

RU 2014125285 A

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

(19) RU⁽¹¹⁾ 2014 125 285⁽¹³⁾ A(51) МПК
C07D 495/16 (2006.01)ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

(12) ЗАЯВКА НА ИЗОБРЕТЕНИЕ

(21)(22) Заявка: 2014125285/04, 13.11.2012

Приоритет(ы):

(30) Конвенционный приоритет:
23.11.2011 ЕР РСТ/ЕР2011/070869;
23.11.2011 US 61/563,381

(43) Дата публикации заявки: 27.12.2015 Бюл. № 36

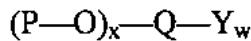
(85) Дата начала рассмотрения заявки РСТ на
национальной фазе: 23.06.2014(86) Заявка РСТ:
ЕР 2012/072514 (13.11.2012)(87) Публикация заявки РСТ:
WO 2013/075980 (30.05.2013)Адрес для переписки:
109012, Москва, ул. Ильинка, 5/2, ООО
"Союзпатент"(71) Заявитель(и):
СИКПА ХОЛДИНГ СА (СН)(72) Автор(ы):
ВИСС Патрик (СН),
ПАСКЬЕ Сесиль (СН)

R U 2 0 1 4 1 2 5 2 8 5 A

(54) ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИЕ АРОМАТИЧЕСКИЕ УГЛЕВОДОРОДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ,
СОДЕРЖАЩИЕ АТОМ S ИЛИ ГРУППУ S(=O)₂ В СВОЕЙ БАЗОВОЙ СТРУКТУРЕ

(57) Формула изобретения

1. Полициклическое ароматическое углеводородное соединение общей формулы (1):



(1)

в которой Р представляет собой полимерный фрагмент, содержащий по меньшей мере три повторяющихся фрагмента, содержащих необязательно замещенное фенильное кольцо;

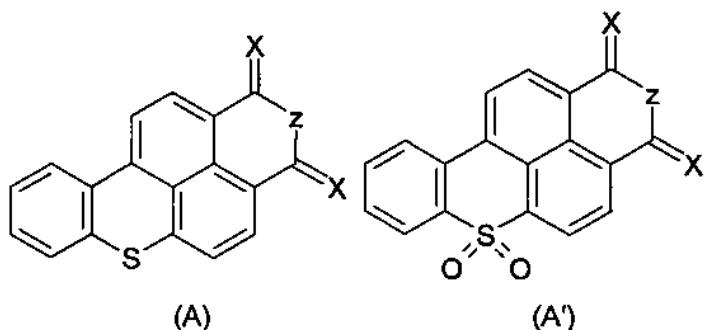
Q представляет собой полициклический ароматический углеводородный фрагмент, содержащий атом S или фрагмент S(=O)₂ в своей основной структуре;

Y выбран из (i) галогена, (ii) необязательно замещенных N-гетероциклоалифатических групп, содержащих от 3 до примерно 8 членов в цикле и связанных с Q через атом N, и (iii) необязательно замещенных фенокси-групп;

x представляет собой целое число от 0 до 4; и w представляет собой целое число от 0 до 4, где w и x не могут одновременно быть равны 0,

при условии, что когда x=0, по меньшей мере один Y выбран из (ii) и (iii).

2. Соединение по п. 1, в котором Q представляет собой фрагмент формулы (A) или (A'):

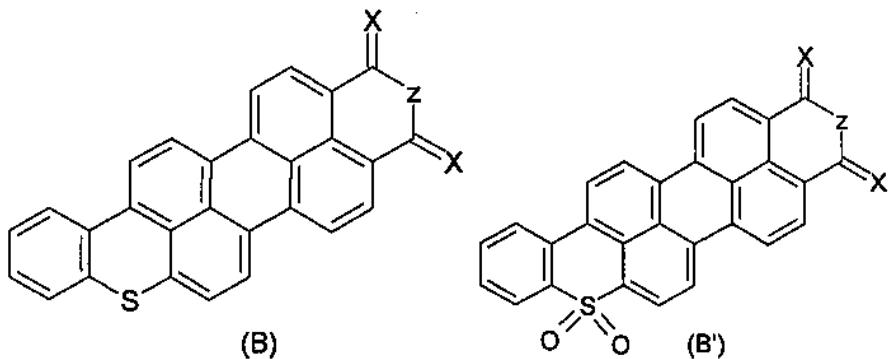


где Z представляет собой O, S или N-R;

