

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 930 973**

51 Int. Cl.:

C09K 9/02 (2006.01)
C08G 65/332 (2006.01)
C08G 77/14 (2006.01)
C08G 77/38 (2006.01)
C08L 83/06 (2006.01)
C08L 101/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **15.04.2019** **PCT/JP2019/016230**

87 Fecha y número de publicación internacional: **24.10.2019** **WO19203205**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **15.04.2019** **E 19787775 (6)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **12.10.2022** **EP 3783084**

54 Título: **Compuesto fotocrómico, composición curable que contiene dicho compuesto fotocrómico y artículo óptico**

30 Prioridad:

17.04.2018 JP 2018079468
17.04.2018 JP 2018079303

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
22.12.2022

73 Titular/es:

TOKUYAMA CORPORATION (100.0%)
1-1, Mikage-cho
Shunan-shi, Yamaguchi 745-8648, JP

72 Inventor/es:

MIYAZAKI, MASAYUKI y
TAKENAKA, JUNJI

74 Agente/Representante:

GONZÁLEZ PECES, Gustavo Adolfo

ES 2 930 973 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

Compuesto fotocrómico, composición curable que contiene dicho compuesto fotocrómico y artículo óptico

Campo técnico

5 La presente invención se refiere a un compuesto fotocrómico novedoso, una composición curable fotocrómica novedosa que contiene el compuesto fotocrómico y un artículo óptico.

Técnica antecedente

10 Un compuesto fotocrómico tipificado por un compuesto de cromeno, un compuesto de fulguro y un compuesto de espirooxazina tiene tales características (rendimiento fotocrómico) que cambia rápidamente su color cuando se irradia con luz, incluidos los rayos UV, como la luz solar o la luz de una lámpara de mercurio, y cuando se detiene la fotoirradiación y el compuesto se mantiene en un lugar oscuro, se restablece el color original, y aprovechando las características, el compuesto se utiliza en diversas aplicaciones, especialmente para materiales ópticos.

15 Por ejemplo, una lente de gafas fotocrómica que utiliza un compuesto fotocrómico y a la que se le da un rendimiento fotocrómico colorea rápidamente en una zona exterior en la que se irradia con luz, incluidos los rayos UV, como la luz del sol, y funciona como unas gafas de sol, pero en una zona interior sin dicha fotoirradiación, se decolora y funciona como unas gafas ordinarias transparentes, y la demanda de dicha lente de gafas fotocrómica está aumentando en estos días.

Para impartir prestaciones fotocrómicas a un material óptico, en general, se utiliza un compuesto fotocrómico junto con un material plástico, y específicamente se conocen los siguientes procedimientos.

20 (a) Un procedimiento para disolver un compuesto fotocrómico es en un compuesto y polimerizarlo para formar directamente un material óptico como una lente. Este procedimiento se denomina procedimiento de amasado.

(b) Un procedimiento para proporcionar una capa de resina que contenga un compuesto fotocrómico disperso en ella, en la superficie de un artículo con forma de plástico, como una lente, por polimerización de recubrimiento o de colada. El procedimiento se denomina procedimiento de laminación.

25 (c) Un procedimiento de unión de dos láminas ópticas mediante una capa adhesiva formada por una resina adhesiva que contiene un compuesto fotocrómico disperso en ella. El procedimiento se denomina procedimiento aglutinante.

Los materiales ópticos, como los artículos ópticos con prestaciones fotocrómicas, deben tener además las siguientes características

30 (I) Bajo grado de coloración en una región de luz visible antes de la irradiación con rayos UV (coloración inicial).

(II) Alto grado de coloración en la irradiación con rayos UV (densidad de coloración).

(III) Alta tasa de restauración al estado original tras dejar de ser irradiado con rayos UV (tasa de decoloración).

(IV) Buena durabilidad recurrente para la acción reversible de la coloración a la decoloración.

(V) Alta estabilidad de almacenamiento.

(VI) Facilidad para adaptarse a diversas formas.

35 Hasta ahora se ha informado de varios compuestos fotocrómicos, y se ha informado de que algunos compuestos fotocrómicos que incluso tienen una buena respuesta óptica en una matriz líquida tienden a tener una pobre respuesta óptica en una matriz sólida y a tener un largo período de medio valor de decoloración. Se considera que esto se debe a que el espacio libre es abrumadoramente pequeño en una matriz sólida en comparación con el de una matriz líquida, y por lo tanto el cambio estructural de un compuesto fotocrómico estaría restringido en una matriz sólida. Como procedimiento para resolver el problema, se propone un compuesto fotocrómico que puede ser nanoencapsulado. Específicamente, recientemente, se ha divulgado un compuesto fotocrómico que tiene un grupo de cadena de oligómero, como un grupo de cadena de oligómero de polalquileño o un grupo de cadena de oligómero de polisiloxano (en lo sucesivo, un compuesto fotocrómico polimérico). Se ha informado de que un compuesto fotocrómico polimérico de este tipo tiene una baja dependencia de la matriz y, por lo tanto, presenta una excelente capacidad de respuesta óptica incluso en una matriz sólida (véanse los PTL 1 y 2).

50 El mencionado compuesto fotocrómico polimérico es una técnica que ha llamado la atención recientemente, pero se sabe que un producto curado que contiene un compuesto fotocrómico polimérico se enturbia. Como solución, se sabe que se puede hacer que una lente a base de (tio)uretano exprese características fotocrómicas controlando la relación equivalente de los grupos funcionales en el compuesto de isocianato y el alcohol difuncional y, además, se puede evitar que la lente se enturbie (véase PTL 3). Se conocen otros compuestos fotocrómicos a partir del PTL4.

Lista de citas**Literatura sobre patentes**PTL 1: WO²⁰⁰⁴/041961PTL 2: WO²⁰⁰⁰/0156305 PTL 3: WO²⁰¹⁷/047745

PTL4: WO 2014/152259 A1

Sumario de la invención**Problema técnico**

10 Como se ha descrito anteriormente, un compuesto fotocromático polimérico expresa altas características fotocromáticas en cada matriz. Sin embargo, por otro lado, se sabe que el producto fotocromático curado resultante se enturbia, lo que parece ser causado por la agregación de un compuesto fotocromático polimérico durante el curado.

Por otro lado, un compuesto fotocromático de bajo peso molecular que no tenga un grupo de cadena de oligómeros no se agrega en una matriz sólida y puede dar un producto fotocromático transparente curado. Sin embargo, tiene una alta dependencia de la matriz, y por lo tanto tiene un problema en el punto de la tasa de decoloración en una matriz sólida.

15 Además, se desea que tanto un compuesto fotocromático polimérico como un compuesto fotocromático de bajo peso molecular sean rápidamente solubles en una composición de monómero que vaya a ser un sustrato para artículos ópticos, desde el punto de vista de la producción de productos fotocromáticos curados.

20 Como se ha descrito anteriormente, recientemente se ha deseado desarrollar un compuesto fotocromático capaz de expresar características fotocromáticas que no dependan de una matriz, excelente en solubilidad en una composición de monómero para ser un sustrato para artículos ópticos, y capaz de dispersarse de forma estable y existir pero no agregarse en un proceso de formación de sustrato óptico (durante el curado).

Por consiguiente, un objeto de la presente invención es proporcionar un compuesto fotocromático que tiene los efectos mencionados anteriormente.

Solución del problema

25 Los presentes inventores han realizado estudios asiduos para resolver los problemas mencionados. Por ello, los inventores han investigado la introducción de varios sustituyentes en un compuesto fotocromático polimérico capaz de mostrar excelentes características fotocromáticas en una matriz sólida, con el fin de que el compuesto pueda dispersarse altamente en una matriz. Como resultado, los inventores han encontrado que un compuesto fotocromático polimérico que tiene un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono es útil para resolver los problemas antes

30 mencionados. Específicamente, los inventores han encontrado que, introduciendo un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en un compuesto fotocromático polimérico, el compuesto resultante puede mantener las características fotocromáticas en una matriz sólida y puede mostrar una excelente solubilidad en una composición de monómero, y se suprime la agregación durante el curado, y han completado la presente invención.

35 A saber, un primer aspecto de la presente invención es: un compuesto fotocromático que tiene una fracción de indenaftopiano, en el que: la fracción de indenaftopiano tiene:

un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, y

un grupo A de cadena de oligómero que tiene 3 o más unidades recurrentes seleccionadas entre un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialquilenol, un grupo de cadena de oligómero de poliéster, un grupo de cadena de polisiloxano y un grupo de cadena de oligómero de poliéster poliéter.

40 Un segundo aspecto de la presente invención es una composición curable fotocromática que contiene el compuesto fotocromático del primer aspecto de la presente invención y un compuesto polimerizable.

Un tercer aspecto de la presente invención es un artículo óptico fotocromático producido mediante la polimerización de la composición curable fotocromática del segundo aspecto de la presente invención.

45 Un cuarto aspecto de la presente invención es un artículo polimérico moldeado que contiene, como disperso en el mismo, el compuesto fotocromático del primer aspecto de la presente invención.

Un quinto aspecto de la presente invención es un artículo óptico recubierto con una película polimérica que contiene, como disperso en ella, el compuesto fotocromático del primer aspecto de la presente invención.

Efectos ventajosos de la invención

El compuesto fotocromático de la presente invención presenta excelentes características fotocromáticas en una matriz polimérica. En el caso de que se utilice un compuesto fotocromático ya existente, a menudo puede surgir el problema de que el producto curado se enturbie, pero cuando se utiliza el compuesto fotocromático de la presente invención, se puede producir un producto fotocromático curado que tiene buenas características fotocromáticas y mecánicas y es transparente.

