lugar de 3-fenil-3-(4-(4-hidroxipiperadin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido de color azul, tenía una estructura consistente con 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hidroxibenzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano.

65

**Ejemplo 8**

Se usó el procedimientos de la Etapa 3 del Ejemplo 7 excepto en que se usó metil 6-metoxi-1-naftoato en lugar de 7,7-Dimetil-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoreno-2,5-diol y se usó 1-fenil-1-(4-(4-(4-metoxifenil) piperazino)fenil)-2-propin-1-ol en lugar de 1-fenil-1-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-prop-2-in-1-ol. Se recuperaron cristales de color amarillo claro (2,4 g). Un espectro de RMN mostró que el producto resultante tenía una estructura consistente con 3-(4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil)-3-fenil-7-metoxicarbonil-3H-nafto[2,1-b]pirano;

**Ejemplo 9**

10 **Etapa 1**

Se siguió el procedimiento del Ejemplo 8 excepto en que se usó ácido 6-hidroxi-1-naftoico en lugar de metil 6-metoxi-1-naftoato. Se recuperó un polvo de color naranja claro. Un espectro de RMN mostró que el producto resultante tenía una estructura consistente con 3-(4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil)-3-fenil-7-hidroxicarbonil-3H-nafto[2,1-b]pirano;

**Etapa 2**

20 Se usó el procedimientos de la Etapa 2 del Ejemplo 4 excepto en que la reacción se realizó a temperatura ambiente, se usó 3-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-3-fenil-7-metoxicarbonil-3H-nafto[2,1-b]pirano en lugar de ácido 4,4'-bifenildicarboxílico y se usó 4-fenilfenol en lugar de 3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hidroxipiperadin-1-il)indeno[2',3':3,4] nafto[1,2-b]pirano. Un espectro de RMN mostró que el producto sólido de color blanco tenía una estructura consistente con 3-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-3-fenil-7-(4-fenil-(fen-1-oxi)carbonil)-3H-nafto[2,1-b]pirano.

**Ejemplo 10**

30 Se usó el procedimientos de la Etapa 3 del Ejemplo 7 excepto en que se usó 4-hidroxi-dibenzofurano en lugar de 7,7-Dimetil-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoreno-2,5-diol y se usó 1-fenil-1-(4-(4-(4-metoxifenil) piperazino)fenil)-2-propin-1-ol en lugar de 1-fenil-1-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-prop-2-in-1-ol. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido blanquecino, tenía una estructura consistente con 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-benzofuro[3',2':7,8]benzo[b]pirano.

**Ejemplo 11****Etapa 1**

40 Se usó el procedimientos de la Etapa 3 del Ejemplo 7 excepto en que se usó metil 2,4-dihidroxibenzoato en lugar de 7,7-Dimetil-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoreno-2,5-diol. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido amarillo, tenía una estructura consistente con 7-hidroxi-2-fenil-2-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-6-metoxicarbonil-2H-benzo[b]pirano.

**Etapa 2**

45 Se siguió el procedimiento de la Etapa 4 del Ejemplo 3 excepto en que el producto de la Etapa 1, se usó 7-hidroxi-2-fenil-2-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-6-metoxicarbonil-2H-benzo[b]pirano en lugar de 3-fenil-3-(4-(4-(4-hidroxipiperadin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano y se usó cloroformo de colesterol en lugar de 4-hexilbenzoilcloruro. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido blanquecino, tenía una estructura consistente con 7-{17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-ilocarboniloxi}-2-fenil-2-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-6-metoxicarbonil-2H-benzo[b].

**Ejemplo 12**

55 Se usó el procedimientos de la Etapa 3 del Ejemplo 7 excepto en que se usó metil 3,5-dihidroxi-2-naftoato en lugar de 7,7-Dimetil-3-metoxi-7H-benzo[c]fluoreno-2,5-diol y se usó 1-fenil-1-(4-(4-(4-metoxifenil) piperazino)fenil)-2-propin-1-ol en lugar de 1-fenil-1-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-prop-2-in-1-ol. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido de color gris, tenía una estructura consistente con 2-fenil-2-{4-[4-(4-metox-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-9-hidroxi-8-metoxicarbonil-2H-nafto[1,2-b]pirano.

**Ejemplo 13**

65 A una mezcla agitada de 4-n-butilanilina (1,13 g, 7,6 mmol) y THF (20 ml) a temperatura ambiente, se añadió bromuro de ispropil magnesio (2 M en etil éter, 3,8 ml) mediante una jeringa. Después de 2 minutos, se añadió 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-9-hidroxi-8-metoxicarbonil-2H-nafto[1,2-b]pirano sólido en una porción y la mezcla que se obtuvo se mantuvo con agitación a temperatura ambiente durante más hora y a continuación se vertió en agua.

El precipitado se recogió, se disolvió en cloroformo y se secó sobre sulfato de magnesio y se concentró. El producto bruto se purificó por cromatografía ultrarrápida. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido de color gris (0,71) tenía una estructura consistente con 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-9-hidroxi-8-(4-butil-fenil)carbamoil-2H-nafto[1,2-b]pirano.

5

#### **Ejemplo 14**

Una mezcla de 1-nitroso-2-naftol (12,32 g, 71 mmol), etil isonipecotato (11,2 g, 71 mmol) y metanol (200 ml) se reflujo durante 2 horas. Se añadió 1,3,3-trimetil-2-metilenoindolina pura en una porción. La mezcla se mantuvo a reflujo durante 10 minutos más y a continuación se retiró el disolvente mediante vacío. Se usó cromatografía ultrarrápida para separar el producto. Un espectro RMN mostró que el producto final, un sólido amarillo (9 g, 25 %) tenía una estructura consistente con 1,3,3-trimetil-6'-(4-etoxicarbonil)-piperidin-1-il)-espiro[indoline-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina].

10

#### **Ejemplo 15**

El procedimiento del Ejemplo 13 se usó excepto en que se usó 1,3,3-trimetil-6'-(4-etoxicarbonil)-piperidin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina] en lugar de 2-fenil-2-{4-[4-(4-metoxi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-9-hidroxi-8-metoxicarbonil-2H-nafto[1,2-b]pirano. Un espectro RMN mostró que el producto final, cristales de color blanquecino, tenían una estructura consistente con 1,3,3-trimetil-6'-(4-[N-(4-butilfenil)carbamoil]-piperidin-1-il)-espiro[indoline-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina].