где X, которые могут быть одинаковыми или разными, представляют собой O, S или NR'; и

R и R' независимо представляют собой необязательно замещенную алифатическую, циклоалифатическую, ароматическую, гетероароматическую, алкиларильную, алкилгетероарильную, арилалкильную или гетероарилалкильную группу, содержащую от 1 до примерно 20 атомов углерода; и R и R' могут также быть объединены с образованием, вместе с атомами N к которым они присоединены, необязательно замещенного и/или конденсированного 5-7-членного кольца.

3. Соединение по п. 1, в котором Q представляет собой фрагмент формулы (B) или (B'):



где Z представляет собой O, S или N-R;

где X, которые могут быть одинаковыми или разными, представляют собой O, S или NR'; и

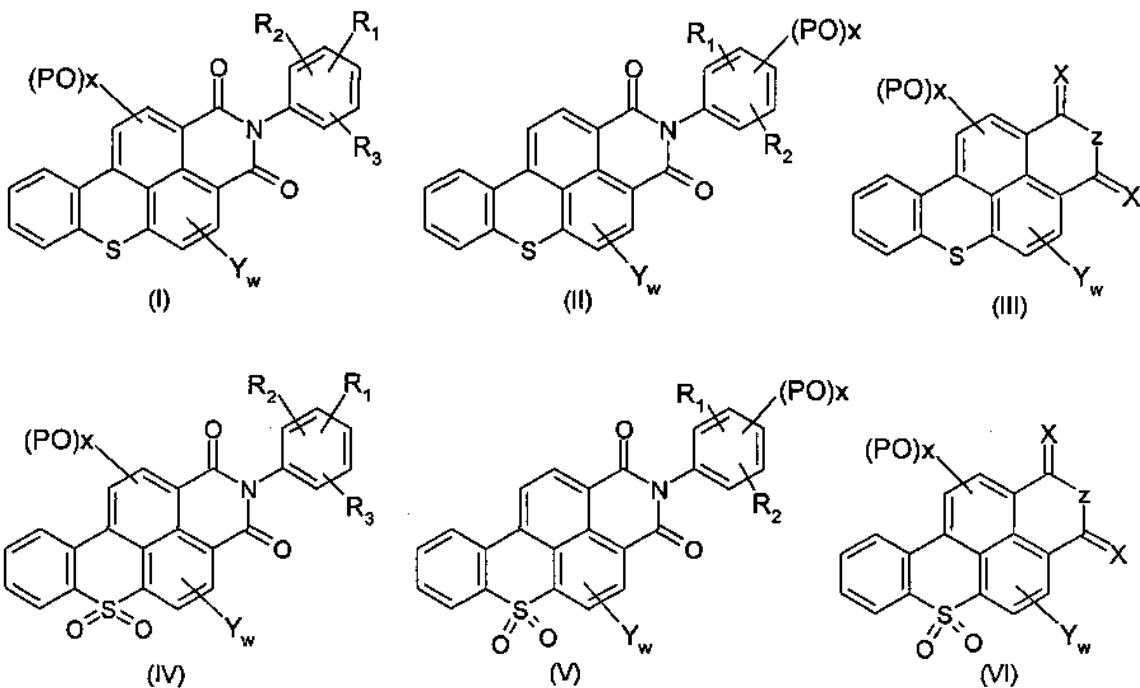
R и R' независимо представляют собой необязательно замещенную алифатическую, циклоалифатическую, ароматическую, гетероароматическую, алкиларильную, алкилгетероарильную, арилалкильную или гетероарилалкильную группу, содержащую от 1 до примерно 20 атомов углерода; и R и R' могут также быть объединены с образованием, вместе с атомами N , к которым они присоединены, необязательно замещенного и/или конденсированного 5-7-членного кольца.

