



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0092336
(43) 공개일자 2017년08월11일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09B 11/28 (2006.01) C09B 67/00 (2006.01)
C09B 67/40 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09B 11/28 (2013.01)
C09B 67/00 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-0013555
(22) 출원일자 2016년02월03일
심사청구일자 2016년02월03일

(71) 출원인
충남대학교산학협력단
대전광역시 유성구 대학로 99 (궁동, 충남대학교)
(72) 발명자
손영아
대전광역시 유성구 지족로 343, 211동 2201호
사태쉬쿠마르 안구필라이
대한민국 대전광역시 유성구 대학로 99
(74) 대리인
특허법인 무한

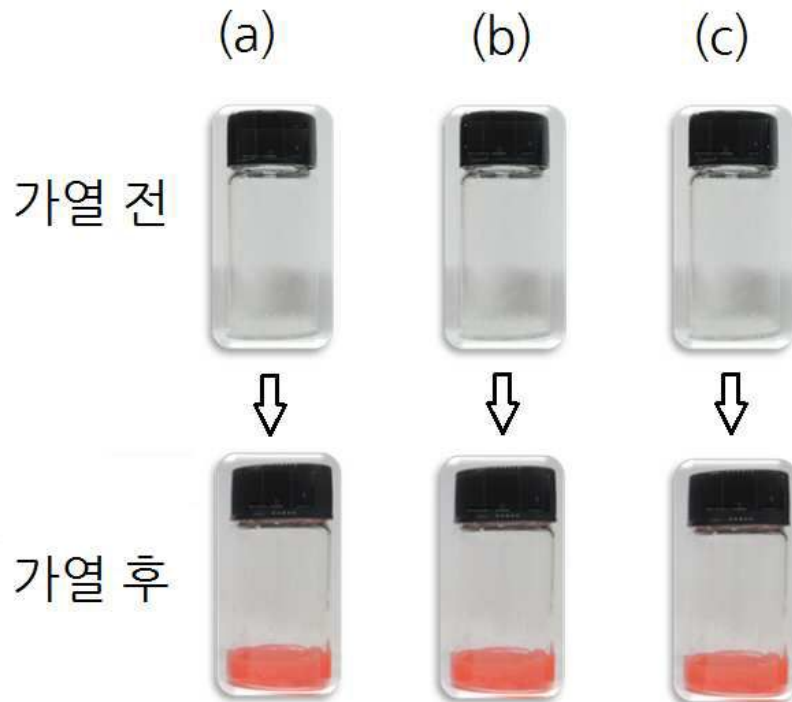
전체 청구항 수 : 총 17 항

(54) 발명의 명칭 감온 염료 화합물 및 이를 포함하는 감온 염료 조성물

(57) 요약

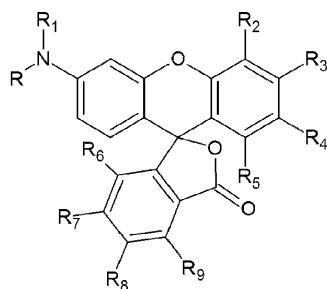
본 발명은, 염료 화합물 및 이를 포함하는 조성물에 관한 것으로, 보다 구체적으로, 하기의 화학식 I로 표시되는 화합물, 이의 이성질체 또는 이 둘을 포함하는 염료 화합물 및 이를 포함하는 염료 조성물에 관한 것이다. 본 발명은, 상기 염료 화합물의 감온 변색 특성을 이용하여 다양한 분야의 제품에 적용할 수 있는 신규한 염료 화합물 (뒷면에 계속)

대표도 - 도1



물을 제공할 수 있다.

[화학식 I]



(R 내지 R9는 청구항 제1항에서 정의된 바와 같다.)

(52) CPC특허분류

C09B 67/0082 (2013.01)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 NRF Grant No. 2015064440, No. 2015063131

부처명 미래창조과학부

연구관리전문기관 한국연구재단

연구사업명 원천기술개발사업 (민군기술협력사업)

연구과제명 "은폐염페를 위한 신규 감온색소 및 가변패턴 섬유소재 개발", " 감온색소의 구조설계, 합성 및 변색특성 개발 "

기 여 율 1/1

주관기관 충남대학교

연구기간 2014.11.01 ~ 2017.09.30

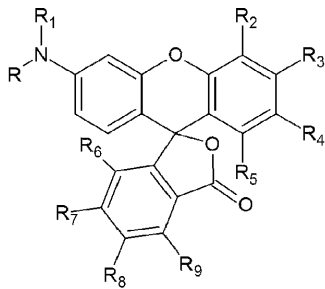
명세서

청구범위

청구항 1

하기의 화학식 I로 표시되는 화합물, 이의 이성질체 또는 이 둘을 포함하는 염료 화합물:

[화학식 I]



(여기서, R 및 R1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

R2 내지 R5는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

R6 내지 R9는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 니트로기, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이다.)

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 R 및 R1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이고,

상기 R2 내지 R5는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이며,

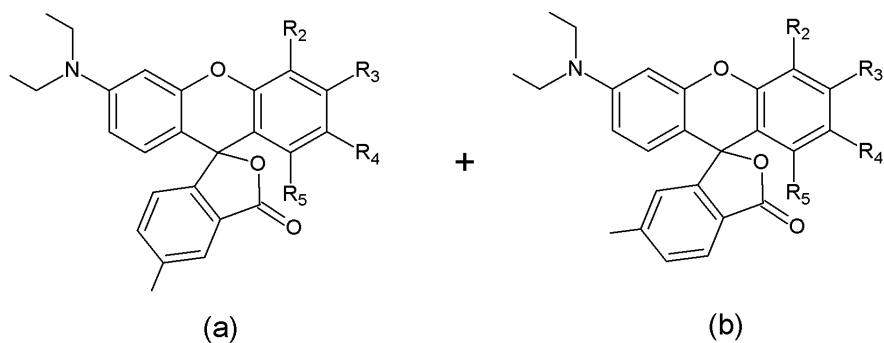
상기 R6 내지 R9는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기인 것인, 염료 화합물.

청구항 3

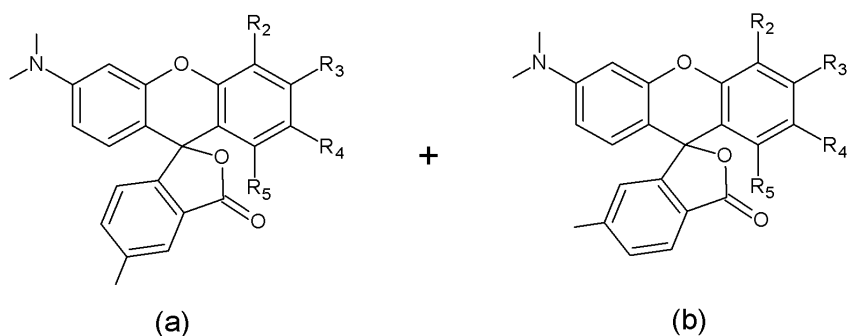
제1항에 있어서,

상기 이성질체는, 하기의 화학식 Ic 또는 화학식 Id로 표시되는 화합물인 것인, 염료 화합물.

[화학식 Ic]



[화학식 Id]

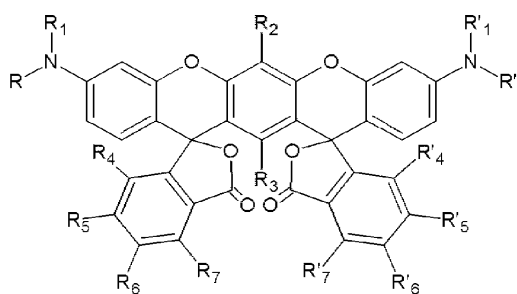


(여기서, 상기 R2 내지 R5는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알킬닐기이다.)

청구항 4

하기의 화학식 II로 표시되는 화합물을 포함하는 염료 화합물:

[화학식 II]



(여기서, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

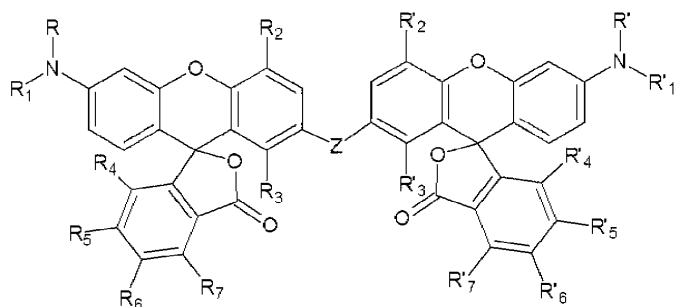
R2 및 R3은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7은 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이다.)

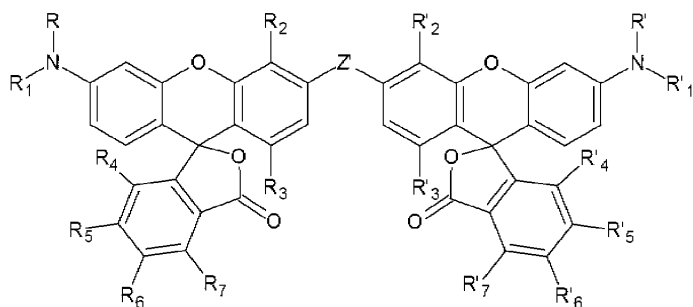
청구항 5

하기의 화학식 III-1 내지 III-4로 표시되는 화합물을 포함하는 염료 화합물:

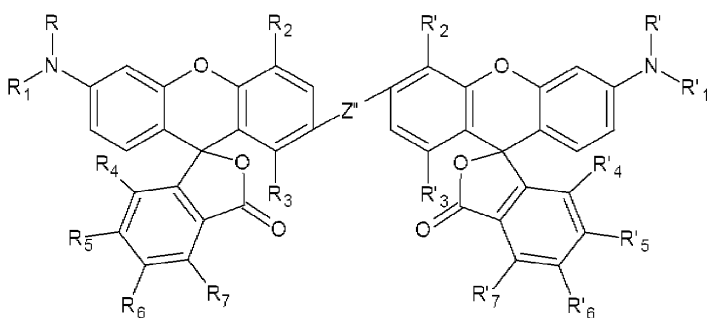
[화학식 III-1]



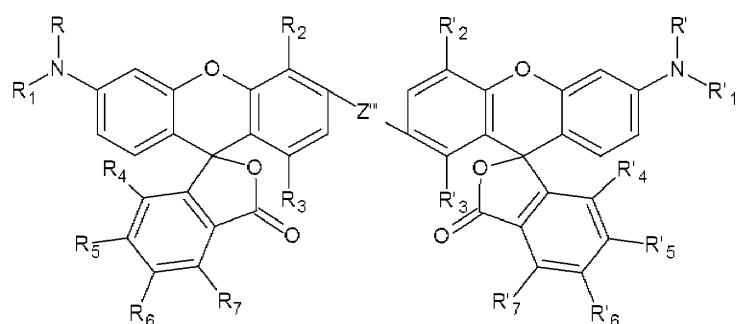
[화학식 III-2]



[화학식 III-3]



[화학식 III-4]



(여기서, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

R2, R3, R'2, 및 R'3는 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7은 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는 서로 동일하거나 또는 상이하고, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C30 방향족 고리; 및 C2-C30 방향족 헤테로 고리; 중 하나 이상으로 치환된 아민이다.)