15

20

#### **Ejemplo 16**

Se usó el procedimiento del Ejemplo 14 excepto en que se usó N-(4-metoxifenil)piperazina en lugar de isonipecotato de etilo. Un espectro de RMN mostró que el producto final tenía una estructura consistente con 1,3,3-trimetil-6'-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina].

25

#### **Ejemplo 17**

Se usó el procedimiento del Ejemplo 14 excepto en que se usó N-(4-hidroxifenil)piperazina en lugar de isonipecotato de etilo. Un espectro de RMN mostró que el producto final tenía una estructura consistente con 1,3,3-trimetil-6'-(4-(4-hidroxifenil)piperazin-1-il)-espiro[indolina-2,3'-3H-nafto[2,1-b][1,4]oxazina].

30

#### **Ejemplo 18**

35

##### **Parte A**

Se hicieron pruebas con los compuestos fotocromicos descritos en los Ejemplos 1-17 del siguiente modo. Se añadió una cantidad de compuesto fotocromico calculada para proporcionar una solución  $1,5 \times 10^{-3}$  molar a un matraz que contenía 50 gramos de una mezcla monomérica de 4 partes de dimetacrilato de bisfenol A etoxilado (BPA 2EO DMA), 1 parte de dimetacrilato de poli(etilenglicol) 600 y 2,2'-azobis(2-metil propionitrilo) (AIBN) al 0,033 por ciento en peso. Cada compuesto fotocromico se disolvió en la mezcla monomérica por agitación y calentamiento ligero, si es necesario. Después se obtuvo una solución transparente, se vertió en una lámina de moldeo plana que tenía una dimensión interior de 2,2 mm +/- 0,3 mm x 15,24 cm (6 pulgadas) x 15,24 cm (6 pulgadas). El molde se cerró y se colocó en un horno programable de flujo de aire horizontal para aumentar de 40 °C a 95 °C durante un intervalo de 5 horas, se mantuvo la temperatura a 95 °C durante 3 horas, se redujo progresivamente a 60 °C en un intervalo de 2 horas y después se mantuvo a 60 °C durante 16 horas. Después del curado, se abrió el molde y la lámina del polímero se cortó en cuadrados de prueba de 5,1 cm (2 pulgadas) usando una sierra con filo de diamante.

40

45

##### **Parte B**

Antes del ensayo de respuesta en un banco óptico, las muestras fotocromicas de la Parte A se acondicionaron exponiéndolas a luz ultravioleta a 365 nm durante 10 minutos a una distancia de aproximadamente 14 cm de la fuente para preactivar las moléculas fotocromicas. La radiación UVA en la muestra se midió con un espectrorradiómetro Licor modelo Li-1800 y se vio que era de 22,2 vatios por metro cuadrado. A continuación, las muestras se colocaron bajo una lámpara halógena (500W, 120 V) durante aproximadamente 10 minutos a una distancia de aproximadamente 36 cm desde la lámpara con el fin de decolorar, o inactivar, el compuesto fotocromico en las muestras. La iluminancia de la muestra se midió con un espectrorradiómetro Licor y se observó que era de 21,9 Klux. Después, las muestras se mantuvieron en un entorno oscuro durante al menos 1 hora antes del ensayo para enfriarlas y que siguiesen desvaneciéndose hasta un estado inactivado.

55

60

El banco óptico se ajustó con una lámpara de arco de xenón Oriel modelo n.º 66011 de 300 vatios, un obturador controlado por ordenador Oriel modelo 71445, un filtro de paso de banda de 3 mm KG-2 de Schott, que elimina la radiación de longitud de onda corta, filtro o filtros de densidad neutros para atenuar la luz de la lámpara de xenón, una lente de condensación de sílice fundido para colimación de rayos y una celda de agua de sílice fundido/portamuestras para mantener la muestra a la temperatura a la que la muestra del ensayo se insertó. La temperatura en la celda de

65

5 agua se controló con un sistema de circulación de agua bombeada en el que el agua pasaba a través de serpentines de cobre que se colocaron en el depósito de una unidad de enfriamiento. La celda de agua usada para mantener las muestras de ensayo contenía láminas de sílice fundido en las caras delantera y trasera para eliminar el cambio espectral de la activación o controlar los haces de luz. El agua filtrada que pasaba a través de la celda de agua se mantuvo a 22,2 °C +/- 2 °C [72 °F +/- 2 °F] para ensayar la respuesta fotocromica. Se usó una unidad Oriel Photofeedback, modelo 68850 para controlar la intensidad de la lámpara de arco de xenón durante la activación de la muestra.

10 Se usó una fuente de luz halógena de tungsteno Ocean Optics LS-1 como la fuente de luz de control para medir la respuesta fotocromica. La luz, enfocada en un cable de fibra óptica, se colimó y se pasó de forma perpendicular a través del centro de la muestra en la celda de agua. Después de pasar a través de la muestra, la luz se volvió a enfocar dentro de una esfera integradora de 5,1 cm (2 pulgadas) y se introdujo en un espectrofotómetro Ocean Optics S2000 mediante cables de fibra óptica. Se usaron el software Ocean Optics OOIBase 32 y el software patentado PPG para medir la respuesta y controlar el funcionamiento del banco óptico.

15 La irradiancia para las pruebas de respuesta de las muestras fotocromicas en el banco óptico se estableció en la muestra usando un dispositivo radiómetro de International Light Research, modelo IL-1700 con un sistema detector que comprende un detector modelo SED033, filtro B y difusor. Se corrigió la salida del visualizador del radiómetro (ajuste de valores de factor) frente a un calibrador de calibración óptica Licor 1800-02 para presentar valores que representan vatios por metro cuadrado de UVA. La irradiancia en el punto de muestra para el ensayo de respuesta inicial se ajustó a 3,0 vatios por metro cuadrado de UVA y 8,6 Klux de iluminancia. Durante el ensayo de respuesta de la muestra, si una muestra se oscureció más allá de un límite aceptable de capacidad de detección, la irradiancia se bajó a 1,0 vatios por metro cuadrado de UVA o la muestra se rehizo a la mitad de concentración en el copolímero. El ajuste de la salida de la lámpara de arco de xenón filtrada se logró aumentando o disminuyendo la corriente a la lámpara a través del controlador y/o añadiendo o eliminando filtros de densidad neutra en la trayectoria de la luz. Las muestras de ensayo se expusieron a la luz de activación a 30°-35° con respecto a su superficie mientras eran perpendiculares a la luz de control.