Descripción de las realizaciones

El compuesto fotocromático de la presente invención es un compuesto fotocromático caracterizado por tener una fracción de indenonaftopirano, en la que la fracción de indenonaftopirano tiene un grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, y un grupo A de cadena de oligómero que tiene 3 o más unidades recurrentes seleccionadas entre un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialqueno, un grupo de cadena de oligómero de poliéster, un grupo de cadena de polisiloxano y un grupo de cadena de oligómero de poliéster poliéter.

En el compuesto fotocromático de la presente invención, el número de las fracciones de indenonaftopirano no está específicamente limitado en cuanto a que sea al menos una o más. Sobre todo, teniendo en cuenta la productividad, las características fotocromáticas y la solubilidad del compuesto fotocromático de la presente invención, el número de las fracciones de indenonaftopirano es preferentemente de 1 a 10, más preferentemente de 1 a 6, incluso más preferentemente de 1 a 4, y más preferentemente de 1 a 2.

En el caso de que el compuesto tenga múltiples fracciones de indenonaftopirano, las fracciones de indenonaftopirano pueden tener la misma estructura o cada una puede tener una estructura diferente. En la presente invención, tener 3 o más unidades recurrentes significa que el grupo tiene "3 o más fracciones de enlace que tienen la misma composición". Específicamente, el grupo de la cadena del oligómero de óxido de polialqueno que tiene 3 o más unidades recurrentes es un grupo representado por la siguiente fórmula:



en la que R representa un grupo alqueno, y s indica una unidad recurrente y es 3 o más.

En el caso de que el número de unidades recurrentes sea inferior a 3 en el grupo de cadenas de oligómeros A, no se pueden alcanzar excelentes características fotocromáticas en una matriz sólida y, por tanto, es desfavorable. El límite superior del número de unidades recurrentes no está específicamente limitado, y puede determinarse adecuadamente en función de las características fotocromáticas del compuesto fotocromático previsto. En consideración a la productividad del propio compuesto fotocromático de la presente invención y de las características fotocromáticas del mismo, el número recurrente de las cadenas de oligómeros es preferentemente inferior a 200, más preferentemente de 3 a 170, aún más preferentemente de 10 a 150, más preferentemente de 15 a 80.

En el caso de que el peso molecular promedio del grupo de cadenas de oligómeros A sea pequeño (cuando la longitud de la cadena de oligómeros es corta), el efecto reductor de la dependencia de la matriz tiende a ser menor. Se supone que esto se debe a que las nanocápsulas para encapsular el compuesto fotocromático serían difíciles de formar o el tamaño de las nanocápsulas sería pequeño, de modo que no se podría asegurar un espacio libre suficiente. Por otro lado, cuando el peso molecular promedio es grande, la proporción del compuesto fotocromático por unidad de peso se reduce y la densidad de coloración tiende a ser insuficiente. En consecuencia, es necesario aumentar la cantidad del compuesto fotocromático que se va a añadir. El peso molecular promedio del grupo de cadenas de oligómeros A es, aunque no está específicamente limitado, en consideración a las situaciones mencionadas, preferentemente de 300 a 30.000, más preferentemente de 350 a 25.000, aún más preferentemente de 400 a 20.000, especialmente preferentemente de 440 a 15.000.

En el compuesto fotocromático de la presente invención, el número de los grupos de cadena de oligómero A no está específicamente limitado, y puede ser al menos uno en una molécula del compuesto fotocromático. Sobre todo, en consideración de la productividad y de las características fotocromáticas del compuesto fotocromático mismo de la presente invención, el número de los grupos de cadenas de oligómeros A en una molécula del compuesto fotocromático es preferentemente de 1 a 10, más preferentemente de 1 a 5. También es preferible que el número de grupos de cadenas de oligómero A en una fracción de indenonaftopirano sea preferentemente de 0,25 a 6, más preferentemente de 0,25 a 3, incluso más preferentemente de 0,5 a 2. Sobre todo, teniendo en cuenta la productividad y las características fotocromáticas del compuesto fotocromático de la presente invención, el número es preferentemente de 0,5 a 1. El caso en el que el número de los grupos de cadenas de oligómeros A en una fracción de indenonaftopirano es de 0,5 corresponde a un caso en el que la fracción de indenonaftopirano está presente en ambos terminales del grupo de cadenas de oligómeros A. En el caso en el que el compuesto tiene varios grupos de cadenas de oligómeros A, los grupos de cadenas de oligómeros A pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes. Sin embargo, en consideración a la productividad del compuesto fotocromático de la presente invención, preferentemente, los grupos son los mismos. Teniendo en cuenta sus características fotocromáticas, el grupo es preferentemente un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialqueno o un grupo de cadena de oligómero de polisiloxano.

En consideración a la productividad y a las características fotocromáticas del compuesto fotocromático de la presente invención, preferentemente, el grupo A de la cadena del oligómero sustituye en la posición 3, en la posición 6, en la posición 7, en la posición 11 o en la posición 13 de la fracción de indenonaftopirano.

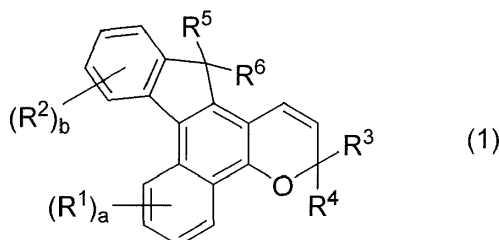
En la presente invención, el número de los grupos alquenilo que tienen de 10 a 30 átomos de carbono o los grupos que tienen un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal de los mismos no está específicamente limitado, y puede ser al menos uno en el compuesto fotocromico, y puede variarse apropiadamente en función del tipo y el peso molecular del grupo A de la cadena del oligómero y del número de los sustituyentes. Sobre todo, teniendo en cuenta la productividad y las características fotocromicas del propio compuesto fotocromico de la presente invención y la capacidad de suprimir el enturbiamiento del producto fotocromico curado que se produce utilizando el compuesto, el número de los grupos alquenilo que tienen de 10 a 30 átomos de carbono o los grupos que tienen un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal de los mismos es preferentemente de 1 a 12 en un grupo de cadena de oligómeros A, más preferentemente de 1 a 6, aún más preferentemente de 1 a 4, más preferentemente de 1 a 2.

En la presente invención, entre los grupos de alquenilo que tienen de 10 a 30 átomos de carbono o los grupos que tienen un grupo de alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, uno capaz de exhibir un efecto especialmente excelente es preferentemente un grupo en el que la fracción del grupo de alquenilo tiene de 15 a 25 átomos de carbono, más preferentemente de 15 a 20 átomos de carbono. Sobre todo, en consideración a la productividad del compuesto fotocromico, se prefiere un grupo oleilo que tiene 18 átomos de carbono, o un grupo que tiene un grupo oleilo que tiene 18 átomos de carbono en el terminal del mismo.

El grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o el grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo puede estar presente en el grupo A de la cadena del oligómero. En la fracción de indenonaftopirano, el grupo puede estar presente en una posición diferente del grupo A de la cadena del oligómero. El grupo puede estar presente en ambos. En el caso de que el grupo esté presente en el grupo A de cadena de oligómero, preferentemente, el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono se introduce en el terminal del grupo A de cadena de oligómero. Sobre todo, en consideración de las características fotocromicas y la productividad del compuesto fotocromico mismo de la presente invención, el grupo está presente en una posición diferente del grupo A de cadena de oligómero. La posición en la que está presente el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono no está limitada específicamente, pero en consideración de la productividad del compuesto fotocromico mismo de la presente invención, preferentemente, el grupo sustituye en la posición 3, la posición 6, la posición 7, la posición 11 o la posición 13 de la molécula de indenonaftopirano.

<Compuesto fotocromico preferido>

En el compuesto fotocromico de la presente invención, preferentemente, la fracción de indenonaftopirano es una estructura representada por la siguiente fórmula (1)



En lo sucesivo, el compuesto fotocromico que tiene la fracción puede denominarse simplemente "compuesto cromeno".

<Respecto a a, b>

En la fórmula (1), a representa el número de R¹. b representa el número de R². Con eso,

a es un número entero de 0 a 4, b es un número entero de 0 a 4,

en el caso de que a sea 2 a 4, los R¹ plurales pueden ser iguales o diferentes,

en el caso de que b sea de 2 a 4, los R² plurales pueden ser iguales o diferentes.

<En el caso de que a y b sean 2 o más cada uno>

En el caso de que a sea 2 a 4 y el compuesto tenga R¹ vecinos, los R¹ vecinos pueden formar juntos y junto con el átomo de carbono que se une a estos R¹, un anillo que contiene opcionalmente un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un átomo de carbono o un átomo de nitrógeno, y además el anillo puede tener un sustituyente. El anillo puede tener 2 o más átomos de un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un átomo de carbono o un átomo de nitrógeno al mismo tiempo. Las combinaciones de los R¹ vecinos incluyen la posición 5 y la posición 6, o la posición 6 y la posición 7, o la posición 7 y la posición 8 del compuesto de cromeno.

En el caso de que b sea de 2 a 4 y el compuesto tenga R² vecinos, los R² vecinos pueden formar juntos y junto con el átomo de carbono que se une a estos R², un anillo que contiene opcionalmente un átomo de oxígeno, un átomo de

azufre, un átomo de carbono o un átomo de nitrógeno, y además el anillo puede tener un sustituyente. El anillo puede tener 2 o más átomos de un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un átomo de carbono o un átomo de nitrógeno al mismo tiempo. Las combinaciones de los R² vecinos incluyen la posición 9 y la posición 10, o la posición 10 y la posición 11, o la posición 11 y la posición 12 del compuesto de cromeno.

- 5 Es necesario que al menos un grupo A de cadena de oligómero se una a la fracción de indenonaftopirano representada por la fórmula (1). Concretamente, al menos uno de los R¹, R², R³, R⁴, R⁵ y R⁶ puede ser el grupo A de cadena de oligómero (o un grupo que tiene el grupo A de cadena de oligómero).