청구항 6

제5항에 있어서,

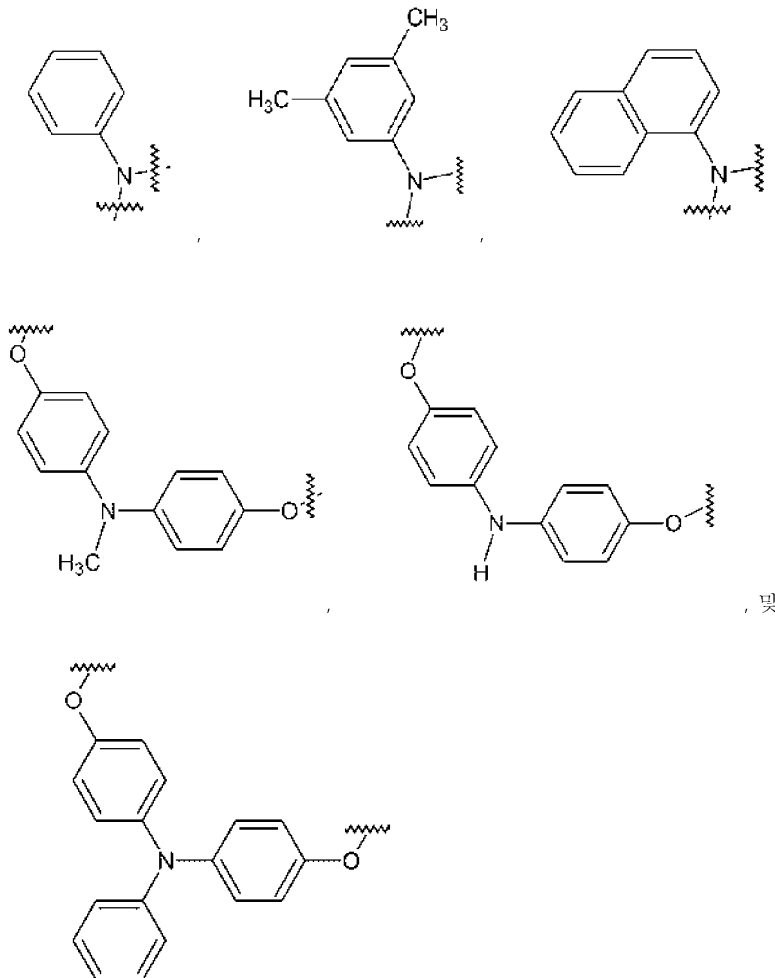
상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는 서로 동일하거나 또는 상이하고, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C10 방향족 고리; 및 N, S, P, 또는 O를 포함하는 치환 또는 비치환된 C4-C9 방향족 헤테로 고리; 중 하나 이상으로 치환된 아민기이며,

상기 방향족 고리는, 질소, 산소, 히드록실기 및 C1-C10 알킬기 중 어느 하나 이상으로 치환되는 것인, 염료 화합물.

청구항 7

제5항에 있어서,

상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는,



, 및

으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을

포함하는 것인, 염료 화합물.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,
상기 화합물은 감온 변색 화합물인 것인, 염료 화합물.

청구항 9

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항의 염료 화합물;
산성 활성화제 및
용매;
를 포함하는, 염료 조성물.

청구항 10

제9항에 있어서,
상기 산성 활성화제는, 상기 염료 조성물 100 중량부에 대해 0.5 내지 10 중량부로 포함하고,
상기 산성 활성화제는, 활성 점토(activated clays), 페놀 수지, 비스페놀-A, 4-터트-부틸페놀, 4-페닐페놀, 4-하이드록시디페닐옥사이드, α -나프톨, β -나프톨, 4-하이드록시벤조산 메틸 에스테르, 4-하이드록시아세토페논, 2,2'-디하이드록시 디페닐, 4,4'-이소프로필리텐-디페놀, 4,4'-이소프로필리텐-비스-(2-페닐페놀), 4,4'-비스-(하이드록시페닐)발레르산, 하이드로퀴논, 1-하이드록시-2-나프토산, 갈산, 붕산, 타르타르산, 옥살산, 말레산 및 숙신산으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함하는 것인, 염료 조성물.

청구항 11

제9항에 있어서,
상기 용매는, 상기 염료 조성물 100 중량부에 대해 70 중량부 내지 98 중량부로 포함되고,
상기 용매는, 저융점 용매이며,
상기 저융점 용매는, 메틸 스테아레이트, 에틸 스테아레이트, 메틸 헥사노에이트, 메틸 헵타노에이트, 메틸 옥타노에이트, 메틸 라우레이트, 메틸 올레이트, 메틸 아디페이트, 메틸 카프릴레이트, 메틸 카프로에이트, 메틸 안트라니레이트, 메틸 팔미테이트, 메틸 팔미토에이트, 메틸 옥살레이트, 메틸 2-노나노에이트, 메틸 벤조에이트, 2-메틸벤조페논, 메틸 베헤네이트(도코소노에이트), 메틸 벤질레이트, 메틸벤질 아세테이트, 트리메틸 보레이트, 메틸 카프레이트(데카노에이트), 메틸부틸레이트, 메틸데카노에이트, 메틸 사이클로헥산카르복실레이트, 메틸 디메톡시아세테이트, 메틸 디페닐아세테이트, 메틸 에난테이트, 메틸 헵타노에이트(에난테이트) 및 메틸 리노레이트로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함하는 것인, 염료 조성물.

청구항 12

제9항에 있어서,
상기 조성물은 감온 변색 조성물이며,
상기 조성물은 30 ℃ 이상의 온도에서 변색되는 것인, 염료 조성물.

청구항 13

제9항에 있어서,
상기 조성물은 액체 형태, 고체 형태, 또는 이 둘의 형태의 혼합물인 것인, 염료 조성물.

청구항 14

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항의 염료 화합물을 포함하는 제품.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 염료 화합물이 코팅, 함침, 또는 성형된 기재를 포함하는 것인, 제품.

청구항 16

제14항에 있어서,

상기 기재는 셀룰로오스 종이; 천연 섬유; 합성 섬유; 직물; 및 금속, 폴리머 수지 및 유리 분말 또는 시트;로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함하는 것인, 제품.

청구항 17

제14항에 있어서,

상기 제품은 상기 염료 화합물과 혼합된 액체, 고체 또는 이 둘을 포함하는 제형인 것인, 제품

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은, 감온 염료 화합물, 이를 포함하는 감온 염료 조성물 및 제품에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 열변색성 재료 또는 색소 재료(thermochromic materials/pigment)는, 특정 온도 범위 내에서 재료의 구조의 변형에 따라 변색되는 특성을 갖는 것으로, 이러한 재료는 다양한 산업 분야에 활용되고 있다. 예를 들어, 물의 끓는 점에서 변색되는 조리 기구, 물 또는 음식이 섭취하기 위한 적절한 온도인지를 보여주는 베이비 스푼 또는 물병, 또는 배스 토이, 또는 레이저의 열에 의해 변색되는 효과를 이용한 레이저 프린트 잉크, 현상액 등이 있다.

[0003] 최근에서 의류, 코스메틱 분야, 의료 분야 등에서 적용되고 있고, 대표적으로, 기후 등에 반응하는 운동 선수를 위한 운동복이다. 하지만, 이러한 운동복은, 발색 강도가 약하여 인체의 활동에 따른 좁은 온도 범위 내에서 인체 상태에 대한 정보는 알려 주지 못하며, 예를 들어, 체온, 체내의 열량 소비 등에 대한 정보를 제공할 수 없고, 이러한 정보를 얻기 위해서 전기 센서 등이 장착되어야 한다.

[0004] 코스메틱 분야는, 온도 변화에 따라 반응하는 열변색성 재료, 약학적으로 허용 가능한 담체 등을 포함하는 화장품이 제시되고 있으나, 온도 변화를 일으키기 위해 물과 상호작용하는 작용제가 더 필요하고, 온도에 민감하게 반응하는 것이 어렵고, 발색 강도 등이 약하여 온도에 따른 변색을 정확하게 확인하는 것이 어렵다.

[0005] 또한, 일반적으로 열변색성 재료 또는 색소 재료는 용매 고체와 혼합되어 사용되고, 주위 온도에 따라 색이 어두워지거나 또는 무색에서 색이 형성되는 것으로 변색 특성을 제공하고 있으나, 용매 고체의 융점까지 열이 가해질 경우에, 가역성이 저하되어 변색의 강도가 약해지는 문제점이 있다.

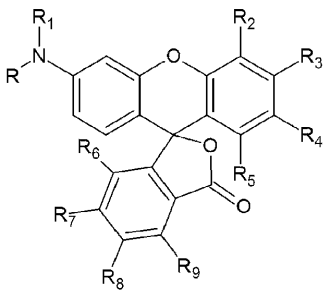
발명의 내용

해결하려는 과제

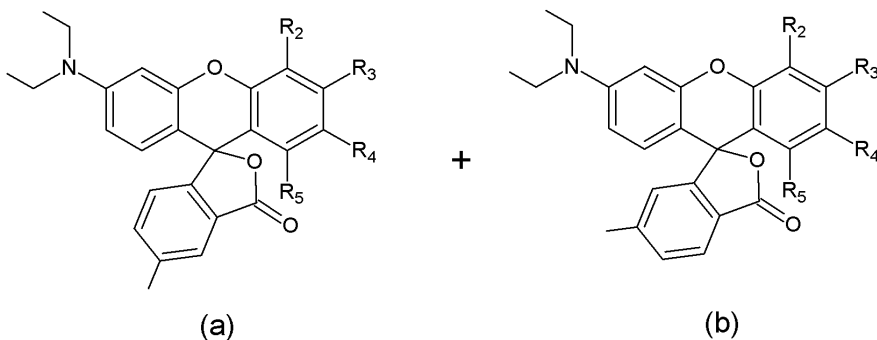
- [0006] 본 발명은 전술한 바와 같은 문제점을 해결하기 위한 것으로, 온도에 따라 강한 발색 강도를 제공하고, 원하는 온도 범위 내에서 감은 변색을 확인할 수 있는, 염료 화합물 및 이를 포함하는 염료 조성물을 제공하는 것이다.
- [0007] 또한, 본 발명은 본 발명에 의한 염료 화합물을 포함하는 제품을 제공하는 것이다.
- [0008] 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 이상에서 언급한 과제로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 과제들은 아래의 기재로부터 통상의 기술자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

- [0009] 본 발명의 하나의 양상은, 하기의 화학식 I로 표시되는 화합물, 이의 이성질체 또는 이 둘을 포함하는 염료 화합물에 관한 것이다.
- [0010] [화학식 I]

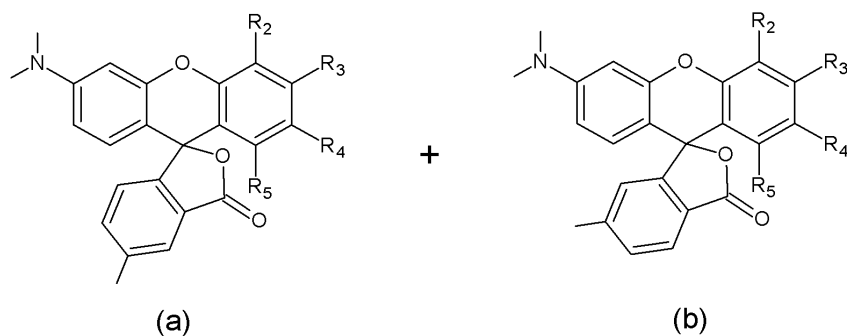


- [0011]
- [0012] 여기서, R 및 R1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,
- [0013] R2 내지 R5는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,
- [0014] R6 내지 R9는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기일 수 있다.
- [0015] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 R 및 R1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이고, 상기 R2 내지 R5는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이며, 상기 R6 내지 R9는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기일 수 있다.
- [0016] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 이성질체는, 하기의 화학식 Ic 또는 화학식 Id로 표시되는 화합물일 수 있다.
- [0017] [화학식 Ic]



[0018]

[0019] [화학식 Id]

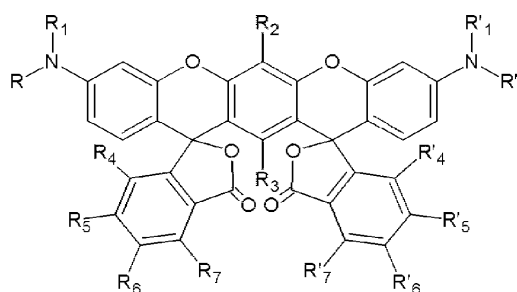


[0020]

[0021] (여기서, 상기 R2 내지 R5는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알킬닐기이다.)

[0022] 본 발명의 다른 양상에 따라, 하기의 화학식 II로 표시되는 화합물인 염료 화합물에 관한 것이다.

[0023] [화학식 II]



[0024]

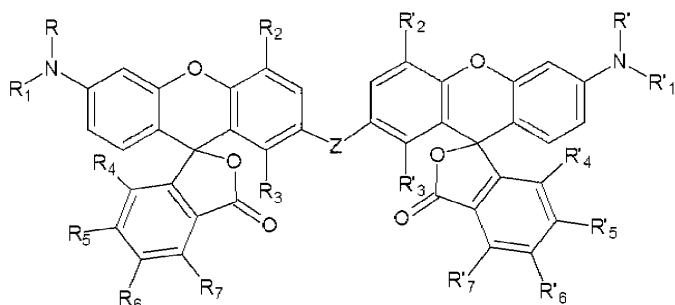
[0025] 여기서, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

[0026] R2 및 R3은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

[0027] R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7은 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기일 수 있다.