4. Соединение по п. 1, в котором x равен 1 и $w=0$.

5. Соединение по любому из пп. 1-3, в котором x равен 0, и w равен 2 или не превышает 4.

6. Соединение по любому из пп. 1-4, в котором $(x+w)$ не превышает 4.

7. Соединение по любому из пп. 1-4, соответствующее формуле (I), (II), (III), (IV), (V) или (VI):



где в случае формулы (III) и (VI) Z представляет собой O, S или N-R; и X, которые могут быть одинаковыми или разными, представляют собой O, S или NR'; и

R и R' независимо представляют собой необязательно замещенную алифатическую, циклоалифатическую, ароматическую, гетероароматическую, алкиларильную, алкилгетероарильную, арилалкильную или гетероарилалкильную группу, содержащую от 1 до примерно 20 атомов углерода; и R и R' могут быть объединены с образованием, совместно с атомами N, к которым они присоединены, необязательно замещенного и/или конденсированного 5-7-членного цикла;

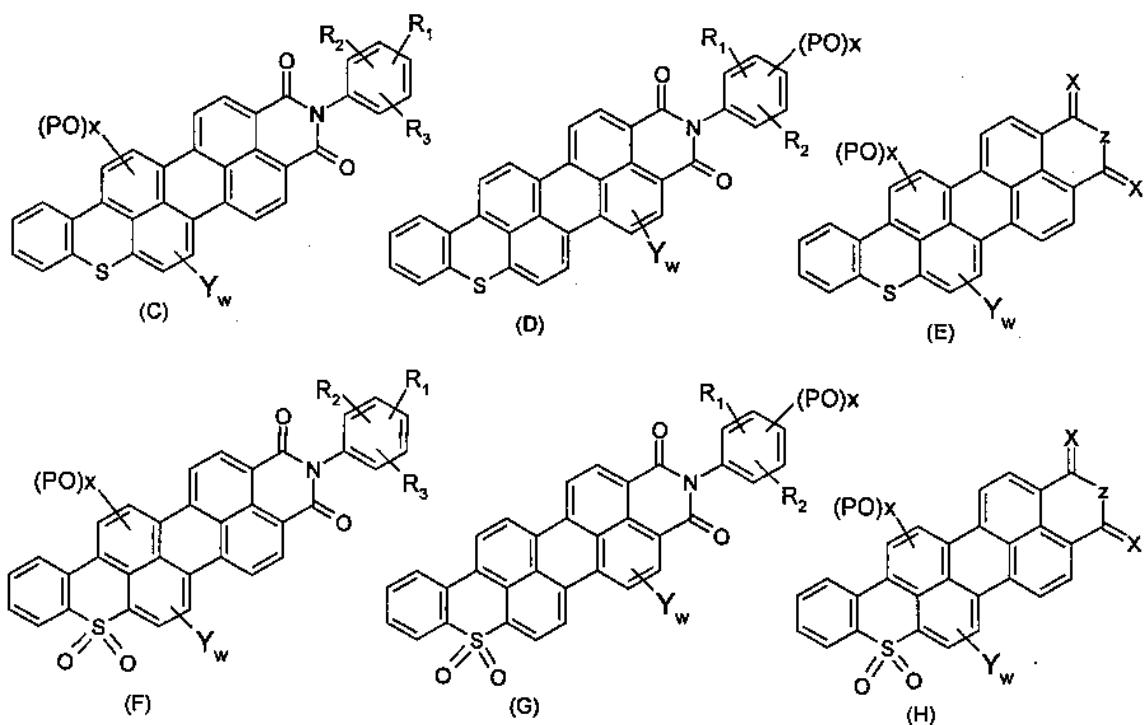
R₁, R₂ и R₃ независимо выбраны из атома водорода, C₁-C₄алкила, C₁-C₄алкил-COOH, C₁-C₄алкил-SO₃H, C₁-C₄ алcoxи-группы, моно(C₁-C₄)алкиламино-группы, ди(C₁-C₄)алкиламино-группы, C₁-C₄аминоалкила, галогена, циано-группы, нитро-группы и SO₃H, причем алкильные группы необязательно могут быть замещенными;