20 Las muestras se activaron en la celda de agua controlada a 22,2 °C (72 °F) durante 30 minutos, luego se dejó que se destiñeran bajo condiciones de luz ambiental hasta que el cambio en la densidad óptica de la muestra activada se destiñó a ¼ de su estado más oscuro (saturado) o durante un máximo de 30 minutos de desteñido.

25 El cambio en la densidad óptica ( $\Delta DO$ ) desde el estado blanqueado hasta el estado oscurecido se determinó estableciendo la transmitancia inicial, abriendo el obturador de la lámpara de xenón para proporcionar radiación ultravioleta para cambiar las lentes de ensayo del estado blanqueado a un estado activado (es decir, oscurecido). Se recogieron los datos y se seleccionaron intervalos de tiempo, midiendo la transmitancia en el estado activado y calculando el cambio en la densidad óptica de acuerdo con la fórmula:  $\Delta DO = \log(\%T_b/\%T_a)$ , donde  $\%T_b$  es el porcentaje de transmitancia en el estado blanqueado,  $\%T_a$  es el porcentaje de transmitancia en el estado activado y el logaritmo es en base 10.

30 La  $\lambda_{\text{máx-vis}}$  en el intervalo de luz visible es la longitud de onda en el espectro visible al que tiene lugar la absorción máxima de la forma activada del compuesto fotocromico. La  $\lambda_{\text{máx-vis}}$  se determinó ensayando el cuadrado de ensayo fotocromico en un espectrómetro UV-Visible Varian Cary 3 o un equipo similar.

35 Algunos de los compuestos de los ejemplos mostraron picos de doble absorción en el espectro visible en regiones de color distintas. Para cada  $\lambda_{\text{máx-vis}}$  la sensibilidad correspondiente ( $\Delta DO/\text{Min}$ ), la densidad óptica de saturación ( $\Delta DO$  en saturación) y la semivida de desvanecimiento ( $T_{1/2}$ ) para los compuestos de los Ejemplos se tabulan en la Tabla II para la Banda A que representa el pico de absorción mayor (más intenso) y B y B que representa el pico de absorción menor.

40 La  $\Delta DO/\text{Min}$ , que representa la sensibilidad de la respuesta del compuesto fotocromico a la luz UV, se midió durante los primeros cinco (5) segundos de exposición a UV, después se expresó en minutos. La densidad de saturación óptica ( $\Delta DO$  en saturación) se tomó en condiciones idénticas salvo que la exposición a UV se continuó durante un total de 30 minutos. La semivida de desvanecimiento es el intervalo de tiempo en segundos para el  $\Delta DO$  de la forma activada del compuesto fotocromico en los cuadrados de ensayo para alcanzar la mitad del  $\Delta DO$  medido después de quince minutos o después de conseguir la saturación o la casi saturación, a temperatura ambiente después de eliminar la fuente de luz de activación, por ejemplo, cerrando el obturador.



Tabla II:

Ejemplo	Banda	$\lambda_{\text{máx-vis}}$ (nm)	Sensibilidad ( $\Delta\text{DO}/\text{min}$ )	$\Delta\text{DO}$ en Saturación	T $\frac{1}{2}$ (segundos)
Ejemplo 1	A	502	0,51	1,62	701
	B	589	0,35	1,15	716
Ejemplo 2	A	-	-	-	-
	B	592	0,68	1,32	219
Ejemplo 3	A	507	0,46	0,71	154
	B	597	0,34	0,54	154
Ejemplo 4	A	522	0,16	0,66	426
	B	620	0,16	0,66	430
Ejemplo 5	A	528	0,1	0,22	219
	B	624	0,1	0,23	208
Ejemplo 6	A	503	0,49	0,80	155
	B	601	0,36	0,58	159
Ejemplo 7	A	498	0,19	0,39	221
	B	631	0,37	0,74	210
Ejemplo 8*	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-
Ejemplo 9*	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-
Ejemplo 10	A	511	0,03	0,03	>2000
	B	573	0,03	0,03	>2000
Ejemplo 11*	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-
Ejemplo 12	A	565	0,12	0,54	1022
	B				
Ejemplo 13	A	560	0,05	0,29	1329
	B				
Ejemplo 14	A	437	0,06	0,02	17
	B	585	0,41	0,17	19
Ejemplo 15	A	437	0,05	0,02	17
	B	584	0,36	0,16	20
Ejemplo 16	A	585	0,36	0,16	21
	B	432	0,02	0,02	26
Ejemplo 17	A	579	0,35	0,16	22
	B				

\*Desaparece demasiado rápido para permitir la medición.

### Ejemplo 19

- 5 La relación de absorción promedio de cada uno de los compuestos fotocromicos de los Ejemplos 1-17, así como la relación de absorción promedio del fotosol™ 0265 ("ejemplo comparativo"), que está disponible comercialmente en PPG Industries, Inc. y se ha comunicado que es 1,3,3,4,5 (o 1,3,3,5,6)-pentametil-eespiro[indolina-2,3-[3H]naft[2,1-b][1,4]oxazina, se determinó de acuerdo con el MÉTODO DE CELDA.
- 10 Se obtuvo un ensamblaje de celda que tiene la siguiente configuración de Design Concepts, Inc. Cada uno de los ensamblajes de celda se formó a partir de dos sustratos de vidrio opuestos que están separados con un espaciador de perla de vidrio que tiene un diámetro de 20 micrómetros +/-1 micrómetro. Las superficies internas de cada uno de los sustratos de vidrio tenían un revestimiento de poliimida orientado sobre los mismos para proporcionar el alineamiento de un material de cristal líquido como se analiza a continuación. Se sellaron dos bordes opuestos de los
- 15 sustratos de vidrio con un sellador epoxi, dejando los otros dos lados abiertos para llenado.

El hueco entre los dos sustratos de vidrio del conjunto de celdas se llenó con una solución de cristal líquido que contenía uno de los compuestos fotocromicos de los Ejemplos 1-17 del Ejemplo comparativo ("Material de ensayo"). La solución de cristal líquido se formó mezclando los siguientes componentes en los porcentajes en peso listados en la Tabla III con calentamiento, si es necesario, para disolver el material de ensayo.