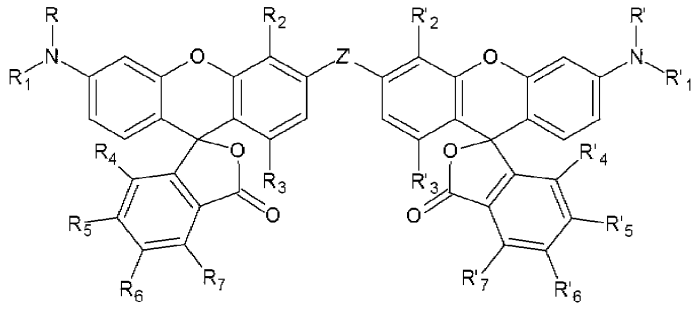
[0028] 본 발명의 또 다른 양상은, 하기의 화학식 III-1 내지 III-4로 표시되는 화합물인 염료 화합물일 수 있다.

[0029] [화학식 III-1]



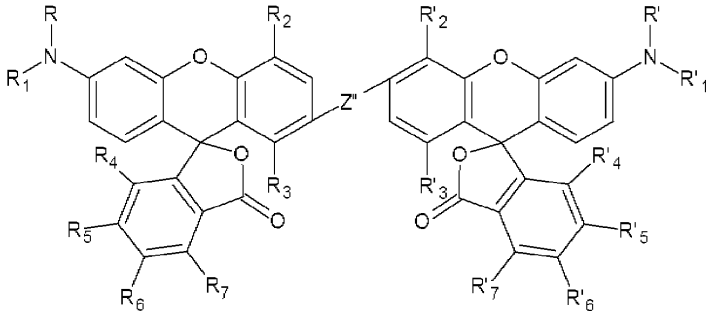
[0030]

[0031] [화학식 III-2]



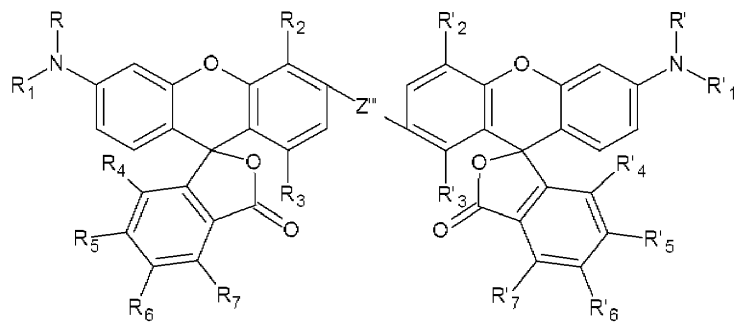
[0032]

[0033] [화학식 III-3]



[0034]

[0035] [화학식 III-4]



[0036]

[0037] 여기서, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

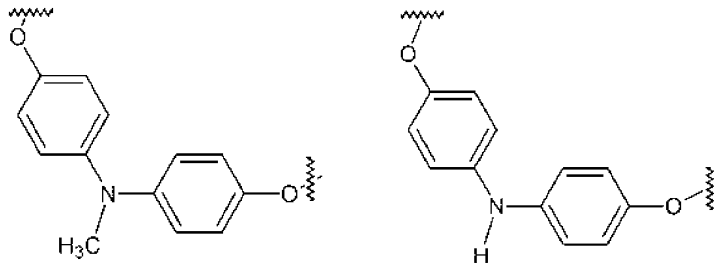
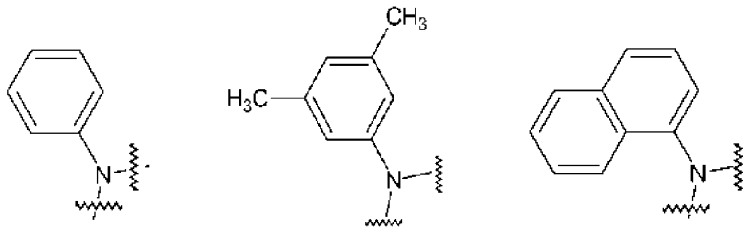
[0038] R2, R3, R'2, 및 R'3은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

[0039] R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7은 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

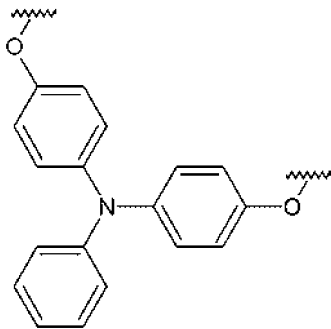
[0040] 상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는 서로 동일하거나 또는 상이하고, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C30 방향족 고리; 및 C2-C30 방향족 헤테로 고리; 중 하나 이상으로 치환된 아민일 수 있다.

[0041] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는 서로 동일하거나 또는 상이하고, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C10 방향족 고리; 및 N, S, P, 또는 O를 포함하는 치환 또는 비치환된 C4-C9 방향족 헤테로 고리; 중 하나 이상으로 치환된 아민기이며, 상기 방향족 고리는, 질소, 산소, 히드록실기 및 C1-C10 알킬기 중 어느 하나 이상으로 치환될 수 있다.

[0042] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는,



및



- [0043] 으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다.
- [0044] 본 발명의 일 실시예에 따라, 본 발명에 의한 염료 화합물은, 감온 변색 화합물일 수 있다.
- [0045] 본 발명의 또 다른 양상에 따라, 본 발명에 의한 염료 화합물; 산성 활성화제; 및 용매; 를 포함하는 염료 조성물에 관한 것이다.
- [0046] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 산성 활성화제는, 상기 염료 조성물 100 중량부에 대해 0.5 내지 10 중량부로 포함될 수 있다.
- [0047] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 산성 활성화제는, 활성 점토(activated clays), 페놀 수지, 비스페놀-A, 4-터트-부틸페놀, 4-페닐페놀, 4-하이드록시디페닐옥사이드, α -나프톨, β -나프톨, 4-하이드록시벤조산 메틸 에스테르, 4-하이드록시아세트페논, 2,2'-디하이드록시 디페닐, 4,4'-이소프로필리덴-디페놀, 4,4'-이소프로필리덴-비스-(2-페닐페놀), 4,4'-비스-(하이드록시페닐)발레르산, 하이드로퀴논, 1-하이드록시-2-나프토산, 갈산, 붕산, 타르타르산, 옥살산, 말레산 및 숙신산으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다.
- [0048] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 용매는, 상기 염료 조성물 100 중량부에 대해 70 중량부 내지 98 중량부로 포함될 수 있다.
- [0049] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 용매는, 저융점 용매이며, 상기 저융점 용매는, 메틸 스테아레이트, 에틸 스테아레이트, 메틸 헥사노에이트, 메틸 헵타노에이트, 메틸 옥타노에이트, 메틸 라우레이트, 메틸 올레이트, 메틸 아디페이트, 메틸 카프릴레이트, 메틸 카프로에이트, 메틸 안트라니레이트, 메틸 팔미테이트, 메틸 팔미토에이트, 메틸 옥살레이트, 메틸 2-노나노에이트, 메틸 벤조에이트, 2-메틸벤조페논, 메틸 베헤네이트(도코소노에이트), 메틸 벤질레이트, 메틸벤질 아세테이트, 트리메틸 보레이트, 메틸 카프레이트(데카노에이트), 메틸부틸레이트, 메틸데카노에이트, 메틸 사이클로헥산카르복실레이트, 메틸 디메톡시아세테이트, 메틸 디페닐아세테이트, 메틸 에난테이트, 메틸 헵타노에이트(에난테이트) 및 메틸 리노레이트로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다.

- [0050] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 조성물은 감온 변색 조성물이며, 상기 조성물은 30 ℃ 이상의 온도에서 변색될 수 있다.
- [0051] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 조성물은 액체 형태, 고체 형태, 또는 이 둘의 형태를 포함하는 혼합물일 수 있다.
- [0052] 본 발명의 또 다른 양상은, 본 발명에 의한 염료 화합물을 포함하는 제품에 관한 것이다.
- [0053] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 염료 화합물이 코팅, 함침, 또는 성형된 기재를 포함할 수 있다.
- [0054] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 기제는 셀룰로오스 종이; 천연 섬유; 합성 섬유; 직물; 및 금속, 폴리머 수지 및 유리 분말 또는 시트; 로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다.
- [0055] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 제품은 상기 염료 화합물과 혼합된 액체, 고체 또는 이 둘의 형태인 제형을 포함할 수 있다.

발명의 효과

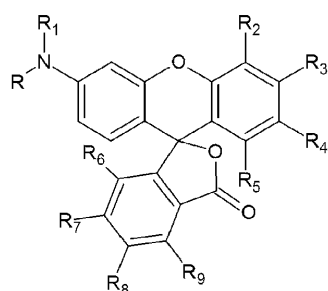
- [0056] 본 발명은, 온도에 따른 강한 발색을 나타내는 감온 변색 화합물을 제공할 수 있다. 본 발명에 의한 화합물은, 저용점 용매를 적용하여 원하는 온도 범위 내에서 감온 변색 특성을 나타낼 수 있다.
- [0057] 본 발명에 의한 화합물은, 감온 변색 특성이 필요한 다양한 제품에 적용이 가능하고, 정밀한 온도 변화의 감지가 필요한 분야에 적용할 수 있다.
- [0058] 본 발명은, 가열 등과 같은 고온에서 가역적으로 색변화를 확인할 수 있는 감온변색 화합물 및 이를 포함하는 조성물을 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0059] 도 1은 본 발명의 실시예 4에 따른 염료 조성물의 변색을 나타낸 이미지이다.
- 도 2a 내지 도 2b는 본 발명의 실시예 4에 따른 염료 조성물의 변색을 나타낸 UV-vis 및 반사 스펙트라이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0060] 이하 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예들을 상세히 설명한다. 본 발명을 설명함에 있어서, 관련된 공지 기능 또는 구성에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명을 생략할 것이다. 또한, 본 명세서에서 사용되는 용어(terminology)들은 본 발명의 바람직한 실시예를 적절히 표현하기 위해 사용된 용어들로, 이는 사용자, 운용자의 의도 또는 본 발명이 속하는 분야의 관례 등에 따라 달라질 수 있다. 따라서, 본 용어들에 대한 정의는 본 명세서 전반에 걸친 내용을 토대로 내려져야 할 것이다.
- [0061] 본 발명은 염료 화합물에 관한 것으로, 본 발명의 일 실시예에 따라 상기 염료 화합물은, 플루오란계(fluoran) 유도체를 포함하고, 상기 화합물은, 감온 변색을 나타낼 수 있다.
- [0062] 본 발명의 일 예로, 상기 플루오란계 화합물은, 하기의 화학식 I로 표시되는 화합물, 이의 이성질체 또는 이 둘을 포함할 수 있다.
- [0063] [화학식 I]



- [0064]
- [0065] 상기 화학식 I에서,

[0066] R 및 R1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기일 수 있다.

[0067] R2 내지 R5는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기일 수 있다.

[0068] R6 내지 R9는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기(-NO₂), 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기일 수 있다.

[0069] 바람직하게는, 상기 R 및 R1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이고,

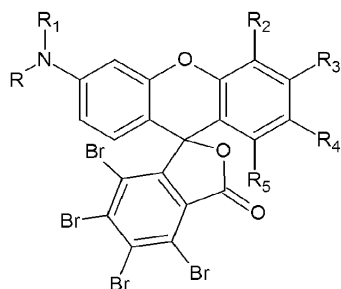
[0070] 상기 R2 내지 R5는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이며, 상기 R6 내지 R9는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기일 수 있다.

[0071] 더 바람직하게는, 상기 R 및 R1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기이고, 상기 R2 내지 R5는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기이며, 상기 R6 내지 R9는 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기일 수 일 수 있다.

[0072] 예를 들어, 상기 할로젠은, F, Cl, Br 및 I 중 하나 이상이며, 바람직하게는 Br, F 및 Cl일 수 있다.

[0073] 예를 들어, 상기 화학식 I로 표시되는 화합물은, 하기의 화학식 Ia로 표시되는 화합물을 포함하고, 하기의 화학식 Ia는 표 1에서 제시한 화합물 Ia-1 내지 Ia-46의 화합물일 수 있다.