Y выбран из (i) галогена и (ii) необязательно замещенных N-гетероциклоалифатических групп, содержащих от 3 до примерно 8 членов в цикле и связанных с ароматическим кольцом через атом N, и (iii) необязательно замещенных фенокси-групп, связанных с ароматическим кольцом через атом O, причем указанные фенокси-группы могут быть замещены одним или несколькими заместителями, выбранными из галогена, нитро-группы, циано-группы, NRR', SO₃H и COOH, и солей и производных указанных сульфоновых и карбоксильных кислотных групп, OH, гетероциклоалкилов, содержащих до трех гетероатомов, выбранных из O, N и S, в качестве членов цикла, и от 3 до примерно 8 членов цикла, и алкильных (включая циклоалкильные) и алcoxи (включая циклоалcoxи) групп, содержащих от 1 до примерно 10 атомов углерода;

Р представляет собой полимерный фрагмент, содержащий по меньшей мере три повторяющихся фрагмента, содержащих необязательно замещенное фенильное кольцо; и

w представляет собой целое число от 0 до 4.

8. Соединение по любому из пп. 1-4, представляющее собой соединение одной из формул (C), (D), (E), (F), (G) или (H):



где в случае формулы (E) и (H) Z представляет собой O, S или N-R; и X, которые могут быть одинаковыми или разными, представляют собой O, S или NR'; и

R и R' независимо представляют собой необязательно замещенную алифатическую, циклоалифатическую, ароматическую, гетероароматическую, алкиларильную, алкилгетероарильную, арилалкильную или гетероарилалкильную группу, содержащую от 1 до примерно 20 атомов углерода; и R и R' могут быть объединены с образованием, совместно с атомами N, к которым они присоединены, необязательно замещенного и/или конденсированного 5-7-членного цикла;

R₁, R₂ и R₃ независимо выбраны из атома водорода, C₁-C₄алкила, C₁-C₄алкил-COOH, C₁-C₄ алкил-SO₃H, C₁-C₄ алcoxи-группы, моно(C₁-C₄)алкиламино-группы, ди(C₁-C₄)алкиламино-группы, C₁-C₄ аминоалкила, галогена, циано-группы, нитро-группы и SO₃H, при этом алкильные группы необязательно могут быть замещенными;

Y выбран из (i) галогена и (ii) необязательно замещенных N-гетероциклоалифатических групп, содержащих от 3 до примерно 8 членов в цикле и связанных с ароматическим кольцом через атом N; и (iii) необязательно замещенных фенокси-групп, связанных с ароматическим кольцом через атом O, причем указанные фенокси-группы могут быть замещены одним или несколькими заместителями, выбранными из галогена, нитро-группы, циано-группы, NRR', SO₃H и COOH, и солей и производных указанных сульфоновых и карбоксильных кислотных групп, OH, гетероциклоалкилов, содержащих до трех гетероатомов, выбранных из O, N и S, в качестве членов цикла, и от 3 до примерно 8 членов цикла, и алкильных (включая циклоалкильные) и алcoxи (включая циклоалcoxи) групп, содержащих от 1 до примерно 10 атомов углерода;

Р представляет собой полимерный фрагмент, содержащий по меньшей мере три повторяющихся фрагмента, содержащих необязательно замещенное фенильное кольцо;

и x представляет собой целое число от 0 до 4; и w представляет собой целое число от 0 до 4.