- 10 Los sustituyentes específicos se describen secuencialmente a continuación. Un número preferido y un tipo preferido de la fracción de indenonaftopirano representada por la fórmula (1), y un número preferido y un tipo preferido del grupo A de cadena de oligómero son los mismos que los descritos anteriormente.

< R¹, y R² >

- Preferentemente, R¹ y R² son cada uno, de forma independiente, el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado que tiene 3 o más unidades recurrentes, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo un grupo
15 hidroxilo, un grupo alquilo, un grupo haloalquilo, un grupo cicloalquilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo alcoxi, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un átomo de halógeno, un grupo alquiltio un grupo ariltio que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo nitro, un grupo formilo, un grupo hidroxicarbonilo, un grupo alquilcarbonilo, un grupo alcoxicarbonilo, un grupo aralquilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo
20 ariloxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo heteroarilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alcoxialquiltio, un grupo haloalquiltio o un grupo cicloalquiltio que tiene opcionalmente un sustituyente.

- El grupo alquilo que pueden tomar R¹ y R² es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono. Los ejemplos preferidos del grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono incluyen un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo n-propilo, un grupo isopropilo, un grupo n-butilo, un grupo s-butilo, un grupo t-butilo, un grupo pentilo y un grupo hexilo.

- El grupo haloalquilo es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono. El grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono es preferentemente un grupo alquilo sustituido con un átomo de flúor, un átomo de cloro o un átomo de bromo. Los ejemplos preferidos del grupo haloalquilo incluyen un grupo trifluorometilo, un grupo tetrafluoroetilo, un grupo clorometilo, un grupo 2-cloroetilo y un grupo bromometilo.

- El grupo cicloalquilo es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono (un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono en anillo). Los ejemplos del grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono incluyen un grupo ciclopropilo, un grupo ciclobutilo, un grupo
35 ciclopentilo y un grupo ciclohexilo. El grupo cicloalquilo puede tener un sustituyente, pero el número de átomos de carbono mencionado anteriormente (de 3 a 8 átomos de carbono) no incluye el número de átomos de carbono del sustituyente.

- El grupo alcoxi es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono. Los ejemplos preferidos del grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono incluyen un grupo metoxi, un grupo etoxi, un grupo n-propoxi, un grupo isopropoxi, un grupo n-butoxi, un grupo s-butoxi y un grupo t-butoxi.

- El grupo amino es un grupo amino primario (-NH₂), y el grupo amino sustituido es un grupo amino secundario o terciario en el que uno o dos átomos de hidrógeno están sustituidos. El sustituyente que tiene el grupo amino sustituido incluye, aunque sin limitarse específicamente, el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 7 átomos de carbono, un grupo arilo que tiene de 6 a 14 átomos de carbono y un grupo heteroarilo que tiene de 4 a 14 átomos de carbono. Los ejemplos preferidos del grupo amino incluyen un grupo amino, un grupo metilamino, un grupo dimetilamino, un grupo etilamino, un grupo dietilamino, un grupo
50 grupo fenilamino y un grupo difenilamino.

- El grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente es preferentemente un grupo heterocíclico que tiene de 3 a 10 átomos de carbono. Específicamente, ejemplos de los mismos incluyen un grupo heterocíclico alifático como un grupo morfolino, un grupo piperidino, un grupo pirrolidinilo, un grupo piperazino y un grupo N-metilpiperazino; y un grupo heterocíclico aromático como un grupo indolinilo. Naturalmente, el grupo heterocíclico puede tener un sustituyente, y los sustituyentes preferidos incluyen el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, y un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono. Los ejemplos preferidos del grupo heterocíclico que tiene un sustituyente incluyen un grupo 2,6-dimetilmorfolino, un grupo 2,6-dimetilpiperidino y un grupo 2,2,6,6-tetrametilpiperidino.

Los ejemplos del átomo de halógeno incluyen un átomo de flúor, un átomo de cloro, un átomo de bromo y un átomo de yodo.

5 El grupo alquiltio es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono. El grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono incluye un grupo metiltio, un grupo etiltio, un grupo n-propiltio, un grupo isopropiltio, un grupo n-butiltio, un grupo s-butiltio y un grupo t-butiltio.

10 El grupo ariltio que tiene opcionalmente un sustituyente es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono. El grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono incluye un grupo feniltio, un grupo 1-naftiltio y un grupo 2-naftiltio. Naturalmente, el grupo ariltio puede tener un sustituyente. Entre los sustituyentes preferidos se encuentran el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y el grupo antes mencionado que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

15 El grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo es preferentemente un grupo oxialquenilo, un grupo oxialquenilo de monoalquilenglicol o un grupo oxialquenilo de dialquilenglicol. (En estos tres grupos, el grupo alquenilo terminal tiene de 10 a 30 átomos de carbono. En adelante, estos tres grupos pueden denominarse simplemente "grupos alquenilo terminales") La fracción de alquilenglicol es preferentemente un etilenglicol o un propilenglicol. El grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo puede ser el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, en el que el terminal es el "grupo alquenilo terminal" antes mencionado. Entre los grupos que tienen un grupo alquenilo con 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo terminal, cuando un grupo preferido está representado por una fórmula general, el grupo puede estar representado, por ejemplo, por $-\text{O}-(\text{R}^{16}\text{O})_n-\text{R}^{17}$. R^{16} representa un grupo alquileo de 1 a 10 átomos de carbono, preferentemente un grupo alquileo de 2 a 3 átomos de carbono. R^{17} representa un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono. n representa un número entero de 0 a 2.

25 El grupo alquilcarbonilo es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo alquilcarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono. El grupo alquilcarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono incluye un grupo acetilo y un grupo etilcarbonilo.

El grupo alcoxicarbonilo es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo alcoxicarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono. El grupo alcoxicarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono incluye un grupo metoxicarbonilo y un grupo etoxicarbonilo.

30 El grupo aralquilo que tiene opcionalmente un sustituyente es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo aralquilo que tiene de 7 a 11 átomos de carbono. El grupo aralquilo que tiene de 7 a 11 átomos de carbono incluye un grupo bencilo, un grupo feniletilo, un grupo fenilpropilo, un grupo fenilbutilo y un grupo naftilmetilo. Naturalmente, el grupo aralquilo puede tener un sustituyente. Entre los sustituyentes preferidos se encuentran el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y el grupo antes mencionado que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

40 El grupo aralcoxi que tiene opcionalmente un sustituyente es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo aralcoxi que tiene de 7 a 11 átomos de carbono. El grupo aralcoxi que tiene de 7 a 11 átomos de carbono incluye un grupo bencilico y un grupo naftilmetoxi. Naturalmente, el grupo aralcoxi puede tener un sustituyente. Entre los sustituyentes preferidos se encuentran el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y el grupo antes mencionado que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

45 El grupo ariloxi que tiene opcionalmente un sustituyente es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo ariloxi que tiene de 6 a 12 átomos de carbono. El grupo ariloxi que tiene de 6 a 12 átomos de carbono incluye un grupo feniloxi y un grupo naftiloxi. Naturalmente, el grupo ariloxi puede tener un sustituyente. Entre los sustituyentes preferidos se encuentran el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y el grupo antes mencionado que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

50 El grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono. El grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono incluye un grupo fenilo, un grupo 1-naftilo y un grupo 2-naftilo. Naturalmente, el grupo arilo puede tener un sustituyente. Entre los sustituyentes preferidos se encuentran el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y el grupo antes mencionado que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

El grupo heteroarilo que tiene opcionalmente un sustituyente es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo heteroarilo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono. El grupo heteroarilo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono tiene un grupo tienilo, un grupo furilo, un grupo pirrolinilo, un grupo piridilo, un grupo benzotienilo, un grupo benzofuranilo y un grupo benzopirrolinilo. Naturalmente, el grupo heteroarilo puede tener un sustituyente.

5 Entre los sustituyentes preferidos se encuentran el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y el grupo antes mencionado que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

10 El grupo alcoxialquiltio es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo alcoxialquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono. El grupo alcoxialquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono incluye un grupo metoximetiltio, un grupo metoxietiltio, un grupo metoxi-n-propiltio, un grupo metoxi-n-butiltio, un grupo etoxietiltio y un grupo n-propoxipropiltio.

15 El grupo haloalquiltio es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono. El grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono incluye un grupo trifluorometiltio, un grupo tetrafluoroetiltio, un grupo clorometiltio, un grupo 2-cloroetiltio y un grupo bromometiltio.

El grupo cicloalquiltio es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono. El grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono incluye un grupo ciclopropiltio, un grupo ciclobutiltio, un grupo ciclopentiltio y un grupo ciclohexiltio. El grupo cicloalquiltio puede tener un sustituyente, pero el número de carbono (de 3 a 8 átomos de carbono) del grupo no incluye el número de carbono del sustituyente.

20 El grupo cicloalquilo, el grupo ariltio, el grupo aralquilo, el grupo ariloxi, el grupo arilo, el grupo arilo, el grupo heteroarilo y el grupo cicloalquiltio pueden estar sin sustituir. En el caso de que estos grupos tengan un sustituyente, de 1 a 8 átomos de hidrógeno en el grupo para formar un anillo, preferentemente de 1 a 4 átomos de hidrógeno en el mismo, se sustituye preferentemente con un sustituyente seleccionado entre el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un

25 grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo ciano, un grupo nitro y un átomo de halógeno. Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los mismos grupos mencionados anteriormente.

30 El número de carbono del grupo aralquilo, el grupo aralcoxi, el grupo ariloxi, el grupo arilo y el grupo heteroarilo no incluye el número de carbono del sustituyente.