[0074] [화학식 Ia]



[0075]

표 1

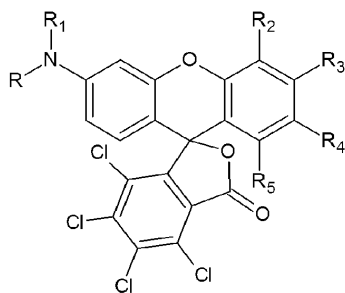
[0076]

No	R/R1	R2	R3	R4	R5
Ia-1	CH ₃ CH ₂	CH ₃	H	CH ₃	H
Ia-2	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	H	CH ₃
Ia-3	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	CH ₃	H
Ia-4	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	H	H
Ia-5	CH ₃ CH ₂	H	Tert-Butyl	H	H
Ia-6	CH ₃ CH ₂	H	H	H	H
Ia-7	CH ₃ CH ₂	H	H	Br	H
Ia-8	CH ₃ CH ₂	H	Cl	H	H
Ia-9	CH ₃ CH ₂	Cl	H	H	H
Ia-10	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	Cl	H
Ia-11	CH ₃ CH ₂	Br	H	Cl	H
Ia-12	CH ₃ CH ₂	H	Br	H	H

Ia-13	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	Br	H
Ia-14	CH ₃ CH ₂	CH ₃	H	Br	H
Ia-15	CH ₃ CH ₂	H	H	CH ₃ CH ₂	H
Ia-16	CH ₃ CH ₂	H	H	Propyl	H
Ia-17	CH ₃ CH ₂	Propyl	H	H	H
Ia-18	CH ₃ CH ₂	H	H	Isopropyl	H
Ia-19	CH ₃ CH ₂	H	Isopropyl	H	H
Ia-20	CH ₃ CH ₂	Isopropyl	H	H	H
Ia-21	CH ₃ CH ₂	H	H	Pentyl	H
Ia-22	CH ₃ CH ₂	H	H	Hexyl	H
Ia-23	CH ₃ CH ₂	H	H	Tert-Butyl	H
Ia-24	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H
Ia-25	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃
Ia-26	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	H
Ia-27	CH ₃	H	CH ₃	H	H
Ia-28	CH ₃	H	Tert-Butyl	H	H
Ia-29	CH ₃	H	H	Cl	H
Ia-30	CH ₃	H	H	Br	H
Ia-31	CH ₃	H	Cl	H	H
Ia-32	CH ₃	Cl	H	H	H
Ia-33	CH ₃	H	CH ₃	Cl	H
Ia-34	CH ₃	Br	H	Cl	H
Ia-35	CH ₃	H	Br	H	H
Ia-36	CH ₃	H	CH ₃	Br	H
Ia-37	CH ₃	CH ₃	H	Br	H
Ia-38	CH ₃	H	H	CH ₃ CH ₂	H
Ia-39	CH ₃	H	H	Propyl	H
Ia-40	CH ₃	Propyl	H	H	H
Ia-41	CH ₃	H	H	Isopropyl	H
Ia-42	CH ₃	H	Isopropyl	H	H
Ia-43	CH ₃	Isopropyl	H	H	H
Ia-44	CH ₃	H	H	Pentyl	H
Ia-45	CH ₃	H	H	Hexyl	H
Ia-46	CH ₃	H	H	Tert-Butyl	H

[0077] 예를 들어, 상기 화학식 I로 표시되는 화합물은, 하기의 화학식 Ib로 표시되는 화합물을 포함하고, 하기의 화학식 Ib는 표 2에서 제시한 화합물 Ib-1 내지 Ib-46의 화합물일 수 있다.

[0078] [화학식 Ib]



[0079]

표 2

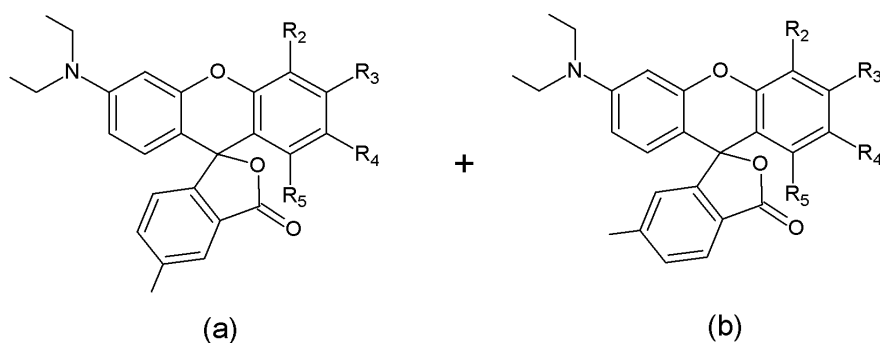
[0080]

No	R/R1	R2	R3	R4	R5
Ib-1	CH ₃ CH ₂	CH ₃	H	CH ₃	H
Ib-2	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	H	CH ₃
Ib-3	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	CH ₃	H
Ib-4	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	H	H
Ib-5	CH ₃ CH ₂	H	Tert-Butyl	H	H
Ib-6	CH ₃ CH ₂	H	H	H	H
Ib-7	CH ₃ CH ₂	H	H	Br	H
Ib-8	CH ₃ CH ₂	H	Cl	H	H
Ib-9	CH ₃ CH ₂	Cl	H	H	H
Ib-10	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	Cl	H
Ib-11	CH ₃ CH ₂	Br	H	Cl	H
Ib-12	CH ₃ CH ₂	H	Br	H	H
Ib-13	CH ₃ CH ₂	H	CH ₃	Br	H
Ib-14	CH ₃ CH ₂	CH ₃	H	Br	H
Ib-15	CH ₃ CH ₂	H	H	CH ₃ CH ₂	H
Ib-16	CH ₃ CH ₂	H	H	Propyl	H
Ib-17	CH ₃ CH ₂	Propyl	H	H	H
Ib-18	CH ₃ CH ₂	H	H	Isopropyl	H
Ib-19	CH ₃ CH ₂	H	Isopropyl	H	H
Ib-20	CH ₃ CH ₂	Isopropyl	H	H	H
Ib-21	CH ₃ CH ₂	H	H	Pentyl	H
Ib-22	CH ₃ CH ₂	H	H	Hexyl	H
Ib-23	CH ₃ CH ₂	H	H	Tert-butyl	H
Ib-23	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H
Ib-24	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃
Ib-25	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	H
Ib-26	CH ₃	H	CH ₃	H	H
Ib-27	CH ₃	H	Tert-Butyl	H	H
Ib-28	CH ₃	H	H	Cl	H

Ib-29	CH ₃	H	H	Br	H
Ib-30	CH ₃	H	Cl	H	H
Ib-31	CH ₃	Cl	H	H	H
Ib-32	CH ₃	H	CH ₃	Cl	H
Ib-33	CH ₃	Br	H	Cl	H
Ib-34	CH ₃	H	Br	H	H
Ib-35	CH ₃	H	CH ₃	Br	H
Ib-36	CH ₃	CH ₃	H	Br	H
Ib-37	CH ₃	H	H	CH ₃ CH ₂	H
Ib-38	CH ₃	H	H	Propyl	H
Ib-39	CH ₃	Propyl	H	H	H
Ib-40	CH ₃	H	H	Isopropyl	H
Ib-41	CH ₃	H	Isopropyl	H	H
Ib-42	CH ₃	Isopropyl	H	H	H
Ib-43	CH ₃	H	H	Pentyl	H
Ib-44	CH ₃	H	H	Hexyl	H
Ib-45	CH ₃	H	H	Tert-Butyl	H
Ib-46	CH ₃	Br	Br	Br	Br

[0081] 본 발명의 일 예로, 상기 플루오란계 화합물은, 이성질체 혼합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 이성질체 혼합물은, 하기의 화학식 Ic로 표시되는 화합물의 위치 이성질체 혼합물을 포함할 수 있다. 하기의 화학식 Ic는 표 3에서 제시한 화합물 Ic-1 내지 Ic-23의 화합물일 수 있다. 하기 화학식 Ic로 표시되는 화합물에서 (a)는, 상기 위치 이성질체 혼합물에서 50 % 이상; 60 % 이상; 또는 60 % 내지 70 %로 포함될 수 있다.

[0082] [화학식 Ic]



[0083]

표 3

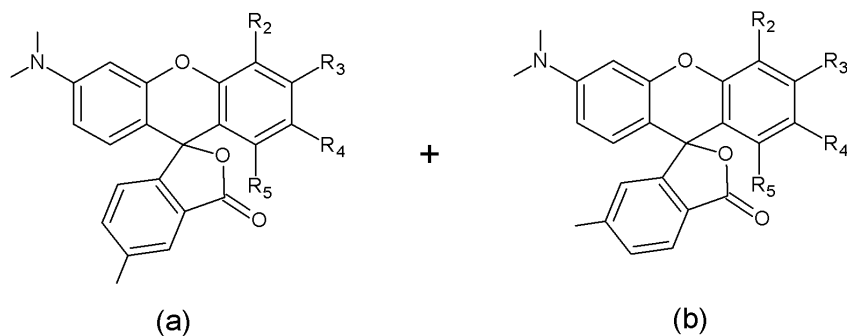
[0084]

No	R2	R3	R4	R5
Ic-1	CH ₃	H	CH ₃	H
Ic-2	H	CH ₃	H	CH ₃
Ic-3	H	CH ₃	CH ₃	H
Ic-4	H	CH ₃	H	H
Ic-5	H	Tert-Butyl	H	H
Ic-6	H	H	Cl	H

Ic-7	H	H	Br	H
Ic-8	H	Cl	H	H
Ic-9	Cl	H	H	H
Ic-10	H	CH ₃	Cl	H
Ic-11	Br	H	Cl	H
Ic-12	H	Br	H	H
Ic-13	H	CH ₃	Br	H
Ic-14	CH ₃	H	Br	H
Ic-15	H	H	CH ₃ CH ₂	H
Ic-16	H	H	Propyl	H
Ic-17	Propyl	H	H	H
Ic-18	H	H	Isopropyl	H
Ic-19	H	Isopropyl	H	H
Ic-20	Isopropyl	H	H	H
Ic-21	H	H	Pentyl	H
Ic-22	H	H	Hexyl	H
Ic-23	H	H	Tert-butyl	H

[0085] 예를 들어, 상기 이성질체 혼합물은, 하기의 화학식 Id로 표시되는 화합물의 위치 이성질체 혼합물을 포함할 수 있다. 하기의 화학식 Id는 표 4에서 제시한 화합물 Id-1 내지 Id-23의 화합물일 수 있다. 하기 화학식 Id로 표시되는 화합물에서 (a)는, 상기 위치 이성질체 혼합물에서 60 % 이상; 70 % 이상, 또는 80 % 내지 90 %; 로 포함될 수 있다.

[0086] [화학식 Id]



[0087]

丑 4

[0088]

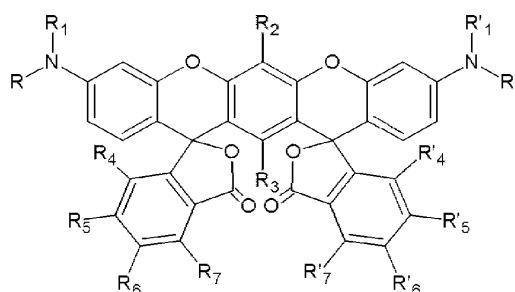
No	R2	R3	R4	R5
Id-1	CH ₃	H	CH ₃	H
Id-2	H	CH ₃	H	CH ₃
Id-3	H	CH ₃	CH ₃	H
Id-4	H	CH ₃	H	H
Id-5	H	Tert-Butyl	H	H
Id-6	H	H	Cl	H
Id-7	H	H	Br	H
Id-8	H	Cl	H	H
Id-9	Cl	H	H	H
Id-10	H	CH ₃	Cl	H
Id-11	Br	H	Cl	H
Id-12	H	Br	H	H
Id-13	H	CH ₃	Br	H

Id-14	CH ₃	H	Br	H
Id-15	H	H	CH ₃ CH ₂	H
Id-16	H	H	Propyl	H
Id-17	Propyl	H	H	H
Id-18	H	H	Isopropyl	H
Id-19	H	Isopropyl	H	H
Id-20	Isopropyl	H	H	H
Id-21	H	H	Pentyl	H
Id-22	H	H	Hexyl	H
Id-23	H	H	Tert-Butyl	H

[0089] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 염료 화합물은, 플루오로계 화합물의 이합체 또는 삼합체, 올리고머 또는 폴리머를 포함할 수 있다. 본 명세서에서 이합체, 삼합체, 올리고머 및 폴리머는 상기 화학식 I로 표시되는 화합물의 2 분자 이상을 서로 반응시켜 형성되는 화합물을 의미한다.

[0090] 본 발명의 일 예로, 상기 플루오로계 화합물의 이합체는, 하기의 화학식 II로 표시된 화합물일 수 있다.