9. Соединение по п. 8, в котором x равен 0.

10. Соединение по любому из пп. 1-4, в котором по меньшей мере одна группа Y выбрана из гетероциклоалифатических групп, содержащих от 3 до примерно 8 членов

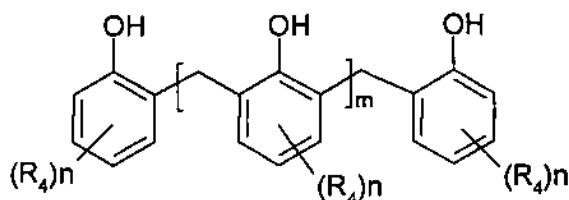
R U 2 0 1 4 1 2 5 2 8 5 A

R U 2 0 1 4 1 2 5 2 8 5 A

в цикле, где указанные члены цикла включают от 1 до примерно 3 гетероатомов, выбранных из N, S и O, при условии что по меньшей мере один член цикла представляет собой N, и где указанное гетероциклоалифатическое соединение может быть замещено одним или более заместителями, выбранными из алкильных и алкокси-групп, каждая из которых содержит до 10 атомов углерода.

11. Соединение по любому из пп. 1-4, в котором по меньшей мере одна группа Y представляет собой остаток гетероциклоалифатического соединения, выбранного из необязательно замещенного азациклооктана, необязательно замещенного азепана, необязательно замещенного пиперидина, необязательно замещенного пиперазина, необязательно замещенного пирролидина, необязательно замещенного азидина, необязательно замещенного морфолина, необязательно замещенного оксазолидина, необязательно замещенного пиразолидина, необязательно замещенного изопиразолидина, необязательно замещенного изоксазолидина и необязательно замещенного тиазолидина, где один или больше заместителей выбраны из C₁-C₄ алкокси и C₁-C₆ алкильных групп.

12. Соединение по любому из пп. 1-4, в котором Р представляет собой остаток полимерного соединения общей формулы (2):



(2),

где группы R₄, одинаковые или отличающиеся друг от друга, выбраны из C₁-C₁₀алкила и C₁-C₄ алкокси-групп;

м представляет собой целое число от 1 до примерно 30;

н представляет собой целое число от 1 до примерно 3.

13. Соединение по п. 12, в котором m представляет собой целое число от 1 до 10, и n равен 1 или 2.

14. Соединение по п. 12, в котором группы R₄ независимо выбраны из C₁-C₁₀алкила.

15. Соединение по п. 12, в котором группы R₄ независимо выбраны из изопропила, трет-бутила, трет-октила, н-нонила и разветвленного нонила.

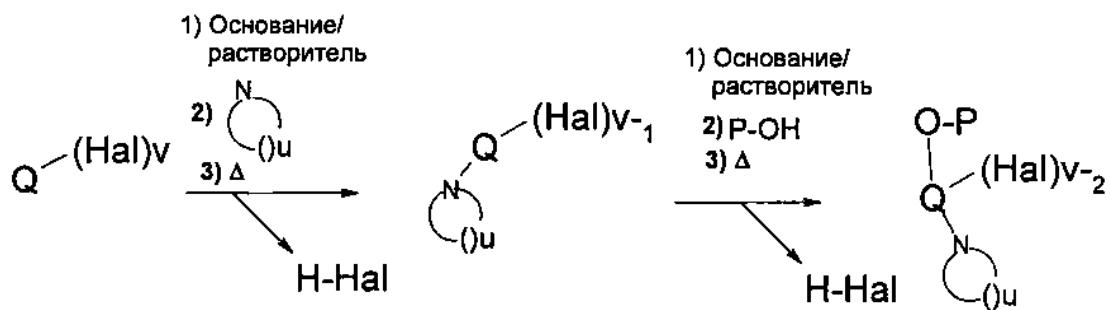
16. Способ получения соединения по любому из предшествующих пунктов, включающий реакцию в полярном аprotонном органическом растворителе соединения формулы Q-(Hal)_v, где Hal представляет собой галоген, и v представляет собой целое число от 2 до 8, последовательно с N-содержащим циклоалифатическим соединением и полимерным соединением формулы Р-ОН.