En el caso de que a y b sean cada uno 2 o más, los R¹ y R² vecinos pueden formar cada uno independientemente un grupo cíclico que contiene opcionalmente un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un átomo de carbono o un átomo de nitrógeno. El grupo cíclico es, aunque no está específicamente limitado, preferentemente un anillo que tiene de 5

35 a 7 átomos de anillo incluyendo el átomo de carbono al que se unen R¹ y R². El anillo puede tener opcionalmente un sustituyente, y el sustituyente puede ser un sustituyente seleccionado entre el mencionado grupo A de la cadena de oligómeros, el mencionado grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo hidroxilo un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo

40 que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo ciano, un grupo nitro y un átomo de halógeno. Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los mismos grupos mencionados anteriormente. Entre ellos, se prefiere un anillo representado por una fórmula (3) que se mencionará a continuación.

<Especialmente preferido R¹ y R²>

45 Entre los grupos arriba mencionados, en consideración del tono de coloración y de la densidad de coloración del compuesto fotocromático resultante y de la presencia o ausencia de enturbiamiento del producto curado resultante, R¹ y R² son preferentemente el grupo A de cadena de oligómero arriba mencionado, el grupo alquenilo arriba mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, el grupo alquilo antes mencionado, el grupo alcoxi antes mencionado, el grupo

50 heterocíclico antes mencionado que tiene opcionalmente un sustituyente, el grupo arilo antes mencionado que tiene opcionalmente un sustituyente, o el grupo ariltio antes mencionado que tiene opcionalmente un sustituyente. También es preferible que los R¹ vecinos o los R² vecinos se unan para ser un grupo formador de anillos. El sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado o el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono.

55 <R³ y R⁴>

R³ y R⁴ representan cada uno independientemente un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente, o un grupo heteroarilo que tiene opcionalmente un sustituyente.

Cada uno de los sustituyentes incluye de forma independiente un sustituyente seleccionado entre el grupo de cadena de oligómeros A antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo heterocíclico, un grupo ciano, un átomo de halógeno, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo nitro y un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo. Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los grupos específicamente ejemplificados para $\langle R^1 \text{ y } R^2 \rangle$ en el presente documento. Sobre todo, se prefiere el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado o un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

El sustituyente para el grupo arilo y el grupo heteroarilo es, especialmente desde el punto de vista de la exhibición de excelentes características fotocrómicas, preferentemente un grupo seleccionado entre el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, el grupo alquilo antes mencionado el grupo alcoxi antes mencionado, el grupo amino antes mencionado, el grupo amino sustituido antes mencionado, el grupo heterocíclico antes mencionado, el átomo de halógeno antes mencionado, el grupo ariltio antes mencionado, y un grupo que tiene un grupo alquenilo con 10 a 30 átomos de carbono en el terminal. Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los grupos específicamente ejemplificados para $\langle R^1 \text{ y } R^2 \rangle$ en el presente documento.

$\langle R^5 \text{ y } R^6 \rangle$

R^5 y R^6 representan cada uno, de forma independiente, el grupo alquenilo mencionado anteriormente que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, el grupo A de la cadena de oligómeros mencionado anteriormente, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo, un grupo haloalquilo, un grupo cicloalquilo, un grupo alcoxi, un grupo alcoxialquilo, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo, un grupo alcoxycarbonilo, un átomo de halógeno, un grupo aralquilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ariloxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente y un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente. Estos sustituyentes incluyen los mismos grupos ya descritos anteriormente en la sección de $\langle R^1 \text{ y } R^2 \rangle$.

R^5 y R^6 pueden formar juntos, junto con el átomo de carbono situado en la posición 13 de la fracción de indenonaftopirano a la que se unen, un anillo alifático que tiene de 3 a 20 átomos de carbono de anillo, un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, un heteroanillo que tiene de 3 a 20 átomos de anillo, o un anillo policíclico condensado formado por condensación del heteroanillo con un anillo aromático o un heteroanillo aromático. Estos anillos pueden tener un sustituyente. También pueden formar, junto con el átomo de carbono situado en la posición 13 de la fracción de indenonaftopirano a la que se unen, un anillo de hidrocarburo alifático que tiene de 3 a 20 átomos de carbono de anillo, un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo de hidrocarburo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, un heteroanillo que tiene de 3 a 20 átomos de anillo, o un anillo policíclico condensado formado por condensación del heteroanillo con un anillo de hidrocarburo aromático o un heteroanillo aromático. Naturalmente, el número de carbono y el número de átomo en el anillo cíclico indican el número de átomos de carbono que forman el anillo y el número de átomos que forman el anillo, respectivamente, y no incluyen el número de carbono o el número de átomo en el sustituyente.

Los ejemplos del anillo alifático incluyen un anillo de ciclopentano, un anillo de ciclohexano, un anillo de ciclooctano, un anillo de cicloheptano, un anillo de norbornano, un anillo de biciclononano, un anillo de adamantano y un anillo de espirodiciclohexano.

Los ejemplos del anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático incluyen un anillo de fenantreno. Algunos ejemplos de anillos hetero incluyen un anillo de tiofeno, un anillo de furano y un anillo de piridina. Entre los ejemplos del anillo policíclico condensado formado por la condensación del heteroanillo con un anillo aromático o un heteroanillo aromático se incluyen un anillo de fenilfurano y un anillo de bifeniltiofeno.

El anillo alifático antes mencionado, el anillo policíclico condensado antes mencionado formado por condensación del anillo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, el heteroanillo antes mencionado o el anillo policíclico condensado antes mencionado formado por condensación del heteroanillo con un anillo aromático o un heteroanillo aromático pueden tener un sustituyente. El sustituyente que puede estar en el anillo (o en el anillo policíclico condensado) incluye sustituyentes seleccionados entre el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido y un átomo de halógeno. Estos sustituyentes incluyen los mismos grupos ya descritos anteriormente en la sección de $\langle R^1 \text{ y } R^2 \rangle$.

Entre los sustituyentes de estos anillos, los grupos preferidos con los que el compuesto de cromeno de la presente invención puede exhibir un efecto excelente incluyen un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono. Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los grupos ejemplificados anteriormente para $\langle R^1$ y $R^2 \rangle$.

<Especialmente preferido R^5 y R^6 >

R^5 y R^6 representan cada uno, de forma independiente, el grupo de cadena de oligómeros A antes mencionado, el grupo de alqueno antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo de alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo, un grupo haloalquilo, un grupo cicloalquilo, un grupo alcoxi, un grupo alcoxialquilo, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo, un grupo alcóxicarbonilo, un átomo de halógeno, un grupo aralquilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ariloxi que tiene opcionalmente un sustituyente o un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente. Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para $\langle R^1$ y $R^2 \rangle$.

Dos de los R^5 y R^6 pueden formar juntos, junto con el átomo de carbono en posición 13 de la fracción de indenonaftopirano a la que se unen, un anillo alifático que tiene de 3 a 20 átomos de carbono de anillo, un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, un heteroanillo que tiene de 3 a 20 átomos de anillo, o un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo hetero con un anillo aromático o un heteroanillo aromático. Estos anillos pueden tener un sustituyente. También pueden formar, junto con el átomo de carbono situado en la posición 13 de la fracción de indenonaftopirano a la que se unen, un anillo de hidrocarburo alifático que tiene de 3 a 20 átomos de carbono de anillo, un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo de hidrocarburo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, un heteroanillo que tiene de 3 a 20 átomos de anillo, o un anillo policíclico condensado formado por condensación del heteroanillo con un anillo de hidrocarburo aromático o un heteroanillo aromático.

En la presente invención, los sustituyentes preferidos para R^5 y R^6 incluyen el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo de alqueno antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo de alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo, un grupo alcoxi y un caso de formación de un anillo junto con los átomos de carbono en posición 13 en la fracción de indenonaftopirano a la que se unen R^5 y R^6 . Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para $\langle R^1$ y $R^2 \rangle$.

Entre ellos, desde el punto de vista de que el compuesto fotocromico puede exhibir excelentes características fotocromicas y tiene una alta durabilidad, se prefiere el caso de la formación de un anillo junto con el átomo de carbono en posición 13 en la fracción de indenonaftopirano a la que se unen los grupos. Sobre todo, especialmente desde el punto de vista de una tasa de decoloración rápida, es más preferible un caso de formación de un anillo alifático o un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, y en particular, desde el punto de vista de la reducción de la coloración inicial por termocromía, es especialmente más preferible un caso de formación de un anillo alifático.

Ejemplos preferidos del grupo de anillos alifáticos que se formará por R^5 y R^6 incluyen un grupo de anillos de hidrocarburos alifáticos no sustituido que tiene de 6 a 16 átomos de carbono en el anillo, y un grupo de anillos de hidrocarburos alifáticos que tiene al menos un sustituyente seleccionado entre un grupo alquilo, un grupo haloalquilo, un grupo cicloalquilo, un grupo alcoxi, un grupo amino, un grupo aralquilo, un grupo arilo y un átomo de halógeno. Ejemplos específicos de estos sustituyentes incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para $\langle R^1$ y $R^2 \rangle$.

Entre el grupo de anillos de hidrocarburos alifáticos, un grupo especialmente preferido es un grupo de anillos de hidrocarburos alifáticos sustituido con un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono (preferentemente un grupo alquilo que tiene de 1 a 3 átomos de carbono, o el grupo de anillos de hidrocarburos alifáticos unido o condensado con un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono).