[0091] [화학식 II]



[0092]

[0093] 상기 화학식 II에서, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

[0094] R2 및 R3은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기이고,

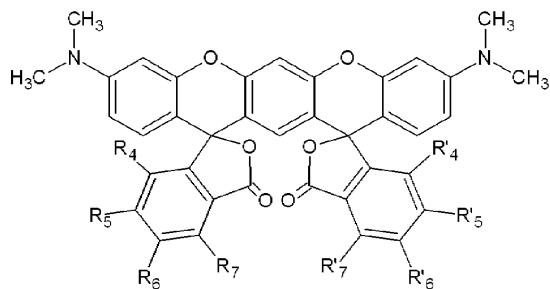
[0095] R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7은 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알킬닐기일 수 있다.

[0096] 바람직하게는, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알킬닐기이고, 상기 R2 내지 R3은, 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알킬닐기이며, 상기 R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7은, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알킬닐기일 수 있다.

[0097] 더 바람직하게는, 상기 R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기이고, 상기 R2 및 R3는, 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기이며, 상기 R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기일 수 있다. 상기 할로젠은, F, Cl, Br 및 I 중 하나 이상이며, 바람직하게는 Br 및 Cl일 수 있다.

[0098] 예를 들어, 상기 화학식 II로 표시되는 화합물은, 하기의 화학식 IIa로 표시되는 화합물을 포함하고, 하기의 화학식 IIa는 표 5에서 제시한 화합물 IIa-1 내지 IIa-9의 화합물일 수 있다.

[0099] [화학식 IIa]



[0100]

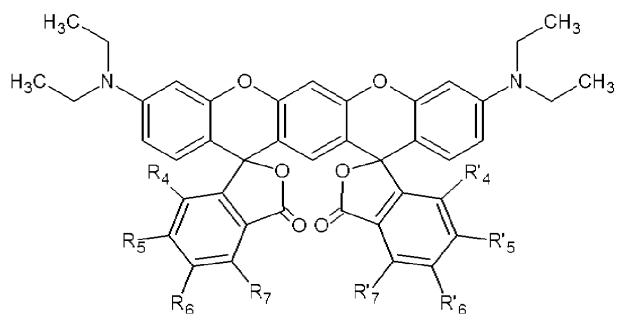
표 5

[0101]

No	R4/R4'	R5/R5'	R6/R6'	R7/R7'
IIa-1	H	H	CH ₃	H
IIa-2	H	H	F	H
IIa-3	H	H	H	F
IIa-4	H	H	Cl	H
IIa-5	H	H	NO ₂	H
IIa-6	H	Cl	Cl	H
IIa-7	Cl	Cl	Cl	Cl
IIa-8	Br	Br	Br	Br
IIa-9	H	H	Tert-Butyl	H

[0102] 예를 들어, 상기 화학식 II로 표시되는 화합물은, 하기의 화학식 IIb로 표시되는 화합물을 포함하고, 하기의 화학식 IIb는 표 6에서 제시한 화합물 IIb-1 내지 IIb-9의 화합물일 수 있다.

[0103] [화학식 IIb]



[0104]

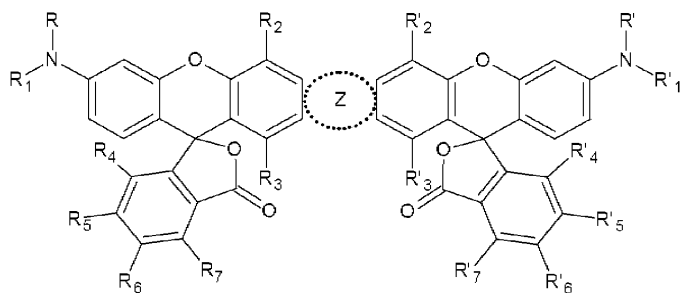
표 6

[0105]

No	R4/R4'	R5/R5'	R6/R6'	R7/R7'
IIb-1	H	H	CH ₃	H
IIb-2	H	H	F	H
IIb-3	H	H	H	F
IIb-4	H	H	Cl	H
IIb-5	H	H	NO ₂	H
IIb-6	H	Cl	Cl	H
IIb-7	Cl	Cl	Cl	Cl
IIb-8	Br	Br	Br	Br
IIb-9	H	H	Tert-Butyl	H

[0106] 본 발명의 일 예로, 상기 이합체는 하기의 화학식 III로 표시되는 화합물일 수 있다.

[0107] [화학식 III]



[0108]

[0109] 상기 화학식 III에서, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

[0110] R2, R3, R'2, 및 R'3는 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

[0111] R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7은 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C20 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C20 알키닐기이고,

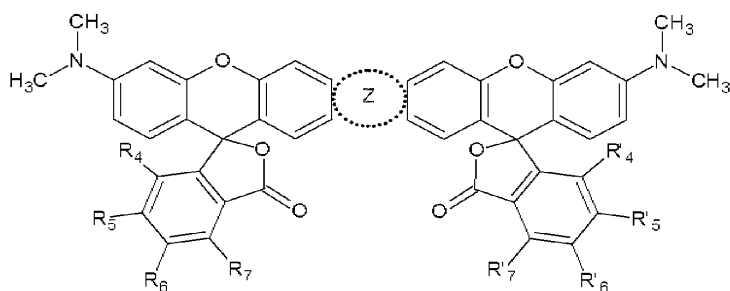
[0112] 바람직하게는, R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이고, 상기 R2, R3, R'2, R'3는, 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기이며, 상기 R4 내지 R7 및 R'4 내지 R'7는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기, 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알케닐기, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C2-C10 알키닐기 일 수 있다.

[0113] 더 바람직하게는, 상기 R, R1, R' 및 R'1은 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 직쇄 또는 분지쇄 C1-10 알킬기이고, 상기 R2, R3, R'2, R'3는, 동일하거나 또는 상이하고, 수소, 또는 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기이며, 상기 R4 내지 R7 및 R'5 내지 R'7는, 동일하거나 또는 상이하고, 할로젠, 수소, 니트로기, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기일 수 있다.

[0114] 예를 들어, 상기 할로젠은, F, Cl, Br 및 I 중 하나 이상이며, 바람직하게는 F, Br 및 Cl일 수 있다.

[0115] 예를 들어, 상기 화학식 III로 표시되는 화합물은, 하기의 화학식 IIIa로 표시되는 화합물을 포함하고, 하기의 화학식 IIIa는 표 7에서 제시한 화합물 IIIa-1 내지 IIIa-9의 화합물일 수 있다.

[0116] [화학식 IIIa]



[0117]

표 7

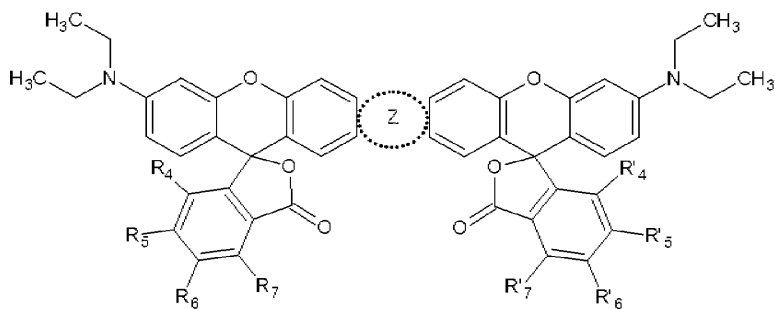
[0118]

No	R4/R4'	R5/R5'	R6/R6'	R7/R7'
IIIa-1	H	H	H	H
IIIa-2	H	H	CH ₃	H
IIIa-3	H	H	F	H
IIIa-4	H	H	H	F
IIIa-5	H	H	Cl	H

IIIa-6	H	H	NO ₂	H
IIIa-7	H	Cl	Cl	H
IIIa-8	Cl	Cl	Cl	Cl
IIIa-9	Br	Br	Br	Br
IIIa-10	H	H	Tert-Butyl	H

[0119] 예를 들어, 상기 화학식 III로 표시되는 화합물은, 하기의 화학식 IIIb로 표시되는 화합물을 포함하고, 하기의 화학식 IIIb는 표 9에서 제시한 화합물 IIIa-1 내지 IIIa-9의 화합물일 수 있다.

[0120] [화학식 IIIb]



[0121]

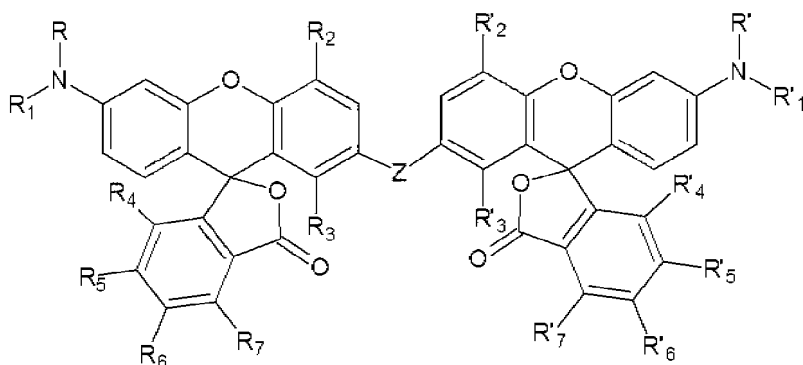
표 8

[0122]

No	R4/R4'	R5/R5'	R6/R6'	R7/R7'
IIIb-1	H	H	H	H
IIIb-2	H	H	CH ₃	H
IIIb-3	H	H	F	H
IIIb-4	H	H	H	F
IIIb-5	H	H	Cl	H
IIIb-6	H	H	NO ₂	H
IIIb-7	H	Cl	Cl	H
IIIb-8	Cl	Cl	Cl	Cl
IIIb-9	Br	Br	Br	Br
IIIb-10	H	H	Tert-Butyl	H

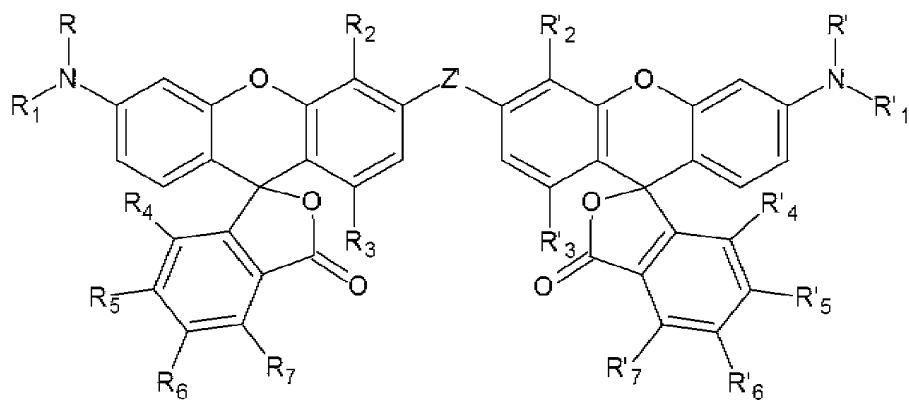
[0123] 상기 화학식 III에서, 상기 Z는 화학식 I로 표시되는 화합물들 간의 이합체의 형성 시 이들을 연결하는 것이다. 예를 들어, 상기 화학식 III은, 하기의 화학식 III-1 내지 III-4와 같이 연결될 수 있다.