17. Способ по п. 16, в котором по меньшей мере реакцию с N-содержащим циклоалифатическим соединением проводят в присутствии по меньшей мере одного из неорганических оснований и сильных органических ненуклеофильных оснований.

18. Способ по любому из пп. 16 или 17, в котором используют от примерно 0,5 до примерно 10 г соединения формулы Q-(Hal)_v на 100 г полимерного соединения формулы Р-ОН.

19. Способ по любому из пп. 16 или 17, в котором полярный растворитель содержит по меньшей мере один из N-метилпирролидона, диметилформамида, диметилацетамида и диметилсульфоксида.

20. Способ по любому из пп. 16 или 17, соответствующий следующей схеме:



где

() представляет собой CH_2 , где по меньшей мере одна CH_2 группа может быть заменена на O, NH или S;
и представляет собой число от 2 до 7;
v представляет собой целое число от 2 до 8.

21. Композиция краски для печати, содержащая полярную жидкую среду и по меньшей мере одно соединение по любому из пп. 1-15, растворенное или диспергированное в этой среде.

22. Композиция краски для печати по п. 21, содержащая от примерно 0,01% до примерно 40% по весу указанного по меньшей мере одного соединения, в расчете на общий вес композиции.

23. Композиция краски для печати по любому из пп. 21 или 22, дополнительно содержащая по меньшей мере одно вещество, придающее электропроводность.

24. Элемент маркировки или защиты, созданный с использованием композиции краски для печати по любому из пп. 21-23.

25. Элемент маркировки или защиты, содержащий по меньшей мере одно соединение по любому из предшествующих пп. 1-15.

26. Элемент маркировки или защиты по любому из пп. 24 или 25, представляющий собой по меньшей мере одно из следующих: нить, этикетку, штрих-код, 2D код, рисунок, знаки и матрица данных.

27. Изделие, содержащее элемент маркировки или защиты по любому из пп. 24-26.

28. Изделие по п. 27, в котором элемент маркировки или защиты присутствует в виде слоя на изделии.

29. Изделие по любому из пп. 27-28, представляющее собой по меньшей мере одно из следующих: жестяная банка, металл, алюминиевая фольга, картридж, капсула, изделие из стекла, изделие из керамики, банкнота, паспорт, защищенный документ, ценная бумага, билет, нить, этикетка, карточка, коммерческий товар и упаковка сигарет, содержащая или не содержащая закодированную или зашифрованную информацию.

30. Способ аутентификации изделия, включающий получение изделия с элементом маркировки или защиты по любому из пп. 24-26.

31. Способ аутентификации изделия, включающий нанесение на изделие композиции краски для печати по любому из пп. 21-23.

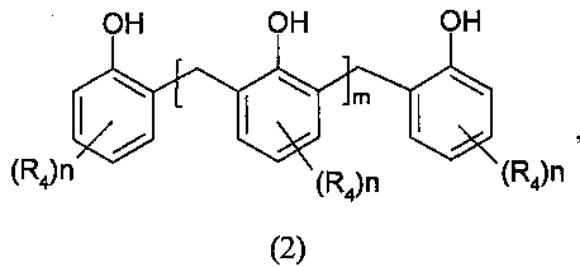
32. Способ по любому из пп. 30-31, где указанное изделие представляет собой по меньшей мере из следующих: жестяная банка, металл, алюминиевая фольга, картридж, капсула, изделие из стекла, изделие из керамики, упаковка, банкнота, паспорт, защищенный документ, ценная бумага, билет, нить, этикетка, карточка, коммерческий товар и упаковка сигарет, содержащая или не содержащая закодированную или зашифрованную информацию.