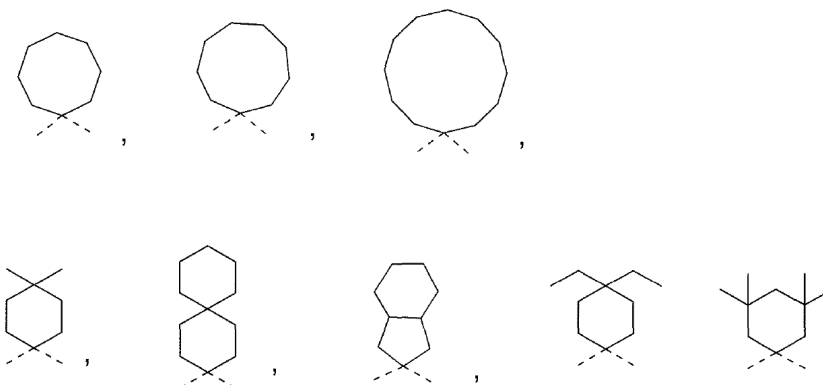
Entre ellos, desde el punto de vista de lograr una excelente tasa de decoloración y una alta densidad de coloración, el grupo de anillos de hidrocarburos alifáticos es preferentemente un anillo seleccionado entre un anillo de ciclopentano, un anillo de ciclohexano, un anillo de cicloheptano, un anillo de ciclooctano, un anillo de ciclononano, un anillo de ciclodecano, un anillo de cicloundecano, un anillo de ciclododecano y un anillo de espirociclohexano (especialmente preferentemente un anillo de ciclohexano),

y el anillo puede tener de 1 a 10 sustituyentes seleccionados entre un grupo alquilo de 1 a 3 átomos de carbono y un grupo cicloalquilo de 5 a 7 átomos de carbono, o

el anillo puede ser un anillo condensado con un grupo cicloalquilo de 5 a 7 átomos de carbono.

Ejemplos específicos de grupos de anillos de hidrocarburos alifáticos especialmente preferidos incluyen las siguientes fórmulas

[Quím. 2]



En estas fórmulas, el átomo de carbono que tiene enlaces de líneas punteadas es un átomo de carbono en posición 13 de la fracción de indenonaftopirano.

Los sustituyentes en diferentes posiciones de un compuesto de cromeno se han descrito en el presente documento, y como se ha descrito anteriormente, el sustituyente para el grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo A de cadena de oligómero, de modo que el compuesto tiene al menos un grupo A de cadena de oligómero mencionado anteriormente en la molécula. El sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser también el grupo mencionado anteriormente que tiene un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o un grupo que tiene un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo de tal manera que el número de los grupos alquénilo que tienen de 10 a 30 átomos de carbono es de 1 a 12 en un grupo A de cadena de oligómero en una molécula. El número de grupos alquénilo que tienen de 10 a 30 átomos de carbono (de 1 a 12) es el número total de todos los grupos alquénilo, incluyendo el número de grupos sustituyentes en los que el terminal del sustituyente es un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono.

A continuación se describen los grupos de cadenas de oligómeros A preferidos.

<Cadena de oligómeros Grupo A>

El compuesto de cromeno de la presente invención puede ser cualquiera en el que la fracción de indenonaftopirano representada por la fórmula (1) tenga al menos el grupo A de cadena de oligómero mencionado anteriormente, y al menos uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 y R^6 puede ser el grupo A de cadena de oligómero (o un grupo que tiene un grupo de cadena de oligómero).

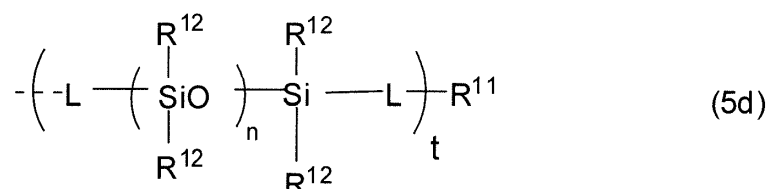
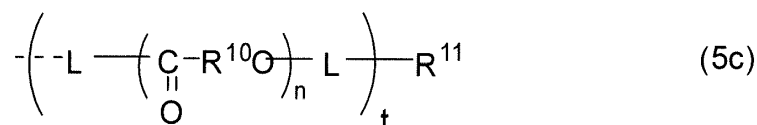
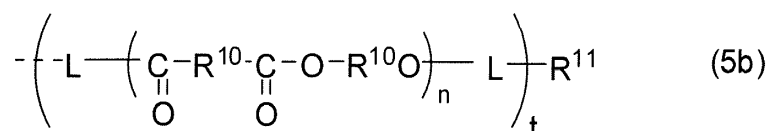
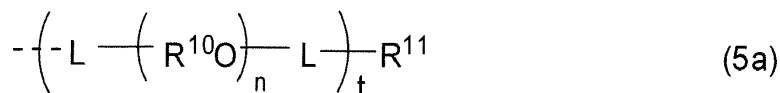
El grupo de cadenas de oligómeros A no está específicamente limitado en cuanto a que tiene 3 o más unidades recurrentes. Sobre todo, se prefiere un grupo que tiene una cadena de oligómero de óxido de polialquileo o una cadena de oligómero de polisiloxano con 3 o más unidades recurrentes. El número de unidades recurrentes del grupo de cadenas de oligómeros A es, como se ha descrito anteriormente, preferentemente de 3 a 200, más preferentemente de 3 a 170, y más preferentemente de 15 a 80. También es preferible que el peso molecular promedio del grupo de cadenas de oligómeros A sea de 300 a 30.000, más preferentemente de 350 a 25.000, aún más preferentemente de 400 a 20.000, especialmente más preferentemente de 440 a 15.000.

En la presente invención, el peso molecular promedio del grupo de cadenas de oligómeros A en un mol de la fracción de indenonaftopirano es extremadamente importante. Específicamente, con el fin de exhibir un efecto excelente en una matriz especialmente rígida (resina), el peso molecular promedio del grupo A de cadena de oligómero en un mol de la fracción de indenonaftopirano es preferentemente de 350 a 10000, más preferentemente de 440 a 5000. El peso molecular promedio del grupo de cadenas de oligómeros A puede controlarse en función del tipo de materia prima que se utilice para sintetizar el compuesto fotocromático. El peso molecular promedio al que se hace referencia en este documento significa un peso molecular promedio en número. El peso molecular promedio del número puede confirmarse a partir del compuesto de la materia prima al sintetizar el compuesto fotocromático de la presente invención. Tras la síntesis del compuesto fotocromático, se puede determinar el peso molecular promedio por ^1H -RMN del compuesto.

Entre el grupo de cadenas de oligómeros A mencionado anteriormente, para obtener excelentes características fotocromáticas y para reducir la dependencia de la matriz, se prefieren los grupos representados por las siguientes fórmulas (5a) a (5d) y descritos en detalle a continuación. Un compuesto de cromeno que tiene necesariamente un grupo de este tipo y que tiene un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono exhibe un efecto especialmente excelente.

<Cadena de oligómeros preferida Grupo A>

En la presente invención, el grupo A de cadena de oligómero que se va a utilizar no está limitado específicamente en cuanto a que es un grupo de cadena de oligómero que tiene 3 o más unidades recurrentes y se selecciona entre un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialquileo, un grupo de cadena de oligómero de poliéster, un grupo de cadena de polisiloxano y un grupo de cadena de oligómero de poliéster poliéter. Como grupos de cadenas de oligómeros especialmente preferidos A, las siguientes fórmulas (5a) a (5d):



se ejemplifican.

En las fórmulas (5a) a (5c), R^{10} representa un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, y en el caso de que el compuesto tenga varios R^{10} en una molécula, los R^{10} pueden ser iguales o diferentes. Desde el punto de vista de la producción, R^{10} es preferentemente un grupo etileno, un grupo propileno o un grupo butileno, y especialmente preferentemente un grupo propileno. n indica el número de las unidades recurrentes en el grupo de cadenas de oligómeros A, y es un número entero de 3 a 200. Teniendo en cuenta la productividad y las características fotocrómicas del compuesto fotocrómico, n es preferentemente de 3 a 170, especialmente preferible de 15 a 80.

En las fórmulas (5a) a (5d), la línea discontinua indica un enlace a la fracción de indenonaftopirano, y t indica el número de grupos de la cadena del oligómero A, y es un número entero de 1 a 10.

En el caso en que t es 1, R^{11} representa un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un átomo de hidrógeno, un grupo alquilo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, o un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo,

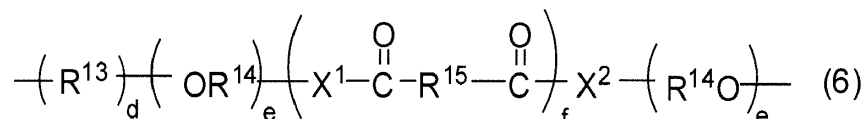
cuando t es 2, R^{11} es un enlace o un residuo orgánico divalente,

cuando t es de 3 a 10, R^{11} es un residuo orgánico que tiene la misma valencia que el número de t .

Naturalmente, el grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, como se describe en el presente documento, es preferentemente el mismo grupo que el "grupo alquenilo terminal" antes mencionado.

En la fórmula (5d), R^{12} representa un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, o un grupo arilo que tiene de 6 a 14 átomos de carbono, y cuando el compuesto tiene varios R^{12} en una molécula, los R^{12} pueden ser iguales o diferentes. Desde el punto de vista de la producción, R^{12} es preferentemente un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo propilo, un grupo butilo o un grupo fenilo.

En las fórmulas (5a) a (5d), L representa un grupo de enlace divalente, y un grupo representado por la siguiente fórmula (6):



se ejemplifica.

En la fórmula (6), R^{13} representa un grupo divalente, y es un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, un grupo arileno que tiene de 6 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, o un grupo heterocíclico que tiene de 3 a 12 átomos de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente.

- 5 R^{14} representa un grupo divalente, y es un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, o un grupo arileno que tiene de 6 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente.

- 10 R^{15} representa un grupo divalente, y es un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, o un grupo arileno que tiene de 6 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente. X^1 y X^2 representan cada uno un grupo divalente, y son independientemente un enlace directo, un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo (tio)amida o un grupo (tio)éster.