20

Tabla III:

Componente	Porcentaje en peso
Licristal™ E7	97-99,5
Material de ensayo	0,5-3

5 Se usó un banco óptico para medir las propiedades ópticas de la celda y derivar los intervalos de absorción de cada uno de los materiales de ensayo. El conjunto de celdas lleno se colocó en el banco óptico con una fuente de luz de activación (una lámpara de arco de xenón Oriol modelo 66011 de 300 vatios con un obturador controlado por ordenador de alta velocidad Melles Griot 04 IES 211 que se cerró momentáneamente durante la recogida de datos para que la luz difusa no interfiriera con el proceso de recopilación de datos, un filtro de paso de banda de 3 mm KG-1 de Schott, que elimina la radiación de longitud de onda corta, filtros de densidad neutros para atenuar la intensidad y una lente de condensación para la colimación del rayo) situado en un ángulo de 30° a 35° de incidencia en una superficie del conjunto de celdas.

10 Se situó una fuente de luz de banda ancha para controlar las mediciones de respuesta de manera perpendicular a una superficie del ensamblaje de celda. La señal aumentada o disminuida de las longitudes de onda visibles se obtuvo recogiendo y combinando de forma separada luz filtrada de una lámpara halógena de tungsteno de 100 vatios (controlado por una fuente de alimentación de voltaje constante Lambda UP60-14) con un cable de fibra óptica bifurcado de dos extremos. La luz de un lado de la lámpara halógena de tungsteno se filtró con un filtro Schott KG1 para absorber el calor y un filtro Hoya B-440 para permitir el paso de las longitudes de onda cortas. El otro lado de la luz también se filtró con un filtro Schott KG1 o no se filtró. Se recogió la luz enfocando la luz de cada lado de la lámpara sobre un extremo separado del cable de fibra óptica bifurcada de extremos partidos, y posteriormente se combinó en una fuente de luz que emergió del único extremo del cable. Se unió una manguera de luz de 4" al único extremo del cable para asegurar la mezcla apropiada.

20 La polarización de la fuente de luz se consiguió pasando la luz del extremo individual del cable a través de un Moxtek, sostenido en una platina de rotación motorizada impulsada por ordenador (modelo M-061-PD de Polytech, PI). El rayo de control se ajustó de modo que el primer plano de polarización (0°) era perpendicular al plano de la mesa del banco óptico y el segundo plano de polarización (90°) era paralelo al plano de la mesa del banco óptico. Las muestras se ejecutaron al aire, a temperatura ambiente (22,8 °C +/- 5 °C o más) (73°F +/- 5°F o más) mantenido por el sistema de aire acondicionado del laboratorio o una celda de aire con temperatura controlada.

25 Para llevar a cabo las mediciones, el ensamblaje de celdas se expuso a 6,7 W/m<sup>2</sup> de rayos UVA de la fuente de luz de activación durante 5 a 15 minutos para activar el material de ensayo. Un radiómetro de International Light Research (modelo IL-1700) con un sistema de detección (detector modelo SED033, filtro B y difusor) se usó para verificar la exposición antes de cada ensayo. La luz de la fuente de monitorización que se polarizó al plano de polarización de 0° se pasó entonces a través de la muestra recubierta y se enfocó en una esfera integrante de 2", que estaba conectada a un espectrofotómetro Ocean Optics 2000 usando un cable de fibra óptica de función única. La información espectral, después de pasar a través de la muestra, se recogió usando software Ocean Optics OOIBase32 y OOIColor y el software patentado PPG. Cuando se activó el material microico fotocromico, la posición de la lámina de polarización se rotó hacia atrás y hacia adelante para polarizar la luz de la fuente de luz de control al plano de polarización de 90° y de vuelta. Los datos se recogieron durante aproximadamente 10 a 300 segundos a intervalos de 3 segundos durante la activación. Para cada ensayo, la rotación de los polarizadores se ajustó para recoger datos en la siguiente secuencia de planos de polarización: 0°, 90°, 90°, 0°, etc.

40 Los espectros de absorción se obtuvieron y se analizaron para cada conjunto de celdas usando el software Igor Pro (disponible de WaveMetrics). El cambio en la absorbancia en cada dirección de polarización para cada conjunto de celdas se calculó restando la medición de la absorción en tiempo 0 (es decir, inactivado) para el conjunto de celdas en cada longitud de onda ensayada. Se obtuvieron valores de absorbancia promedio en la región del perfil de activación en el que la respuesta fotocromica del Material de Ensayo se saturó o casi saturó (es decir, las regiones en las que la absorbancia medida no aumentó o aumentó significativamente con el tiempo) para cada ensamblaje de celda promediando la absorbancia a cada intervalo de tiempo en esta región. Los valores de absorbancia promedio en un intervalo predeterminado correspondientes a  $\lambda_{\text{máx-vis}} \pm 5 \text{ nm}$  se extrajeron para las polarizaciones 0° y 90° y la proporción de absorción para cada longitud de onda en este intervalo se calcularon dividiendo la absorbancia promedio más larga entre la absorbancia promedio más corta. Para cada longitud de onda extraída, se promediaron de 5 a 100 puntos de datos. La relación de absorción promedio del material de ensayo se calculó después promediando estas relaciones de absorción individuales.

55 Para cada material de ensayo, El procedimiento anteriormente descrito se llevó a cabo al menos dos veces. El valor representado para la relación de absorción promedio representa un promedio de los resultados obtenidos en las dos ejecuciones. Los resultados de estos ensayos se presentan en la Tabla IV a continuación.

Tabla IV:

Número de ejemplo	Intervalo de longitud de onda $\lambda_{\text{máx-vis}}$ (nm) +/- 5 nm	Relación de absorción promedio (AR)
Ejemplo comparativo	623 +/- 5 nm	2,3
1	500 +/- 5 nm	3,9
2	601 +/- 5 nm	2,2
3	505 +/- 5 nm	3,7
4	628 +/- 5 nm	4,8

5	529 +/- 5 nm	3,3
6	507 +/- 5 nm	6,0
7	640 +/- 5 nm	6,6
8*	-	-
9*	-	-
10	584 +/- 5 nm	3,9
11*	-	-
12	571 +/- 5 nm	2,7
13	590 +/- 5 nm	4,0
14	590 +/- 5 nm	6,0
15	590 +/- 5 nm	7,8
16	586 +/- 5 nm	8,3
17	587 +/- 5 nm	7,0

\* Desaparición demasiado rápida para medir

**Ejemplo 20**

La relación de absorción promedio para cada uno de los compuestos nombrados en la Tabla V se determinó como se ha expuesto anteriormente en el Ejemplo 19. Se apreciará por los expertos en la técnica que los compuestos enumerados en la Tabla V pueden fabricarse de acuerdo con las enseñanzas y ejemplos desvelados en el presente documento con modificaciones adecuadas, como será evidente fácilmente para los expertos en la técnica. Además, los expertos en la materia reconocerán que pueden usarse diversas modificaciones a los métodos desvelados, así como otros métodos, en la realización de los compuestos nombrados establecidos a continuación en la Tabla V.