33. Полимер, в котором по меньшей мере около 0,1% полимерных молекул имеют связанные с ними 1-4 остатка формулы $-Q-(Y)_w$, где Q представляет собой фрагмент формулы (A) или (A') по п. 2, или (B) или (B') по п. 3; Y выбран из (i) галогена и (ii)

необязательно замещенных N-гетероциклоалифатических групп, содержащих от 3 до примерно 8 членов в цикле, по меньшей мере один из которых представляет собой N, и связанных с Q через атом N, и/или необязательно замещенную фенокси группу, связанную с Q через атом O, при условии, что по меньшей мере один Y представляет собой (ii);

W представляет собой целое число от 1 до 4; и при условии, что Q может одновременно иметь до 4 связанных с ним полимерных молекул.

34. Полимер по п. 33, в котором указанный полимер представляет собой соединение общей формулы (2):

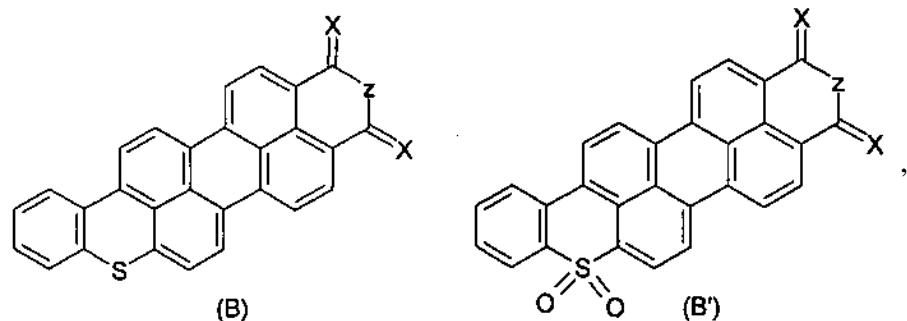


где группы R_4 , одинаковые или отличающиеся друг от друга, выбраны из C_1-C_{10} алкила и C_1-C_4 алcoxи-групп;

т представляет собой целое число от 1 до примерно 30;

п представляет собой целое число от 1 до примерно 3.

35. Необязательно замещенное соединение формулы (B) или (B'):