- 15 El sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo alquileo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o un grupo que tiene el grupo alquileo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

d representa un número entero de 0 a 50, e representa un número entero de 0 a 50, f representa un número entero de 0 a 50.

Cuando d es 2 o más, los R^{13} plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí,

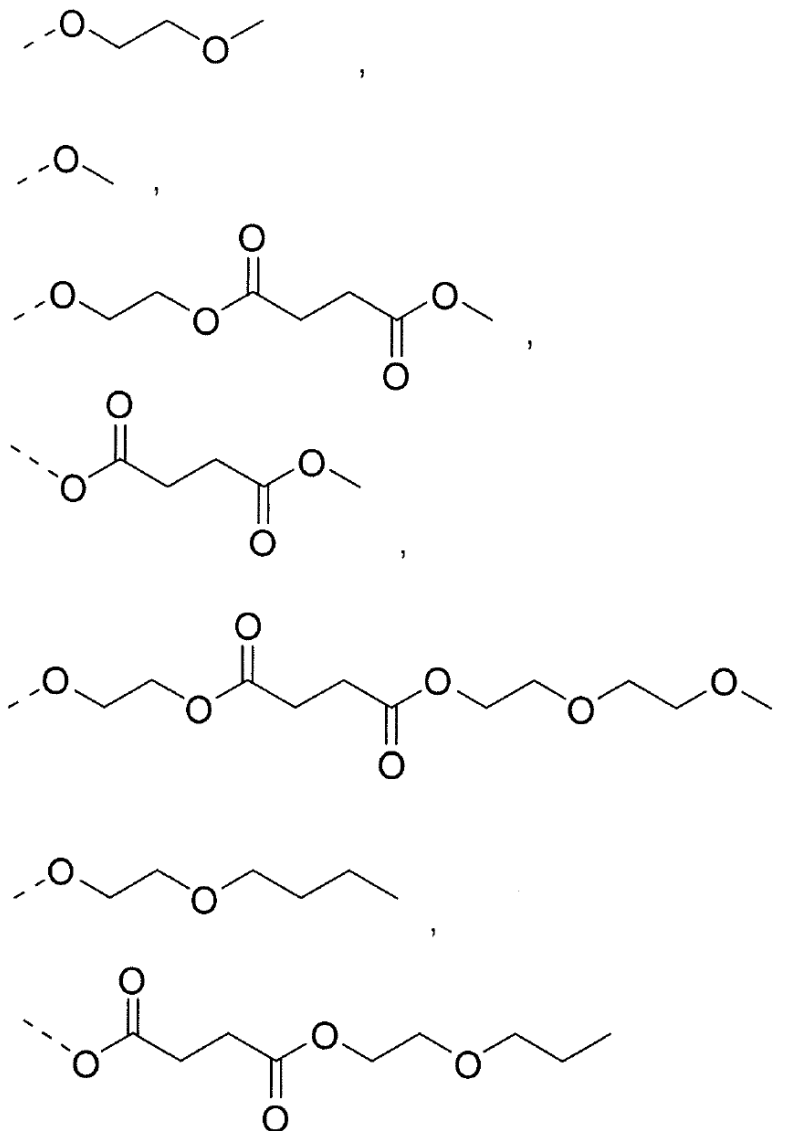
- 20 cuando e es 2 o más, los grupos divalentes plurales de la unidad de e pueden ser iguales o diferentes entre sí,

cuando f es 2 o más, los grupos divalentes plurales de la unidad de f pueden ser iguales o diferentes entre sí.

Las L plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí.

Como ejemplos especialmente preferidos para L, los grupos divalentes representados por las siguientes fórmulas

[Quím. 5]

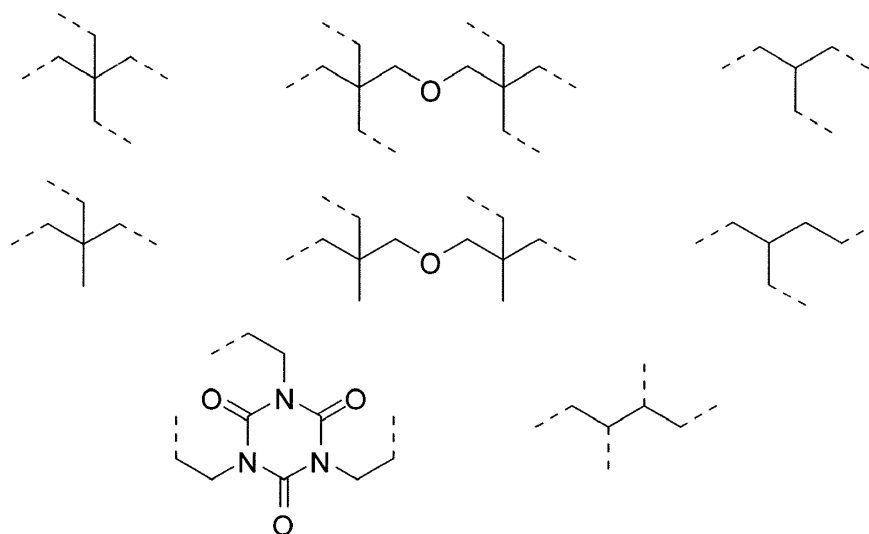


se ejemplifican.

En el grupo de cadenas de oligómeros A representado por las fórmulas anteriores (5a) a (5d), t corresponde al número de grupos de cadenas de oligómeros A. Cuando t es 1, es decir, cuando el número del grupo de cadenas de oligómeros A es 1, el grupo alquilo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono para R¹¹ es preferentemente un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo propilo, un grupo butilo, un grupo pentilo o un grupo hexilo. Cuando t es 1, también es preferible que el terminal de la cadena del oligómero sea un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, o un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

Cuando t es 2, R¹¹ puede ser un enlace. Concretamente, en el caso de que R¹¹ sea un enlace, la longitud de la cadena del oligómero es sustancialmente el doble, y la cadena tiene la fracción de indenonaftopirano en sus dos terminales.

Cuando t es de 3 a 10, R¹¹ es un residuo orgánico que tiene una valencia correspondiente al número de t, y en este caso, t es preferentemente de 3 a 6. En cuanto a los ejemplos preferidos, el residuo orgánico (R¹¹) es un residuo orgánico polivalente representado por cualquiera de las fórmulas siguientes



En los residuos orgánicos polivalentes, la línea discontinua indica un enlace a L.

- 5 Los ejemplos preferidos del grupo de cadenas de oligómeros A se han descrito anteriormente.

<Posición de sustitución preferida del grupo de cadenas de oligómeros A>

- 10 El compuesto fotocromático de la presente invención necesita tener al menos un grupo A de cadena de oligómero mencionado anteriormente en la molécula. Por consiguiente, en el grupo de R^1, R^2, R^3, R^4, R^5 y R^6 , el sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo de la cadena del oligómero. Sobre todo, el grupo A de la cadena del oligómero se sitúa preferentemente en la posición 3 (R^3 , y R^4), o en la posición 6 (R^1), o en la posición 7 (R^1), o en la posición 11 (R^2), o en la posición 13 (R^5 , y R^6) en la fracción de indenonaftopirano, con el fin de potenciar el efecto de la presente invención y mejorar la productividad del propio compuesto de cromeno.

El grupo A de la cadena del oligómero puede unirse directamente a la posición, o el grupo A de la cadena del oligómero puede introducirse como un sustituyente que tiene el grupo que se une a la posición.

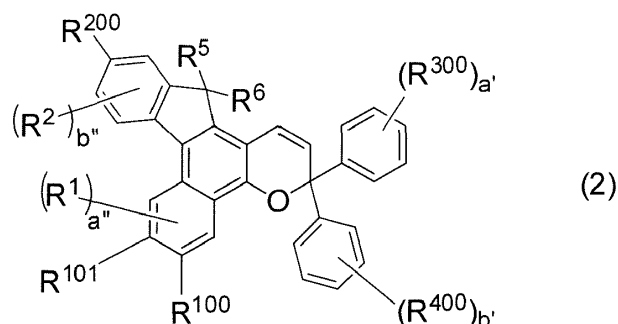
- 15 **<Posición de sustitución preferida del grupo alquénilo que tiene 10 a 30 átomos de carbono>**

- 20 El compuesto fotocromático de la presente invención debe tener al menos un grupo alquénilo mencionado anteriormente que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en la molécula. El grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono puede unirse directamente al grupo A de la cadena del oligómero como sustituyente (el terminal del grupo A de la cadena del oligómero se convierte en el grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono), o puede unirse a una posición de sustitución de la fracción de indenonaftopirano diferente del grupo A de la cadena del oligómero como sustituyente, o puede unirse a ambos. Sobre todo, teniendo en cuenta el efecto de la presente invención y la productividad del propio compuesto de cromeno, el grupo alquénilo se une preferentemente a la posición 3 (R^3 , y R^4), a la posición 6 (R^1), a la posición 7 (R^1), a la posición 11 (R^2), o a la posición 13 (R^5 , y R^6) como sustituyente.

- 25 El grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono puede unirse directamente a esa posición, o el grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono puede introducirse como un sustituyente que tiene el grupo que se une a esa posición. El sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o un grupo que tiene un grupo alquénilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo de tal manera que el número de los grupos alquénilo que tienen de 10 a 30 átomos de carbono en un grupo A de cadena de oligómero en una molécula es de 1 a 12.