Tabla V:

Nombre del Compuesto	Intervalo de longitud de onda $\lambda_{\text{máx}}$ (nm) (+/- 5 nm)	Relación de absorción promedio (AR)
3-fenil-3-(4-(4-bencilpiperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	610	2,2
3-fenil-3-(4-(4-(3-piperidin-4-il-propil)piperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	590	2,0
3-fenil-3-(4-(4-hexiloximetil piperidino)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	606	2,2
3-fenil-3-(4-([1,4']bipiperidinil-1'-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(piperadin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	515	2,3
3-fenil-3-(4-([1,4']bipiperidinil-T-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-([1,4']bipiperidinil-1'-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	513	3,4
3-fenil-3-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-([1,4']bipiperidinil-1'-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	630	2,8
3-fenil-3-(4-([1,4']bipiperidinil-1'-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-bencilpiperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	515	2,7
3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazina)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	592	2,2
3-fenil-3-(4-(4-bencilpiperazina)fenil)-13,13-dimetil-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	598	2,1
3-fenil-3-(4-pirrolidin-1-il-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	632	4,5
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexiloxibenzoiloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	501	3,9
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	503	3,9
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	501	4,2
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4'-octiloxi-bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	499	4,1
3-fenil-3-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexilbenzoiloxi)-piperidin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	505	4,3
3-fenil-3-(4-(4-(4-butil-fenilcarbamoil)-piperidin-1-il)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	506	5,0
3-fenil-3-(4-(1-hidroxipiperidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	512	4,0
3-fenil-3-(4-(4-fluorobenzoiloxi)-piperadin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	507	3,5

ES 2 706 656 T3

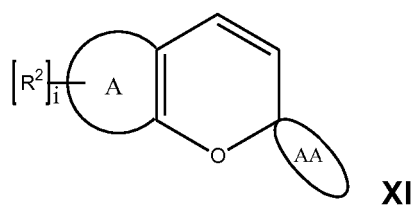
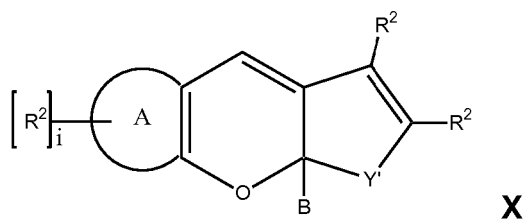
3-fenil-3-(4-(4-pirrolidinilfenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-({4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il})indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	525	6,3
3-fenil-3-(4-{4-(bifenil-4-carboniloxi]-piperidin-1-il)-fenil}-13,13-dimetil-6-metoxi-7-{44-(bifenil-4-carboniloxi)-piperidin-1-il}-)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	503	4,6
3-fenil-3-{4-{1-il}fenil}-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-hexilbenzoiloxi-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	635	3,4
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metox-7-{4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il}-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	502	6,0
3-fenil-3-{4-(pirrolidin-1-il)fenil}-3-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	635	5,2
3-fenil-3-{4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperidin-1-il}-fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenil-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	505	4,4
3-fenil-3-{4-(pirrolidin-1-il)fenil}-13-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxi]-13-etil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-piperadin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;	529	3,3
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metox-7(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarbonil]-piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	503	7,1
3-fenil-3-{4-{1-il}fenil}-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-[17-(1,5-dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarbonil]-piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	637	5,3
3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)-4-oxo-butanoil)-piperazina-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	499	4,6
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	496	5,9
3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-fluorobenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	497	5,3
3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-bifenilcarboniloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	497	5,8
3-fenil-3-(4-(4-fenilpiperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-octiloxi-bifenil-4-carboniloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	497	6,3
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexiloxifenilcarboniloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	496	5,8
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-{4-(4-[17-(1,5-Dimetil-hexil)-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-iloxicarboniloxi]-fenil)-piperidin-1-il}-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano;	499	5,6
3-fenil-3-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)fenil-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-fenilpiperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	499	4,8
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)-fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	493	6,1
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	499	5,7
3-fenil-3-(4-(4-metoxifenil)-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(3-fenilprop-2-inoiloxi)fenil)piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	499	6,3
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-(2-fluorobenzoiloxi)benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	497	5,8
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-fluorobenzoiloxi)benzoiloxi)-fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	498	6,1
3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoxi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	629	6,3
3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-hexilbenzoiloxi)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	645	4,7
3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoxi-7-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	639	5,9

ES 2 706 656 T3

3-fenil-3-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoksi-7-(3-(4-hexilbenzoiloxifenil)piperazin-1-il)-indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	500	2,8
3-fenil-3-(4-(pirrolidin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoksi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)benzoiloxi)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	646	6,4
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoksi-7-(4-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)benzoiloxi)-benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	497	7,1
3-(4-metoxifenil)-3-(4-(4-metoxifenil)piperazin-1-il)fenil)-13-etil-13-hidroxi-6-metoksi-7-(4-(4-(4-hexilbenzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	499	5,4
2-fenil-2-{4-[4-(4-metoksi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-benzofuro[3',2':7,8]benzo[b]pirano	583	4,2
2-fenil-2-{4-[4-(4-metoksi-fenil)-piperazin-1-il]-fenil}-benzotieno[3',2':7,8]benzo[b]pirano	510	4,1
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13,13-dimetil-6-metoksi-7-(4-(4-(4-(6-(4-(4-(4-(4-nonilfenilcaboniloxi)fenil)oxicarbonil)fenoksi)hexiloxi)benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	495	6,1
3-fenil-3-(4-(4-fenil-piperazin-1-il)fenil)-13-hidroxi-13-etil-6-metoksi-7-(4-(4-(4-(6-(4-(4-(4-(4-nonilfenilcaboniloxi)fenil)oxicarbonil)fenoksi)hexiloxi)benzoiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	500	6,0
3-fenil-3-(4-pirrolidinifenil)-13,13-dimetil-6-metoksi-7-(4-(4-(4-(6-(4-(4-(4-(4-nonilfenilcaboniloxi)fenil)oxicarbonil)fenoksi)hexiloxi)fenil)piperazin-1-il)indeno[2',3':3,4]nafto[1,2-b]pirano	627	6,5

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto fotocromico no térmicamente reversible representado por una de Fórmula X y Fórmula XI:

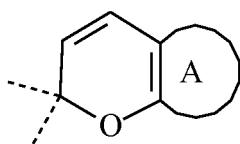


5

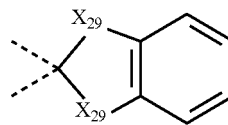
en donde:

10 (a) A se selecciona entre nafto, benzo, fenantro, fluoranteno, anteno, quinolino, tieno, furo, indolo, indolino, indeno, benzofuro, benzotieno, tiofeno, nafto indenocondensado, nafto heterociclocondensado y benzo heterociclocondensado;

(b) AA es un grupo representado por una de las Fórmulas xv y xvi:



xv



xvi

15

en donde X<sub>29</sub> se selecciona independientemente en cada ocasión entre -C(R'')(R'')-, -O-, -S- y -N(R''')-, en donde R'' se selecciona independientemente en cada ocasión entre hidrógeno, un alquilo sustituido o sin sustituir, cicloalquilo, arilalquilo o juntos forman cicloalquilo que está sustituido o sin sustituir; R''' se selecciona independientemente en cada ocasión entre un grupo alquilo, arilo o arilalquilo que está sin sustituir o sustituido con al menos uno de:

20

(i) -CH(CN)<sub>2</sub> o -CH(COOX<sub>1</sub>)<sub>2</sub> en donde X<sub>1</sub> se selecciona entre al menos uno de un agente de alargamiento L, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> que está sin sustituir o monosustituido con fenilo, fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) que está monosustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y un grupo arilo que está sin sustituir, mono o disustituido, en donde cada sustituyente arilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

25

(ii) -CH(X<sub>2</sub>)(X<sub>3</sub>) en donde

(A) X<sub>2</sub> se selecciona entre al menos uno de un agente de alargamiento L, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y un grupo arilo que está sin sustituir, mono o disustituido, en donde cada sustituyente arilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>; y

30

(B) X<sub>3</sub> se selecciona entre al menos uno de -COOX<sub>1</sub>, -COX<sub>1</sub>, -COX<sub>4</sub> y -CH<sub>2</sub>OX<sub>5</sub>, en donde:

(1) X<sub>4</sub> se selecciona entre al menos uno de morfolino, piperidino, amino que está sin sustituir, mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y un grupo mono o disustituido escogido entre fenilamino y difenilamino, en donde cada sustituyente se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>; y

35

(2) X<sub>5</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L, hidrógeno, -C(O)X<sub>2</sub>, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> que está sin sustituir o monosustituido con fenilo o alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) que está monosustituido con alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) y un grupo arilo que está sin sustituir, mono o disustituido, en donde cada sustituyente arilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

40

(iii) -C(O)X<sub>24</sub>; en donde X<sub>24</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L, hidroxi, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo que está sin sustituir o monosustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, amino que está sin sustituir,

mono- o disustituido con al menos uno de alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo, bencilo y naftilo; o  
(iv) halógeno, hidroxilo, éster o amina;

(c) Y' se selecciona entre: -(Y<sub>1</sub>)C=C(Y<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(O)(O)- y -N(X<sub>7</sub>)-, en donde Y<sub>1</sub> e Y<sub>2</sub> juntos forman benzo, nafto, fenantro, furo, tieno, benzofuro, benzotieno e indolo, y X<sub>7</sub> se escoge entre:

(i) un agente de alargamiento L, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, acilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) sustituido con monoalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), fenilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) sustituido con monoalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>); alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</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>12</sub>), haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alilo, benzoilo, benzoilo monosustituido, naftoilo o naftoilo monosustituido, en donde cada uno de dichos sustituyentes benzoilo y naftoilo se selecciona independientemente entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

(ii) -CH(X<sub>8</sub>)X<sub>9</sub>, en donde X<sub>8</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L, hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>; y X<sub>9</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L, -CN, -CF<sub>3</sub> o -COOX<sub>10</sub>, en donde X<sub>10</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L, hidrógeno o alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

(iii) -C(O)X<sub>6</sub>, en donde X<sub>6</sub> se selecciona entre al menos uno de: un agente de alargamiento L, hidrógeno, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenoxi que está sin sustituir, mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, un grupo arilo que está sin sustituir, mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, un grupo amino que está sin sustituir, mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y un grupo fenilamino que está sin sustituir, mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

(iv) trialquilsililo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), trialcoxisililo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), dialquil (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)silil (alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) o dialcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)silil (alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>);

(d) B se elige de:

(i) hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alquilideno C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>, alquilidino C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>, vinilo, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, haloalquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alilo, halógeno y bencilo que está sin sustituir o monosustituido con al menos uno de alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

(ii) fenilo que está monosustituido en la posición *para* con al menos un sustituyente seleccionado entre: alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>7</sub>, alquilenos C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> de cadena lineal o ramificada, polioxialquilenos C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> de cadena lineal o ramificada, alquilenos C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub> cíclicos, fenileno, naftileno, fenileno sustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, mono- o poliuretano de alquilenos (C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>), mono- o poliéster de alquilenos (C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>), mono- o policarbonato de alquilenos (C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>), polisilanileno, polisiloxanileno y mezclas de los mismos, en donde el al menos un sustituyente está conectado con un grupo arilo de un material fotocromico;

(iii) -CH(CN)<sub>2</sub> y -CH(COOX<sub>1</sub>)<sub>2</sub>;

(iv) -CH(X<sub>2</sub>)(X<sub>3</sub>);

(v) un grupo arilo sin sustituir, mono-, di- o trisustituido; 9-julolidinilo; o un grupo heteroaromático sin sustituir, mono- o disustituido escogido entre piridilo, furanilo, benzofuran-2-ilo, benzofuran-3-ilo, tienilo, benzotien-2-ilo, benzotien-3-ilo, dibenzofuranilo, dibenzotienilo, carbazoilo, benzopiridilo, indolinilo o fluorenilo; en donde cada sustituyente se selecciona independientemente en cada ocasión entre:

(A) un agente de alargamiento L;

(B) -C(O)X<sub>6</sub>;

(C) arilo, haloarilo, cicloalquilarilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub> y un grupo arilo que está mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>;

(D) alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, cicloalquiloalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), arilalquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), ariloxialquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), mono- o dialquilaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), mono- o dialcoxilaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), haloalquilo y monoalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>);