[0124] [화학식 III-1]

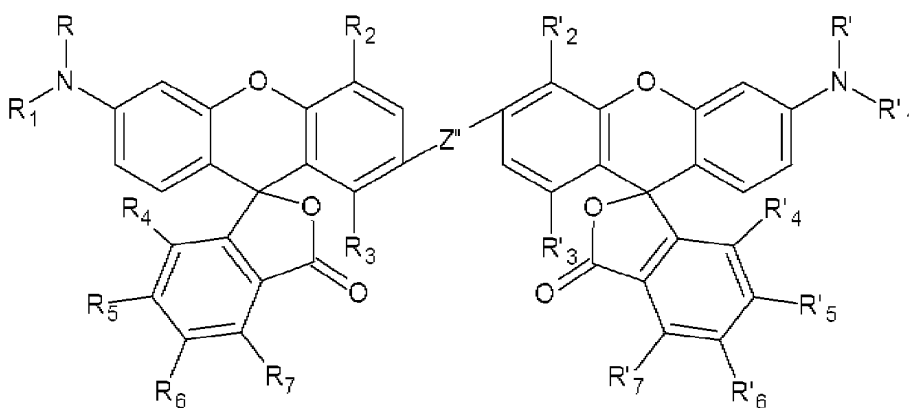


[0125]

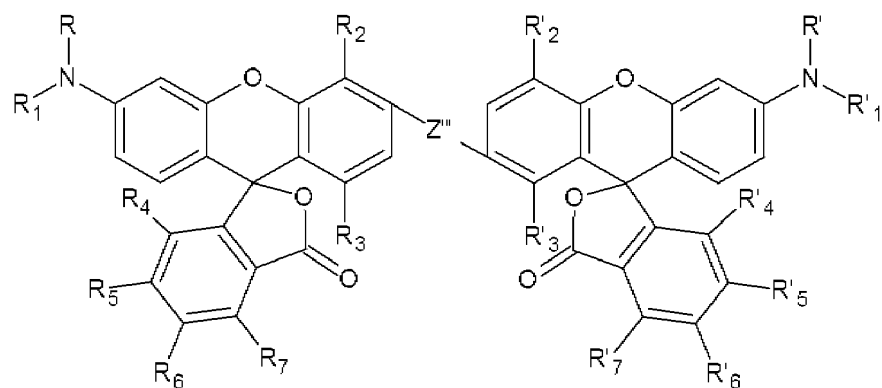
[0126] [화학식 III-2]



[화학식 III-3]



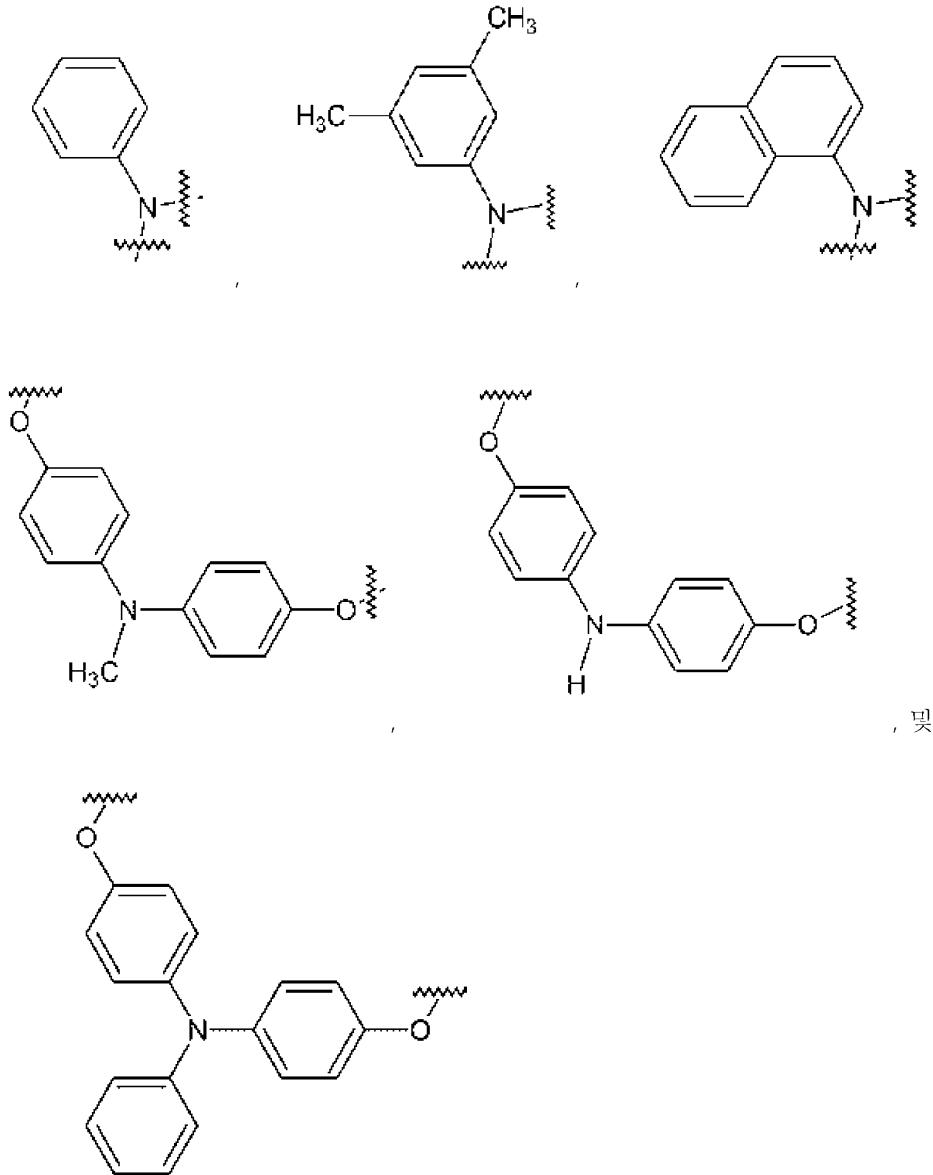
[화학식 III-4]



상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는, 서로 동일하거나 또는 상이하고, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C30 방향족 고리; 및 C2-C30 방향족 헤테로 고리; 중 하나 이상으로 치환된 아민기일 수 있다.

바람직하게는 상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는 서로 동일하거나 또는 상이하고, 직쇄 또는 분지쇄 C1-C10 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C10 방향족 고리; 및 N, S, P, 또는 O를 포함하는 치환 또는 비치환된 C4-C9 방향족 헤테로 고리; 중 하나 이상으로 치환된 아민기일 수 있다. 상기 방향족 고리는, 질소, 산소, 히드록실기 및 C1-C10 알킬기 중 어느 하나 이상으로 치환될 수 있다. 상기 방향족 고리는, 페닐, 나프탈렌기, 안트라센기 등일 수 있다.

[0134] 예를 들어, 상기 Z, Z', Z'' 및 Z'''는,



[0135]

[0136] 으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 모이어티를 포함할 수 있다.

[0137] 본 발명은, 본 발명에 의한 염료 화합물을 포함하는 염료 조성물에 관한 것으로, 상기 염료 조성물은, 감온 변색 특성을 나타내고, 용매 및 활성화제에 따라 원하는 온도에서 변색가능한 염료 조성물을 제공할 수 있고, 가역성 감온변색 특성을 제공할 수 있다.

[0138] 본 발명의 일 실시예에 따라, 상기 염료 조성물은, 본 발명에 의한 염료 화합물, 산성활성화제 및 용매를 포함할 수 있다. 상기 염료 화합물은, 상기 언급한 바와 같고, 예를 들어, 상기 언급한 화학식 I 내지 III으로 표시되는 화합물 중 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0139] 본 발명의 일 예로, 상기 산성활성화제는, 온도에 따라 염료 화합물의 구조적 변성 또는 결합을 활성화시키고 변색의 강도를 향상시켜 정밀한 온도 감지를 가능하게 할 수 있다. 상기 산성활성화제는, 상기 염료 조성물 100 중량부에 대해 0.5 중량부 내지 10 중량부, 바람직하게는 2 중량부 내지 8 중량부, 더 바람직하게는 2.5 중량부 내지 5 중량부로 포함될 수 있다. 상기 산성활성화제의 함량이 상기 범위 내에 포함되면 적절한 변색 강도를 제공하면서, 인체에 대한 독성을 낮출 수 있다.

[0140] 본 발명의 일 예로, 상기 산성활성화제는, 활성 점토(activated clays), 페놀 수지, 비스페놀-A, 4-tert-부틸페놀, 4-페닐페놀, 4-하이드록시디페닐옥사이드, α -나프톨, β -나프톨, 4-하이드록시벤조산 메틸 에스테르, 4-하이드록시아세트페논, 2,2'-디하이드록시 디페닐, 4,4'-이소프로필리덴-디페놀, 4,4'-이소프로필리덴-비스-(2-페

닐페놀), 4,4'-비스-(하이드록시페닐)발레르산, 하이드로퀴논, 1-하이드록시-2-나프토산, 갈산, 붕산, 타르타르산, 옥살산, 말레산 및 숙신산으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0141] 본 발명의 일 예로, 상기 용매는, 염료 화합물을 용해시키는 기능뿐 아니라 염료 화합물의 분산제로서 기능을 가질 수 있고, 용매의 종류에 따라 원하는 온도에서 감온변색 특성을 조절할 수 있다. 상기 용매는, 상기 염료 조성물의 100 중량부에 대해 70 중량부 내지 98 중량부, 바람직하게는 80 중량부 내지 98 중량부, 더 바람직하게는 85 중량부 내지 95 중량부로 포함될 수 있다. 상기 용매의 함량이 상기 범위 내에 포함되면, 감온 변색 특성을 향상시켜 변색 강도를 증가시킬 수 있다.

[0142] 본 발명의 일 예로, 상기 용매는, 알콜, 에스테르계 용매 등이고, 바람직하게는 저융점 용매일 수 있다. 예를 들어, 상기 저융점 용매는, 메틸 스테아레이트, 에틸 스테아레이트, 메틸 헥사노에이트, 메틸 헵타노에이트, 메틸 옥타노에이트, 메틸 라우레이트, 메틸 올레이트, 메틸 아디페이트, 메틸 카프릴레이트, 메틸 카프로에이트, 메틸 안트라니레이트, 메틸 팔미테이트, 메틸 팔미토에이트, 메틸 옥살레이트, 메틸 2-노나노에이트, 메틸 벤조에이트, 2-메틸벤조페논, 메틸 베헤네이트(도코소노에이트), 메틸 벤질레이트, 메틸벤질 아세테이트, 트리메틸 보레이트, 메틸 카프레이트(데카노에이트), 메틸부틸레이트, 메틸데카노에이트, 메틸 사이클로헥산카르복실레이트, 메틸 디메톡시아세테이트, 메틸 디페닐아세테이트, 메틸 에난테이트, 메틸 헵타노에이트(에난테이트) 및 메틸 리노레이트로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0143] 본 발명의 일 예로, 상기 염료 조성물은, 적용 대상에 따라 적절한 첨가제를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 디아미노메탄, 1,3-디아미노프로판올, 2,7-디아미노플루오렌 등의 전자 수용성기를 갖는 현상액 등을 적용하여 색상 강도를 조절할 수 있다.

[0144] 본 발명의 일 예로, 상기 염료 조성물은, 감온 변색 조성물이며, 10 °C 이상의 온도; 20 °C 이상의 온도; 30 °C 이상의 온도; 40 °C 이상의 온도; 에서 변색을 확인할 수 있고, 예를 들어, 상온의 무색에서 40 °C 이상으로 가열 시 레드로 변색될 수 있다. 상기 염료 조성물의 발색, 발색 강도, 변색 온도 또는 변색 온도 범위 등은 본 발명의 염료 화합물의 구조, 염료 조성물의 용매, 첨가제 등에 의해서 적절하게 조절할 수 있다.

[0145] 본 발명의 일 예로, 상기 염료 조성물은, 액체 형태, 고체 형태, 또는 이 둘의 형태의 혼합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 액체 형태의 혼합물일 수 있다.

[0146] 본 발명은, 본 발명에 의한 염료 화합물을 포함하는 제품에 관한 것이다. 상기 제품은, 온도에 따라 본 발명에 의한 염료 화합물의 변색 특성을 이용하는 것이라면 제한 없이 적용될 수 있다. 예를 들어, 상기 제품은, 온도 또는 온도 변화 감지, 온도에 의해 본 발명의 염료 화합물의 구조적 변형 또는 결합에 따른 변색 등을 이용할 수 있다. 또한, 상기 제품은, 장치, 장비, 기구 등에 포함되거나 또는 이들을 포함할 수 있다.

[0147] 본 발명의 일 예로, 상기 제품은, 본 발명에 의한 염료 화합물이 코팅된 기재, 함침된 기재, 및 염료 화합물과 함께 성형된 기재로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다. 상기 기재는, 다공성 또는 비다공성일 수 있고, 셀룰로오스 종이; 섬유; 직물; 및 금속, 폴리머 수지 및 유리 분말, 시트 또는 비즈; 로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다. 상기 기재는, 본 발명의 기술 분야에서 적용되는 코팅, 함침 또는 성형 방법을 적용하여 코팅, 함침 또는 성형될 수 있고, 본 명세서에서 구체적으로 언급하지 않는다. 예를 들어, 상기 성형 방법은, 본 발명의 염료 화합물 또는 염료 조성물과 성형 대상을 혼합한 이후에 성형하거나 또는 성형 대상의 사출 성형 시 함께 투입하여 성형할 수 있다.