- 30 **<Compuesto cromeno especialmente preferido>**

En la presente invención, se prefiere un compuesto de cromeno representado por la siguiente fórmula (2). Naturalmente, el compuesto de cromeno necesita tener al menos un grupo A de cadena de oligómero antes mencionado y el grupo de alquénilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en la molécula



En la fórmula:

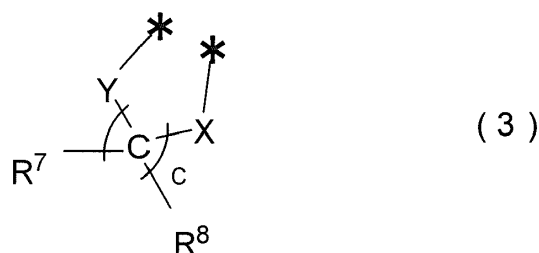
R^1, R^2, R^5 y R^6 tienen el mismo significado que los de la fórmula (1).

a'' representa un número entero de 0 a 2, y cuando a'' es 2, los R^1 plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí; b'' representa un número entero de 0 a 3, y cuando b'' es 2 o 3, los R^2 plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí.

< R^{100} , y R^{101} >

R^{100} y R^{101} son preferentemente los siguientes grupos entre los grupos descritos anteriormente en < R^1 , y R^2 >. Específicamente, los grupos incluyen el grupo de cadena de oligómeros A antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un átomo de halógeno, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo nitro, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo con 2 a 7 átomos de carbono, un grupo alcóxicarbonilo con 2 a 7 átomos de carbono, un grupo aralquilo con 7 a 11 átomos de carbono y opcionalmente con un sustituyente, un grupo aralcoxi con 7 a 11 átomos de carbono y opcionalmente con un sustituyente, un grupo ariloxi con 6 a 12 átomos de carbono y opcionalmente con un sustituyente, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y opcionalmente tenga un sustituyente, un grupo heteroarilo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono y opcionalmente tenga un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alcoxialquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono, un grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono y un grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono. Los ejemplos específicos de estos grupos son los mismos que los de los grupos descritos anteriormente en < R^1 , y R^2 >.

R^{100} y R^{101} pueden formar juntos un anillo representado por la siguiente fórmula (3):



donde c representa un número entero de 1 a 3.

En la fórmula, * indica el átomo de carbono de posición 6 o posición 7 de la fracción de indenonaftopirano.

< X , e Y >

En la fórmula, uno o ambos X e Y son un átomo de azufre, un grupo metileno, un átomo de oxígeno o un grupo representado por la siguiente fórmula (4)



En la fórmula, R^9 representa el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene el grupo alquenilo antes mencionado que

tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, o un grupo heteroarilo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente. Ejemplos específicos de estos grupos incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para $\langle R^1, \text{ y } R^2 \rangle$, y ejemplos preferidos de los mismos son también los mismos grupos.

$\langle R^7, \text{ y } R^8 \rangle$

Preferentemente, R^7 y R^8 representan cada uno de forma independiente el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo alqueno antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene el grupo alqueno antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un grupo alcoxycarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un átomo de halógeno, un grupo aralquilo que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alcoxialquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono, un grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono o un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente. Ejemplos específicos de estos grupos incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para $\langle R^1, \text{ y } R^2 \rangle$, y ejemplos preferidos de los mismos son también los mismos grupos.

R^7 y R^8 pueden formar, junto con el átomo de carbono al que se unen, un anillo alifático que tiene opcionalmente un sustituyente. Ejemplos específicos del anillo alifático incluyen un anillo de ciclopentano y un anillo de ciclohexano. El sustituyente que tiene el anillo alifático no está específicamente limitado, y preferentemente de 1 a 8 átomos de hidrógeno, especialmente preferentemente de 1 a 4 átomos de hidrógeno del grupo para formar el anillo están sustituidos con un sustituyente seleccionado entre el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alqueno antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene de 3 a 8 átomos, un grupo ciano, un grupo nitro y un átomo de halógeno. Ejemplos específicos de estos grupos incluyen los mismos grupos descritos anteriormente para $\langle R^1, \text{ y } R^2 \rangle$.

$\langle \text{Especialmente preferido } R^{100}, \text{ y } R^{101} \rangle$

Entre los grupos arriba mencionados, en consideración del tono de coloración y la densidad de coloración del compuesto fotocromático resultante, R^{100} y R^{101} son preferentemente cada uno el grupo A de cadena de oligómero arriba mencionado, el grupo alqueno arriba mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono un grupo que tiene el grupo alqueno antes mencionado con 10 a 30 átomos de carbono en el terminal, un átomo de hidrógeno, el grupo alquilo antes mencionado, el grupo alcoxi antes mencionado, el grupo heterocíclico antes mencionado, el grupo arilo antes mencionado o el grupo ariltio antes mencionado. Ejemplos específicos de estos grupos incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para $\langle R^1, \text{ y } R^2 \rangle$. Los grupos pueden formar un anillo representado por la fórmula (3). El sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo A de la cadena del oligómero o el grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono.

$\langle R^{200} \rangle$

R^{200} es preferentemente cualquiera de los siguientes grupos entre los grupos descritos anteriormente para $\langle R^1, \text{ y } R^2 \rangle$. Específicamente, el grupo incluye el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo alqueno antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene el grupo alqueno antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo un grupo alquilcarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un grupo alcoxycarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un átomo de halógeno, un grupo aralquilo que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alcoxialquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono, un grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono o un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente. Ejemplos específicos de estos grupos incluyen los mismos grupos descritos anteriormente para $\langle R^1, \text{ y } R^2 \rangle$, y ejemplos preferidos de los mismos son también los mismos grupos.

<Especialmente preferido R²⁰⁰>

Entre los grupos mencionados, en consideración del tono de coloración y de la densidad de coloración del compuesto fotocromico resultante, R²⁰⁰ es preferentemente el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un átomo de hidrógeno, el grupo alcoxi antes mencionado, el grupo heterocíclico antes mencionado o el grupo arilo antes mencionado. Ejemplos específicos de estos grupos incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para <R¹, y R²>, y ejemplos preferidos de los mismos son también los mismos grupos. El sustituyente del grupo que tiene un sustituyente puede ser el grupo A de la cadena del oligómero antes mencionado, o puede ser el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o un grupo que tiene el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

<R³⁰⁰ y R⁴⁰⁰>

Preferentemente, R³⁰⁰ y R⁴⁰⁰ son cada uno, de forma independiente, el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un átomo de halógeno, un grupo alquilio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo arilio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente. Ejemplos específicos de estos grupos incluyen los grupos específicamente ejemplificados anteriormente para <R¹, y R²>, y ejemplos preferidos de los mismos son también los mismos grupos.

a' representa el número de R³⁰⁰, y es un número entero de 0 a 5. Cuando a' es 2 o más, los R³⁰⁰ pueden ser iguales o diferentes entre sí.

b' representa el número de R⁴⁰⁰, y es un número entero de 0 a 5. Cuando b' es 2 o más, los R⁴⁰⁰ pueden ser iguales o diferentes entre sí.

<Especialmente preferidos R³⁰⁰ y R⁴⁰⁰>

Entre los grupos mencionados, en consideración del tono de coloración y la densidad de coloración del compuesto fotocromico resultante, y de la presencia o ausencia de nebulosidad del producto curado resultante, R³⁰⁰ y R⁴⁰⁰ son preferentemente cada uno el grupo A de cadena de oligómero antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, el grupo alquilo antes mencionado, el grupo alcoxi antes mencionado, el grupo amino sustituido antes mencionado, o el grupo heterocíclico antes mencionado. El sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo A de la cadena de oligómeros antes mencionado, el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, o un grupo que tiene el grupo alquenilo antes mencionado que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

<Posición de sustitución preferida del grupo A de cadena de oligómero>

Preferentemente, el grupo A de la cadena del oligómero se encuentra en la posición 3 (R³⁰⁰, o R⁴⁰⁰), en la posición 6 (R¹⁰⁰), en la posición 7 (R¹⁰¹), en la posición 11 (R²⁰⁰), o en la posición 13 (R⁵, o R⁶) del indenonaftopirano, desde el punto de vista de potenciar el efecto de la presente invención y la productividad del propio compuesto de cromeno. En el caso de que el grupo esté en la posición 3 (R³⁰⁰, o R⁴⁰⁰), preferentemente, el grupo fenilo que tiene R³⁰⁰, o el grupo fenilo que tiene R⁴⁰⁰ es un grupo fenilo que tiene el grupo A de la cadena del oligómero en la posición para, o un grupo fenilo que tiene "el grupo alquenilo terminal en la posición para".