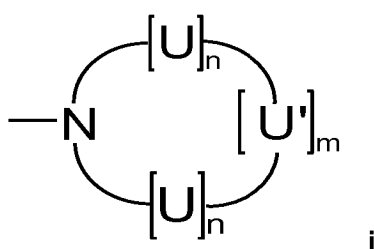
(E) alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, cicloalcoxi C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>, cicloalquiloalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), arilalcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), ariloxialcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), mono- o dialquilaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) y mono- o dialcoxilaril (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>)alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>);

(F) amido, amino, mono- o dialquilamino, diarilamino, piperazino, N-alquilpiperazino (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>), N-arilpiperazino, aziridino, indolino, piperidino, morfolino, tiomorfolino, tetrahydroquinolino, tetrahydroisoquinolino, pirrolidilo, hidroxilo, acriloxilo, metacriloxilo y halógeno;

(G) -OX<sub>7</sub> o -N(X<sub>7</sub>)<sub>2</sub>;

(H) -SX<sub>11</sub>, en donde X<sub>11</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, un grupo arilo que está sin sustituir o mono- o disustituido con alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o halógeno;

(I) un anillo que contiene nitrógeno representado por la Fórmula i:

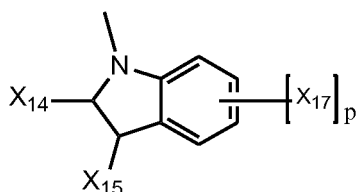


en donde

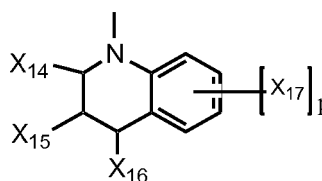
(1) n es un número entero seleccionado entre 0, 1, 2 y 3, con la condición de que si n es 0, U' es U y cada U se selecciona independientemente en cada ocasión entre -CH<sub>2</sub>-, -CH(X<sub>12</sub>)-, -C(X<sub>12</sub>)<sub>2</sub>-, -CH(X<sub>13</sub>)-, -C(X<sub>13</sub>)<sub>2</sub>- y -C(X<sub>12</sub>)(X<sub>13</sub>)-, en donde X<sub>12</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I a continuación y alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y X<sub>13</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I a continuación, fenilo y naftilo y

(2) U' se selecciona entre U, -O-, -S-, -S(O)-, -NH-, -N(X<sub>12</sub>)- or -N(X<sub>13</sub>)-, y m es un número entero seleccionado entre 1, 2 y 3, y

(J) un grupo representado por las Fórmulas ii o iii:



ii

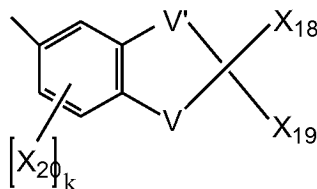


iii

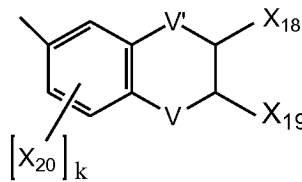
en donde X<sub>14</sub>, X<sub>15</sub>, y X<sub>16</sub> se seleccionan independientemente en cada ocasión entre un agente de alargamiento L, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo o naftilo o X<sub>14</sub> y X<sub>15</sub> juntos forman un anillo de 5 a 8 átomos de carbono; p es un número entero escogido entre 0, 1 o 2 y X<sub>17</sub> se selecciona independientemente en cada ocasión entre un agente de alargamiento L, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> o halógeno;

(vi) un grupo sin sustituir o monosustituido seleccionado entre pirazolilo, imidazolilo, pirazolinilo, imidazolinilo, pirrolidinilo, fenotiazinilo, fenoxazinilo, fenazinilo o acridinilo, en donde cada sustituyente se selecciona independientemente entre un agente de alargamiento L, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, fenilo, hidroxilo, amino o halógeno;

(vii) un grupo representado por las Fórmulas iv o v:



iv



v

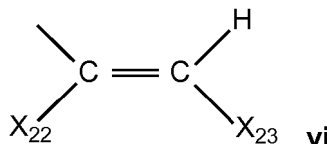
(A) V' se selecciona independientemente en cada fórmula entre -O-, -CH-, alquilenilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> y cicloalquilenilo C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>,

(B) V se selecciona independientemente en cada fórmula entre -O- o -N(X<sub>21</sub>)-, en donde X<sub>21</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L representado por la Fórmula I a continuación, hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y acilo C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>, siempre que si V es -N(X<sub>21</sub>)-, V' es -CH<sub>2</sub>-,

(C) X<sub>18</sub> y X<sub>19</sub> se seleccionan cada uno independientemente entre un agente de alargamiento L, hidrógeno y alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y

(D) k se escoge entre 0, 1 y 2 y cada X<sub>20</sub> se selecciona independientemente en cada ocasión entre un agente de alargamiento L, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, hidroxilo y halógeno; y

(viii) un grupo representado por la Fórmula vi:



vi

en donde

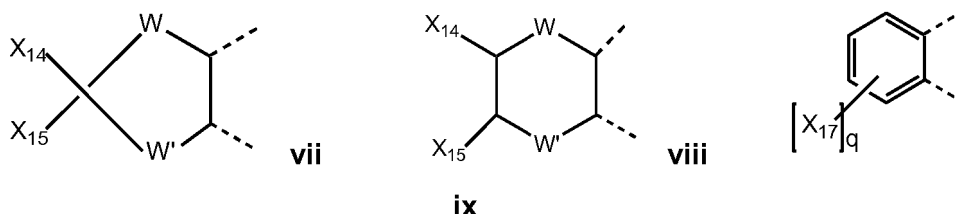
(A) X<sub>22</sub> se selecciona entre un agente de alargamiento L, hidrógeno y alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, y

(B) X<sub>23</sub> se escoge entre un agente de alargamiento L o un grupo sin sustituir, mono- o disustituido escogido entre naftilo, fenilo, furanilo y tienilo, en donde cada sustituyente se selecciona independientemente en cada ocasión entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub> y halógeno; y



(e) i es un número entero seleccionado entre 0 a 4 y cada R<sup>2</sup> se selecciona independientemente en cada ocasión entre:

- 5 (i) un grupo representado por B;  
 (ii) -C(O)X<sub>24</sub>;  
 (iii) -OX<sub>7</sub> y -N(X<sub>7</sub>)<sub>2</sub>;  
 (iv) -SX<sub>11</sub>;  
 (v) el anillo que contiene nitrógeno representado por la Fórmula i,  
 (vi) el grupo representado por las Fórmulas ii o iii;  
 10 (vii) grupos R<sup>2</sup> inmediatamente adyacentes juntos forman en un grupo representado por las Fórmulas vii, viii o ix:

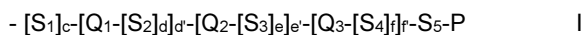


15 en donde

- (A) W y W' se seleccionan independientemente en cada ocasión entre -O-, -N(X<sub>7</sub>)-, -C(X<sub>14</sub>)-, -C(X<sub>17</sub>)-,  
 (B) X<sub>14</sub>, X<sub>15</sub> y X<sub>17</sub> son como se ha expuesto anteriormente y  
 (C) q es un número entero seleccionado entre 0, 1, 2, 3 y 4; y

20 (viii) un agente de alargamiento L;

siempre que el compuesto fotocromico no térmicamente reversible comprenda al menos un agente de alargamiento L y cada agente de alargamiento L se selecciona independientemente en cada ocasión de un compuesto representado por la Fórmula I:



en donde:

- 30 (a) cada Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> y Q<sub>3</sub> se selecciona independientemente en cada ocasión entre: un grupo divalente escogido entre: un grupo aromático no sustituido o sustituido, un grupo alicíclico no sustituido o sustituido, un grupo heterocíclico no sustituido o sustituido y mezclas de los mismos, en donde los sustituyentes se escogen entre: un grupo  
 35 representado por P, tiol, amida, mesógenos de cristal líquido, halógeno, alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, poli(alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), amino, aminoalquileo (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), alquilamino C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, di-alquilamino (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, alqueno C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>, alquino C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>, alquil C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>-alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>), alcoxycarbonilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, alquilcarbonilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, alquilcarbonato C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, arilcarbonato, acetilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, cicloalquilo C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>, cicloalcoxi C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>, isocianato, amido, ciano, nitro, un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub> de cadena lineal o ramificada que está monosustituido con ciano, halo, o alcoxi C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>, o polisustituido con halo y un grupo representado por una o más de las siguientes fórmulas: -M(T)<sub>(t-1)</sub> y -M(OT)<sub>(t-1)</sub>, en donde M se escoge de aluminio, antimonio, tantalio, titanio, circonio y silicio, T se elige de radicales organofuncionales, radicales de hidrocarburo organofuncionales, radicales de hidrocarburo alifático y radicales de hidrocarburo aromático, y t es la valencia de M;

(b) c, d, e, y f se eligen cada uno independientemente de un número entero que varía de 0 a 20, ambos incluidos; y cada S<sub>1</sub>, S<sub>2</sub>, S<sub>3</sub>, S<sub>4</sub> y S<sub>5</sub> se elige independientemente para cada aparición de una unidad de espaciador elegida de:

- 45 (i) -(CH<sub>2</sub>)<sub>g</sub>-, -(CF<sub>2</sub>)<sub>h</sub>-, -Si(CH<sub>2</sub>)<sub>g</sub>-, -(Si[(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>O]<sub>h</sub>)-, en donde g se escoge independientemente en cada ocasión de 1 a 20; h es un número entero de 1 a 16 incluidos;  
 (ii) -N(Z)-, -C(Z)=C(Z)-, -C(Z)=N-, -C(Z')-C(Z')-, en donde Z se selecciona independientemente en cada ocasión entre hidrógeno, alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo y arilo y Z' se selecciona independientemente en cada ocasión entre alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>, cicloalquilo y arilo; y  
 50 (iii) -O-, -C(O)-, -C≡C-, -N=N-, -S-, -S(O)-, -S(O)(O)-, residuo alquileo C<sub>1</sub>-C<sub>24</sub> de cadena lineal o ramificada, estando dicho residuo de alquileo C<sub>1</sub>-C<sub>24</sub> sin sustituir, monosustituido con ciano o halo, o polisustituido con halo,

55 con la condición de que cuando dos unidades de espaciador que comprenden heteroátomos están unidas juntas, las unidades de espaciador se unan de manera que los heteroátomos no estén directamente unidos entre sí y cuando S<sub>1</sub> y S<sub>5</sub> están unidos a PC y P, respectivamente, están unidos de modo que dos heteroátomos no están directamente unidos entre sí;

(c) P se selecciona entre: aziridinilo, hidrógeno, hidroxilo, arilo, alquilo, alcoxi, amino, alquilamino, alquilalcoxi,

- 5 alcoxialcoxi, nitro, éter de polialquilo, alquil (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alcoxi (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)-alquilo (C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>), polietileno, polipropileno, etileno, acrilato, metacrilato, 2-cloroacrilato, 2-fenilacrilato, acrilofenileno, acrilamida, metacrilamida, 2-cloroacrilamida, 2-fenilacrilamida, epoxi, isocianato, tiol, tioisocianato, éster del ácido itacónico, éter vinílico, ester vinílico, un derivado de estireno, siloxano, polímeros de cristal líquido de cadena principal y de cadena lateral,
- 10 derivados de etilenimina, derivados de ácido maleico, derivados de ácido fumárico, derivados de ácido cinámico sin sustituir, derivados de ácido cinámico que están sustituidos con al menos uno de metilo, metoxi, ciano y halógeno, y grupos monovalentes o divalentes quirales y no quirales sustituidos o sin sustituir elegidos de radicales esteroides, radicales terpenoides, radicales alcaloides y mezclas de los mismos, en donde los sustituyentes son elegidos independientemente de alquilo, alcoxi, amino, cicloalquilo, alquilalcoxi, fluoroalquilo, cianoalquilo, cianoalcoxi y mezclas de los mismos; y
- (d) d', e' y f' se escogen cada uno independientemente de 0, 1, 2, 3 y 4, con la condición de que una suma de d' + e' + f' sea al menos 1.
- 15 2. El compuesto fotocromático no térmicamente reversible de acuerdo con la reivindicación 1, en donde en cualquiera de las Fórmulas X o XI el número entero i es al menos 1 y al menos uno de los grupos R<sup>2</sup> es un agente de alargamiento L.
- 20 3. El compuesto fotocromático no térmicamente reversible de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el compuesto fotocromático comprende al menos un grupo R<sup>2</sup> que está sustituido con un agente de alargamiento L.
4. El compuesto fotocromático no térmicamente reversible de acuerdo con la reivindicación 1 representado por la Fórmula X, en donde dicho agente de alargamiento L está sustituido sobre un grupo R<sup>2</sup> o B.
- 25 5. El compuesto fotocromático no térmicamente reversible de acuerdo con la reivindicación 1 representado por la Fórmula XI, en donde dicho agente de alargamiento L está sustituido sobre un grupo R<sup>2</sup> o AA.

FIG. 1