[0148] 예를 들어, 상기 섬유는, 본 발명에 의한 염료 화합물이 적용 가능한 것이라면 제한 없이 사용될 수 있고, 구체적으로 우레탄 섬유, 폴리프로필렌 섬유, 폴리에스테르 섬유, 폴리아릴렌 설파이드 섬유, 폴리에틸렌 섬유, 폴리아마이드 섬유, 폴리락트산 섬유 등의 합성 섬유; 면, 마뽀, 레이온 등의 식물섬유, 견, 양모 등의 동물섬유, 아스베스토스 등의 광물섬유 등을 포함하는 천연 섬유; 및 유리섬유; 등일 수 있다.

[0149] 예를 들어, 상기 직물은, 본 발명에 의한 염료 화합물이 적용 가능한 것이라면 제한 없이 사용될 수 있고, 구체적으로 평직, 사문직, 수자직 등일 수 있고, 구체적으로, 데님, 드릴, 개버딘, 트월, 트리코틴, 서지, 프레스코 오간디, 테프타, 머슬린, 새틴, 다마스크, 애틀라스 등일 수 있고, 상기 직물은 편직물을 더 포함하고, 상기 편직물은, 필편 조직, 고무편 조직, 양면편 조직, 트리모 조직, 라셀 조직 및 밀라니즈 조직 등일 수 있다.

[0150] 예를 들어, 상기 금속은, 본 발명에 의한 염료 화합물이 적용 가능한 것이라면 제한 없이 사용될 수 있고, 구체적으로 철, 코발트, 몰리브데늄, 니오브, 구리, 탄탈륨, 은, 니켈, 알루미늄, 주석, 아연, 티타늄, 텅스텐, 철 함유 합금, 코발트 함유 합금, 몰리브데늄 함유 합금, 니오브 함유 합금, 구리 함유 합금, 탄탈륨 함유 합금, 은 함유 합금, 니켈 함유 합금, 알루미늄 함유 합금, 주석 함유 합금, 아연 함유 합금, 티타늄 함유 합금, 텅스

텐 함유 합금 등일 수 있다.

[0151] 예를 들어, 상기 폴리머 수지는, 본 발명에 의한 염료 화합물이 적용 가능한 것이라면 제한 없이 사용될 수 있고, 셀룰로오스계 수지, 실리콘 수지, 에폭시 수지, 아크릴 수지, 우레탄 수지, 염화비닐 수지, 나일론 수지, 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, ABS수지, PET 수지, 폴리아세탈, 폴리염화비닐, 폴리스틸렌, 폴리에틸렌, 폴리에스테르 수지, 폴리아미드 수지, 폴리이미드 수지, 폴리카보네이트 수지, 테프론 수지, 폴리스틸렌 수지 등일 수 있다.

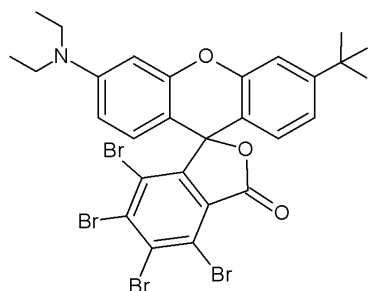
[0152] 본 발명의 일 예로, 상기 제품은 상기 염료 화합물과 혼합된 액체, 고체 또는 이 둘을 포함하는 제형일 수 있고, 예를 들어, 상기 염료 화합물 및 담체 등이 혼합된 분말, 고형, 현탁액(suspension), 에멀전, 크림, 연고, 젤, 액상의 제형 등일 수 있다.

[0153] 본 발명의 일 예로, 상기 제품은, 운동복, 운동화, 등산복, 등산화, 장갑, 마스크, 모자, 헬멧, 방독면, 방역복, 소방의류 등의 의류, 제약, 코스메틱, 센서, 반도체, 리튬전지, 태양전지, 보일러, 핸드폰, 노트북, PC, 냉장고, 에어컨, 온열기, 전기장판, 전자레인지 등의 전자제품, 가스레인지, 가스오븐, 주전자, 수저, 식기 등의 주방제품, 침대, 옷장 등의 가구, 목걸이 등의 악세서리, 잉크, 페인트, 물감, 염색제, 등에 사용되는 염료, 단열시트, 벽지, 창문 등의 인테리어 또는 건축 자재, 백열 또는 led 전구, 스탠드 등의 조명장치 또는 기구, 온도계, 주사기, 청진기, 진단키트 또는 패치, 환자복 등의 의료용 장비 및 의류 등에 적용될 수 있으나, 이에 제한하는 것은 아니다.

[0154] 상기 제품의 구성은, 본 발명의 범위를 벗어나지 않는다면, 통상적으로 사용되는 구성을 더 포함할 수 있고, 본 명세서에서는 구체적으로 언급하지 않는다.

[0155] 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고, 하기의 특허 청구의 범위, 발명의 상세한 설명 및 첨부된 도면에 기재된 본 발명의 사상 및 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있다.

[0156] 실시예 1-1



[0157]

[0158] 합성 방법:

[0159] 메탄술폰산 내의 3-tert-부틸페놀(3-tert-butylphenol, 1.0 equivalent) 및 2,3,4,5-테트라브로모-6-(4-(디에틸아미노)-2-하이드록시벤조일)벤조산(2,3,4,5-tetrabromo-6-(4-(diethylamino)-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid, 1.0 equivalent)의 용액은 2h 동안 60-90 °C에서 가열하였다. 다음으로, 반응 혼합물은 상온으로 냉각하고, 30%의 NaOH(20 mL) 용액을 상기 반응 혼합물 내로 천천히 가하였다. 최종 알칼리 혼합물은, 1h 동안 상온에서 교반하였다. 형성된 고체는 여과 폐이퍼를 통하여 여과되고, 획득한 크루드 물질은, 석유 에테르(petroleum ether) 내의 에틸아세테이트의 기울기 증감을 갖는 칼럼 크로마토그래피로 정제되었다.

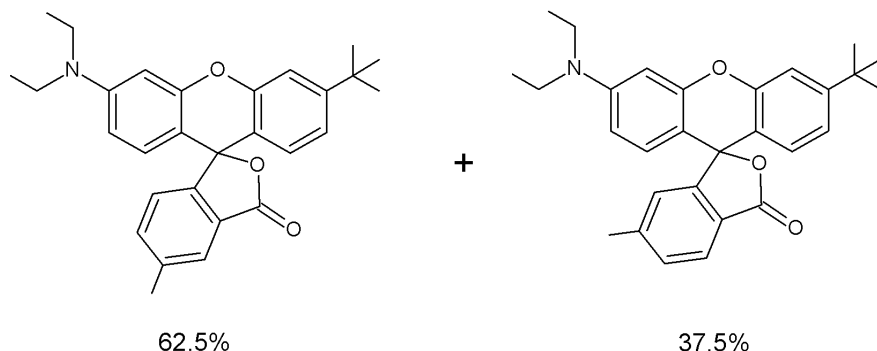
[0160] 수율: (Yield = 33.8%)

[0161] MS: ESI-MS (m/z) calcd. 743.4, found 744.1 (M+H⁺),

[0162] ¹H NMR (CDCl₃, 300MHz), δ (ppm):

[0163] 1.11(t, 9.7H, J=9Hz), 1.25(s, 9H), 2.37(s, 3H), 3.31(m, 4.0H), 6.32(m, 1.0H), 6.36(d, 1H, J=2.4Hz), 6.54, (d, 1H, J=8.7 Hz), 6.67(d, 1H, J=8.4Hz), 6.98(m, 1H), 7.17(d, 1H, J=1.8Hz).

[0164] 실시예 1-2



[0165]

[0166] 합성 방법:

[0167] 메탄술폰산 내의 3-tert-부틸페놀(1.0 equivalent) 및 2-(4-(디에틸아미노)-2-하이드록시벤조일)-5-메틸벤조산 (62.5%) & 2-(4-(디에틸아미노)-2-하이드록시벤조일)-4-메틸벤조산(37.5 %) (1.0 equivalent)의 위치 이성질체 혼합물의 용액은, 2h 동안 60-90 °C까지 가열하였다. 다음으로, 반응 혼합물은, 상온으로 냉각되고, 30%의 NaOH(20 mL) 용액을 상기 반응 혼합물에 천천히 가하였다. 최종 알칼리 혼합물은, 1 h 동안 상온에서 교반되었다. 형성된 고체는 여과 페이퍼를 통하여 여과되고, 획득한 크루드 물질은, 석유 에테르 내의 에틸아세테이트의 기울기 증감을 갖는 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제되었다

[0168] 수율: (Yield = 55.0%)

[0169] MS: ESI-MS (m/z) calcd. 441.3, found 442.4 (M+H⁺)

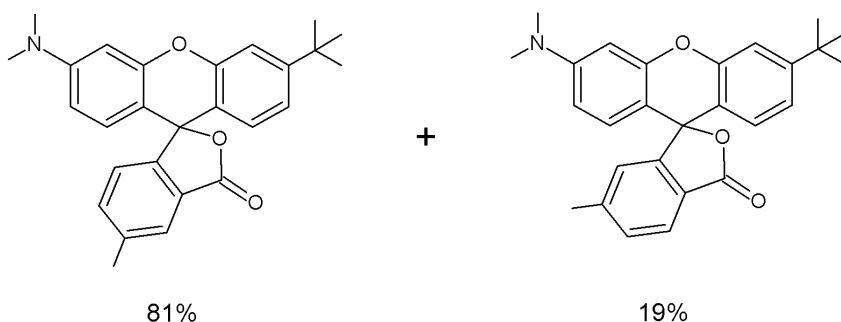
[0170] ¹H NMR (CDCl₃, 300MHz), δ (ppm):

[0171] 1.10(t, 9.7H, J=6.9Hz), 1.29(s, 14.4H), 2.37(s, 3H), 2.49(s, 1.8H), 3.35(m, 6.3H), 6.47(m, 5H), 6.66(m, 1.6H), 7.13 (m, 3.3H), 7.30(s, 1.6H), 7.53(d, 1.0H, J=7.8Hz), 7.60(d, 0.6H, J=7.5Hz), 7.80(s, 0.6H), 7.89(d, 1.0H, J=7.8Hz).

[0172] ¹³CNMR(CDCl₃, 75MHz), δ (ppm):

[0173] 12.54, 14.14, 22.07, 22.66, 31.13, 31.60, 34.82, 44.48, 83.69, 84.07, 97.52, 105.41, 108.21, 113.59, 116.56, 120.77, 123.78, 124.28, 124.58, 124.69, 124.75, 127.57, 127.64, 129.01, 130.59, 135.86, 139.68, 145.96, 149.54, 150.64, 151.43, 152.96, 153.91, 154.07.

[0174] 실시예 1-3



[0175]

[0176] 합성 방법:

[0177] 메탄술폰산 내의 3-tert-부틸페놀(1.0 equivalent) 및 2-(4-(디메틸아미노)-2-하이드록시벤조일)-5-메틸벤조산 (77%) & 2-(4-(디메틸아미노)-2-하이드록시벤조일)-4-메틸벤조산(23%)(1.0 equivalent)의 위치 이성질체 혼합물 용액은, 2h 동안 60-90 °C까지 가열하였다. 다음으로, 반응 혼합물은, 상온으로 냉각하고, 30%의 NaOH(20 mL) 용액을 상기 반응 혼합물에 천천히 가하였다. 최종 알칼리 혼합물은, 1h 동안 상온에서 교반되었다. 형성된 고체는 여과 페이퍼를 통하여 여과되고, 획득한 크루드 물질은, 석유 에테르 내의 에틸 아세테이트의 기울기

증감을 갖는 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제되었다.

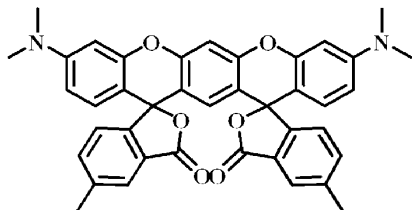
[0178] 수율: (Yield = 52.0%).

[0179] MS: ESI-MS (m/z) calcd. 413.3, found 414.4 (M+H⁺)

[0180] ¹H NMR (CDCl₃, 300MHz), δ (ppm):

[0181] 1.24(s, 11.5H), 2.30(s, 3H), 2.44(s, 0.7H), 2.91(s, 7.3H), 6.42(m, 2.7H), 6.61(m, 2.8H), 6.97(m, 2.8H), 7.32(m, 1.4H), 7.82(m, 1.3H).