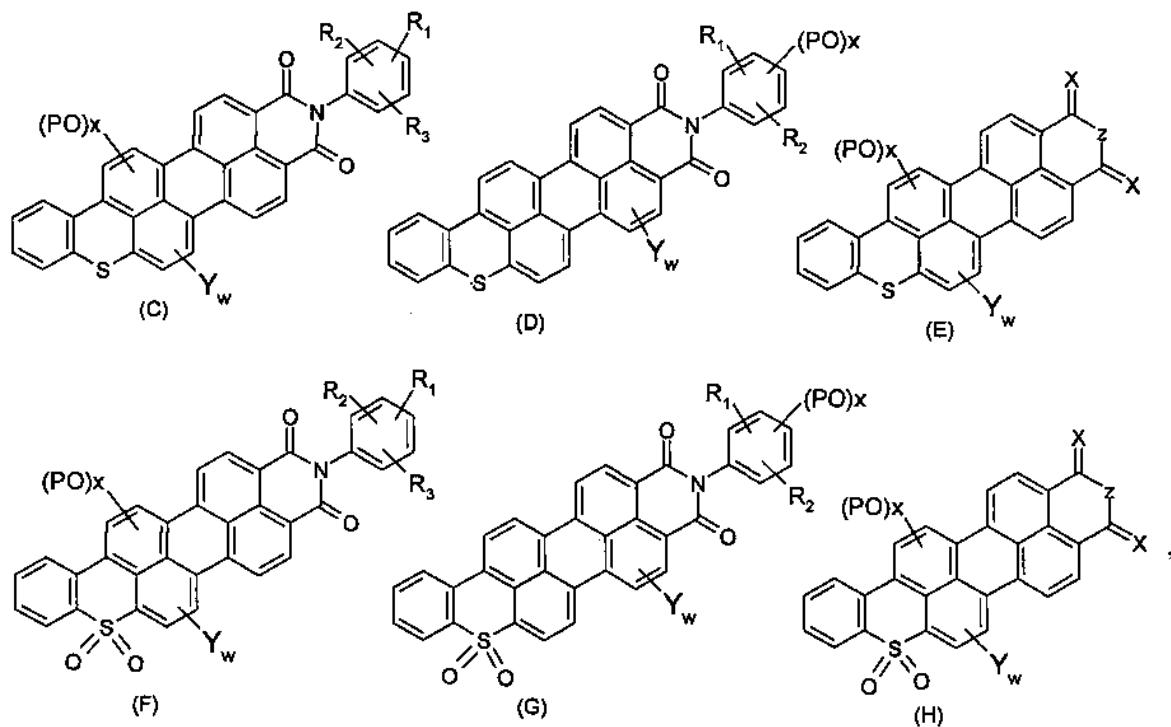


где Z представляет собой O, S или N-R, и X, которые могут быть одинаковыми или разными, представляют собой O, S или NR';

R и R' независимо представляют собой необязательно замещенную алифатическую, циклоалифатическую, ароматическую, гетероароматическую, алкиларильную, алкилгетероарильную, арилалкильную или гетероарилалкильную группу, содержащую от 1 до примерно 20 атомов углерода; и R и R' могут также быть объединены с образованием, вместе с атомами N, к которым они присоединены, необязательно замещенного и/или конденсированного 5-7-членного кольца.

36. Соединение по п. 35, не содержащее заместителей.

37. Соединение по п. 35, представляющее собой соединение, соответствующее одной из формул (C), (D), (E), (F), (G) или (H):



где в случае формулы (E) и (H) Z представляет собой O, S или N-R; и X, которые могут быть одинаковыми или разными, представляют собой O, S или NR'; и

R и R' независимо представляют собой необязательно замещенную алифатическую, циклоалифатическую, ароматическую, гетероароматическую, алкиларильную, алкилгетероарильную, арилалкильную или гетероарилалкильную группу, содержащую от 1 до примерно 20 атомов углерода; и R и R' могут быть объединены с образованием, совместно с атомами N, к которым они присоединены, необязательно замещенного и/или конденсированного 5-7-членного цикла;

R₁, R₂ и R₃ независимо выбраны из атома водорода, C₁-C₄алкила, C₁-C₄алкил-COOH, C₁-C₄алкил-SO₃H, C₁-C₄ алcoxи-группы, моно(C₁-C₄)алкиламино-группы, ди(C₁-C₄)алкиламино-группы, C₁-C₄аминоалкила, галогена, циано-группы, нитро-группы и SO₃H, при этом алкильные группы необязательно могут быть замещенными;

Y выбран из (i) галогена и (ii) необязательно замещенных N-гетероциклоалифатических групп, содержащих от 3 до примерно 8 членов в цикле и связанных с ароматическим кольцом через атом N, и (iii) необязательно замещенных фенокси-групп, связанных с ароматическим кольцом через атом O, причем указанные фенокси-группы могут быть замещены одним или несколькими заместителями, выбранными из галогена, нитро-группы, циано-группы, NRR', SO₃H и COOH, и солей и производных указанных сульфоновых и карбоксильных кислотных групп, OH, гетероциклоалкилов, содержащих до трех гетероатомов, выбранных из O, N и S, в качестве членов цикла, и от 3 до примерно 8 членов цикла, и алкильных (включая циклоалкильные) и алcoxи (включая циклоалcoxи) групп, содержащих от 1 до примерно 10 атомов углерода;

Р представляет собой полимерный фрагмент, содержащий по меньшей мере три повторяющихся фрагмента, содержащих необязательно замещенное фенильное кольцо;

и x представляет собой целое число от 0 до 4; и w представляет собой целое число от 0 до 4.