[0182] 실시예 2-1



[0184] 합성 방법:

[0185] 메탄술폰산 내의 레조르시놀(resorcinol, 1.0equivalent) 및 2-(4-(디메틸아미노)-2-하이드록시벤조일)벤조산 (2.0 equivalent)의 용액은, 5h 동안 60-90 °C에서 가열 되었다. 다음으로, 반응 혼합물은, 상온으로 냉각하고, 30%의 NaOH(20 mL) 용액을 상기 반응 혼합물에 천천히 가하였다. 최종 알칼리 혼합물은, 1h 동안 상온에서 교반되었다. 형성된 고체는 여과 페이퍼를 통하여 여과되고, 획득한 크루드 물질은, 석유 에테르 내의 에틸아세테이트의 기울기 증감을 갖는 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제되었다.

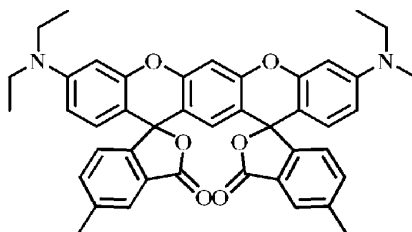
[0186] 수율: (Yield = 26.0%).

[0187] MS: ESI-MS (m/z) calcd. 636.0, found 637.0 (M+H⁺)

[0188] ¹H NMR (CDCl₃, 300MHz), δ (ppm):

[0189] 2.18(s, 3H), 2.36(s, 3H), 2.90(s, 12H), 6.44(m, 7H), 6.63(d, 1H, J=4.8Hz), 6.72(m, 1H), 7.04(s, 1H), 7.18(d, 2H, J=8.1Hz), 7.54(s, 1H), 7.64(d, 1H, J=7.8Hz).

[0190] 실시예 2-2



[0192] 합성 방법:

[0193] 메탄술폰산 내의 레조르시놀(1.0equivalent) 및 2-(4-(디메틸아미노)-2-하이드록시벤조일)벤조산(2.0 equivalent) 용액은, 5h 동안 60-90 °C에서 가열되었다. 다음으로, 반응 혼합물은, 상온으로 냉각되고, 30%의 NaOH(20 mL) 용액을 상기 반응 혼합물에 천천히 가하였다. 최종 알칼리 혼합물은, 1h 동안 상온에서 교반되었다. 형성된 고체는 여과 페이퍼를 통하여 여과되고, 획득한 크루드 물질은, 석유 에테르 내의 에틸아세테이트의 기울기 증감을 갖는 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제되었다.

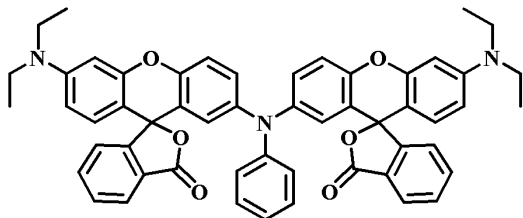
[0194] 수율: (Yield = 33.0%).

[0195] MS: ESI-MS (m/z) calcd. 692.2, found 693.5 (M+H⁺)

[0196] ^1H NMR (CDCl_3 , 300MHz), δ (ppm):

[0197] 1.10(t, 20.7H, J=7.2Hz), 2.29(s, 6H), 2.39(s, 4.3H), 3.29(m, 13.5H), 6.08(m, 1.6H), 6.26(m, 3.4H), 6.43(m, 7H), 6.81(s, 2H), 6.93(d, 1.5H, J=6.3Hz), 7.03(s, 1.6H), 7.24(d, 2.8H, J=8.4Hz), 7.35(d, 1.5H, J=7.2Hz), 7.51(s, 1.4H), 7.61(d, 2H, J=7.8Hz).

[0198] 실시예 3-1



[0199]

[0200] 합성 방법:

[0201] 메탄술폰산 내의 4,4'-(페닐아자네디일)디페놀(4,4'-(phenylazanediy)ldiphenol, 1.0 equivalent) 및 2-(4-(디에틸아미노)-2-하이드록시벤조일)벤조산(1.0 equivalent)의 용액은, 10h 동안 60-90 °C에서 가열되었다. 다음으로, 반응 혼합물은, 상온으로 냉각하고, 30%의 NaOH (20 mL) 용액을 상기 반응 혼합물에 천천히 가하였다. 최종 알칼리 혼합물은, 상온에서 2 h 동안 교반되었다. 형성된 고체는 여과 페이퍼를 통하여 여과되고, 획득한 크루드 물질은, 석유 에테르 내의 에틸아세테이트의 기울기 증감을 갖는 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제되었다

[0202] 수율: (Yield = 16.0%)

[0203] ^1H NMR (CDCl_3 , 300MHz), δ (ppm):

[0204] 1.09(t, 12.0H, J=6.9Hz), 3.27(m, 8.0H), 6.07(m, 2H), 6.24(m, 3.0H), 6.35(s, 1H), 6.43(m, 2H), 6.53(d, 1.0H, J=8.7Hz), 6.70(m, 1H), 6.88(m, 3H), 7.00(m, 3H), 7.23(m, 1H), 7.49(m, 6H), 7.82(m, 2H).

[0205] 실시예 4

[0206] 표 9에서 제시한 바와 같이, 실시예 1의 화합물, 비스페놀 및 메틸스테아레이트를 상온에서 혼합한 이후에 40 °C로 가열하여 색변화를 확인하였다. 그 결과는 도 1에 나타내었다. 가열 이후에 냉각할 경우에 색변화를 확인하기 위해서 UV-Vis 및 반사 스펙트라를 측정하여 도 2에서 나타내었다.

표 9

[0207]

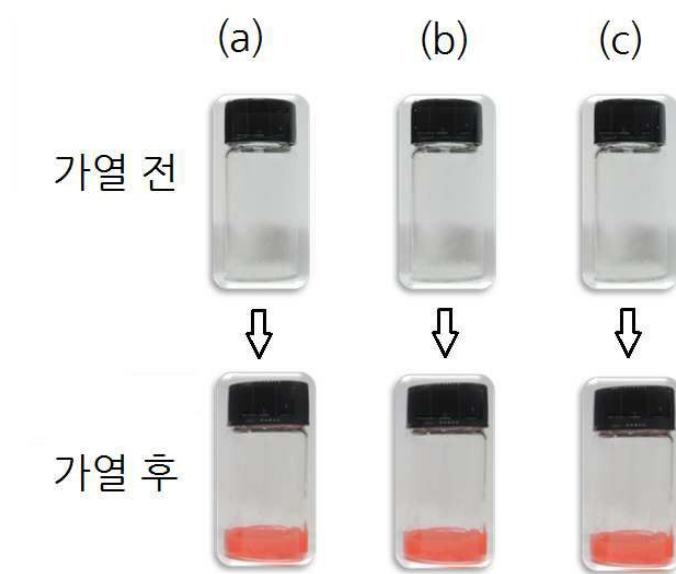
단위(wt%)	(a)	(b)	(c)
실시예 1-1	5		
실시예 1-2		5	
실시예 1-3			5
비스페놀	2.5	2.5	2.5
메틸스테아레이트	92.5	92.5	92.5

[0208] 도 1을 살펴보면, 본 발명에 의한 화합물을 포함하는 염료 조성물은, 상온에서는 무색이고, 40 °C로 가열 시 무색에서 레드로 변색되는 것을 확인할 수 있다. 또한, 도 2를 살펴보면, 40 °C에서 가열 이후에 25 °C로 냉각할 경우에 무색으로 변색되는 것을 확인할 수 있고, 이는 본 발명에 의한 화합물 또는 조성물이 발색 강도의 저하 없이 가역적으로 변색이 가능한 것을 의미한다.

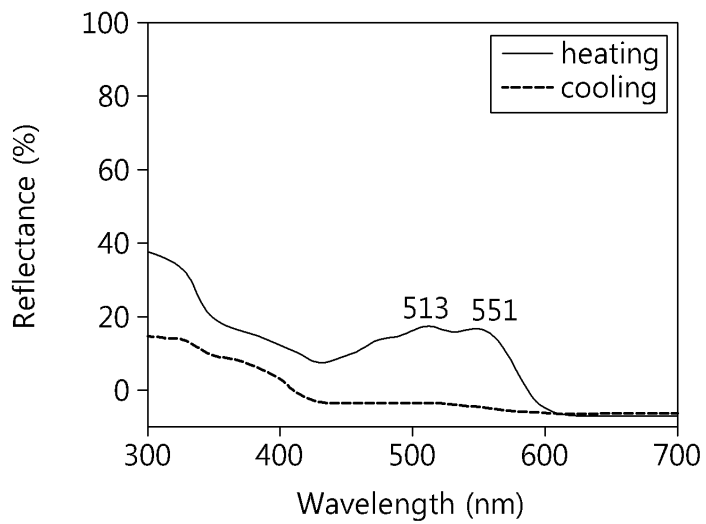
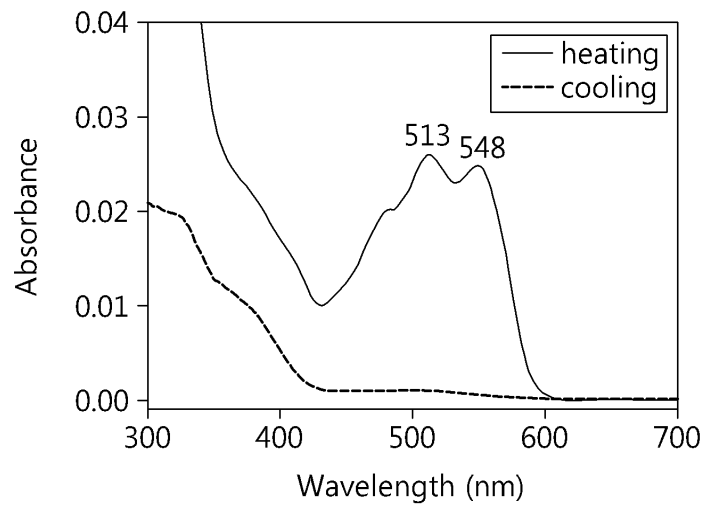
[0209] 본 발명은, 발색 강도가 우수하고, 가역적 변색이 가능한 감온 변색 염료 화합물을 제공할 수 있고, 상기 염료 화합물을 포함하는 염료 조성물은, 용매 등을 조절하여 원하는 변색 온도 범위를 조절하고, 발색 강도를 향상시킬 수 있다.

도면

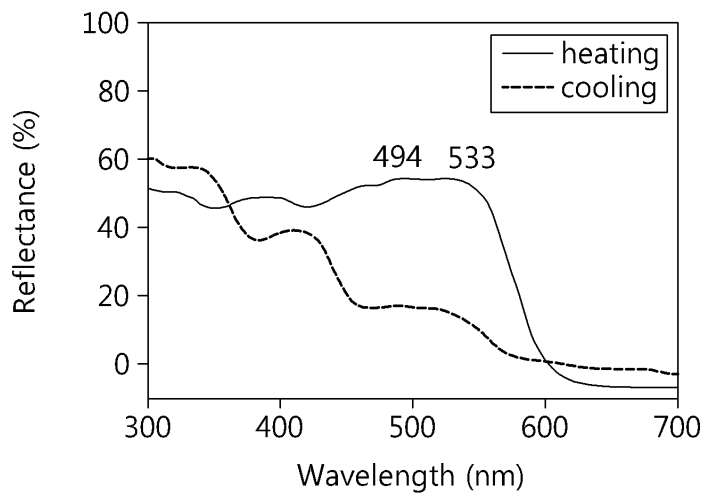
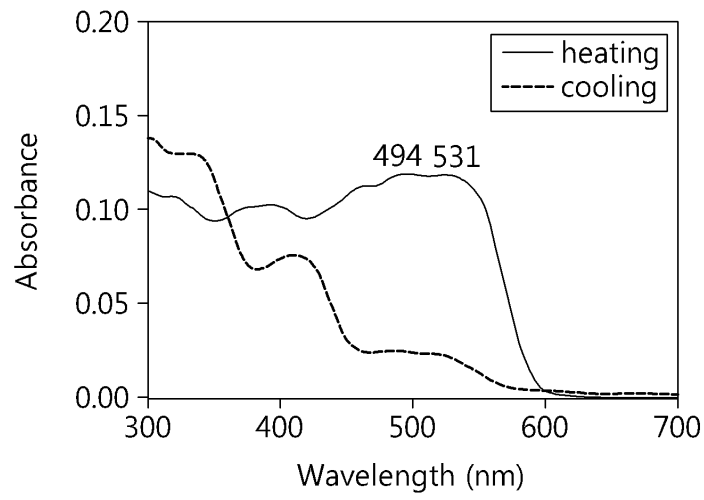
도면1



도면2a



도면2b



도면2c