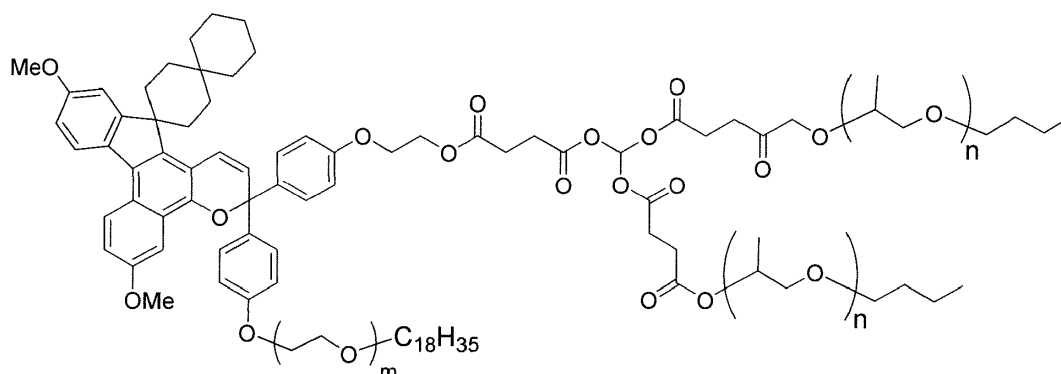
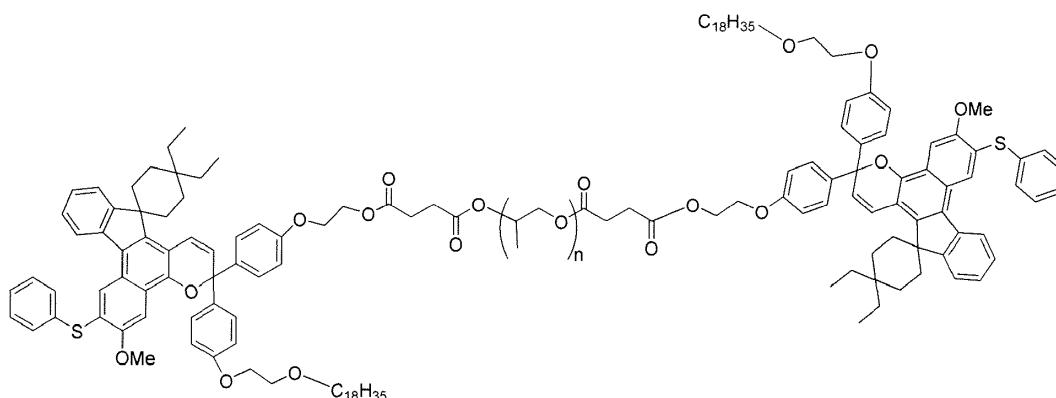
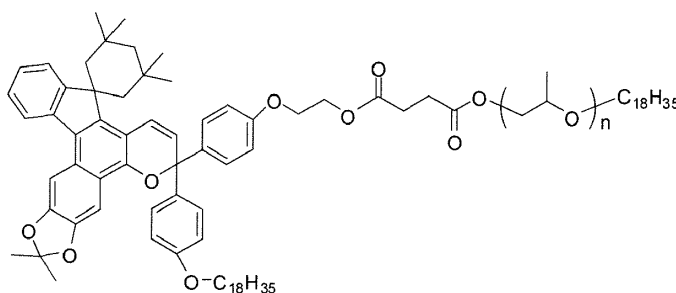
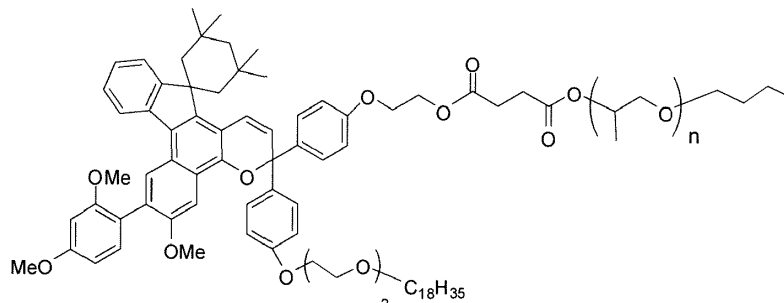
<Posición de sustitución preferida del grupo alquenilo que tiene 10 a 30 átomos de carbono>

Preferentemente, el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono se encuentra en la posición 3 (R³⁰⁰, o R⁴⁰⁰), en la posición 6 (R¹⁰⁰), en la posición 7 (R¹⁰¹), en la posición 11 (R²⁰⁰), o en la posición 13 (R⁵, o R⁶) del indenonaftopirano, desde el punto de vista de potenciar el efecto de la presente invención y la productividad del propio compuesto de cromeno. En el caso de que el grupo esté en la posición 3 (R³⁰⁰, o R⁴⁰⁰), preferentemente, el grupo fenilo que tiene R³⁰⁰, o el grupo fenilo que tiene R⁴⁰⁰ es un grupo fenilo que tiene el "grupo alquenilo terminal" en la posición para, o un grupo fenilo que tiene el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono. Desde el punto de vista de mejorar aún más el efecto de la presente invención y la productividad del propio compuesto de cromeno, preferentemente, el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o el grupo alquenilo terminal y el grupo A de la cadena del oligómero se encuentran en diferentes posiciones de sustitución en la fracción de indenonaftopirano.

<Ejemplos específicos de compuestos de cromo especialmente preferidos>

En la presente invención, específicamente, algunos compuestos de cromo especialmente preferidos se ejemplifican a continuación. Se prefieren los siguientes compuestos.

En las siguientes fórmulas, C₁₈H₃₅, que es un tipo de grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, representa un grupo oleilo



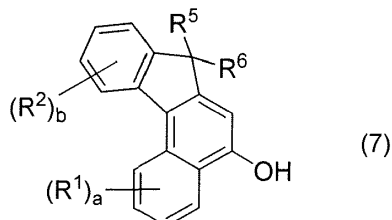
En las fórmulas mencionadas, n es preferentemente de 3 a 200, más preferentemente de 3 a 170, incluso más preferentemente de 15 a 80. En las fórmulas, m es preferentemente de 0 a 2.

<Procedimiento de producción del compuesto fotocromico de la invención>

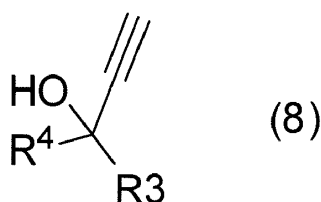
El compuesto fotocromico de la presente invención puede producirse mediante cualquier procedimiento de síntesis. A continuación se describen ejemplos típicos de un procedimiento de producción del compuesto cromo, pero el compuesto fotocromico de la presente invención no se limita a los producidos según el procedimiento. En la siguiente

descripción, los signos de las fórmulas tienen el mismo significado que los descritos para las fórmulas mencionadas anteriormente, a menos que se indique específicamente lo contrario.

Para producir el compuesto de cromeno, preferentemente, un compuesto de naftol representado por la siguiente fórmula (7):



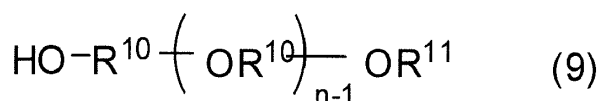
se hace reaccionar con un compuesto de alcohol propargílico representado por la siguiente fórmula (8):



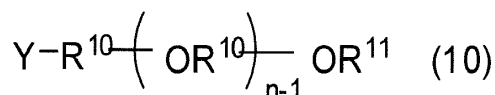
en presencia de un catalizador ácido para producir un compuesto de cromeno. La relación de reacción entre el compuesto de naftol y el compuesto de alcohol propargílico se selecciona preferentemente entre un intervalo de 1/10 a 10/1 (relación molar). El catalizador ácido a utilizar incluye el ácido sulfúrico, el ácido benzenosulfónico, el ácido p-toluenosulfónico y la alúmina ácida. El catalizador ácido se utiliza preferentemente en una cantidad comprendida entre 0,1 y 10 partes en peso respecto a 100 partes en peso de la suma total del compuesto de naftol y del compuesto de alcohol propargílico. La temperatura de reacción es preferentemente de 0 a 200°C. El disolvente es preferentemente un disolvente orgánico aprótico, y los ejemplos preferidos para su uso incluyen N-metilpirrolidona, dimetilformamida, tetrahidrofurano, benceno y tolueno. Un procedimiento de purificación para el producto obtenido según la reacción no está específicamente limitado. Por ejemplo, el producto puede purificarse mediante cromatografía en gel de sílice o recristalización.

A continuación se ejemplifica un ejemplo de producción de un compuesto de cromeno con un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialquileno A (por ejemplo, el grupo A de cadena de oligómero representado por la fórmula (5a) antes mencionada) introducido en él. En primer lugar, a continuación se ejemplifica un procedimiento de sustitución del compuesto de naftol representado por la fórmula (7) con un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialquileno.

En primer lugar, un éter monoalquílico de polialquilenglicol representado por la siguiente fórmula (9):



se convierte en un compuesto representado por la siguiente fórmula (10)

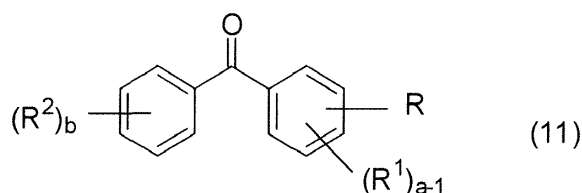


En la fórmula (10), Y representa un sustituyente altamente liberable, como un grupo tosilo o un átomo de halógeno.

Un procedimiento preferido para la conversión en un grupo tosilo incluye la reacción con cloruro de p-toluenosulfonilo en presencia de un catalizador básico como una amina terciaria, por ejemplo, trietilamina. Para el procedimiento de conversión en un átomo de yodo, un átomo de bromo o un átomo de cloro, se puede utilizar la reacción de Appel. En concreto, es preferible que el éter se haga reaccionar con tetracloruro de carbono, yodo, yoduro de metilo, hexahalogenilacetona o trifosgeno en presencia de trifenilfosfina.

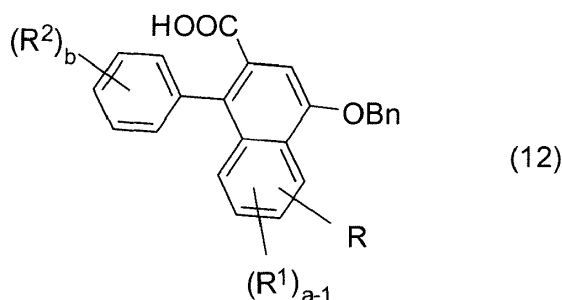
Posteriormente, un compuesto de benzofenona que tiene un grupo hidroxilo se hace reaccionar con el compuesto representado por la fórmula (10) en un disolvente aprótico polar como la dimetilformamida o el dimetilsulfóxido en

presencia de una base como el carbonato de potasio para dar un compuesto de benzofenona representado por la siguiente fórmula (11)



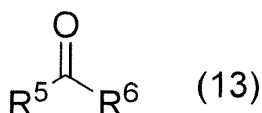
En la fórmula (11), R representa un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialquileno.

- 5 Posteriormente, según un procedimiento conocido, el compuesto de benzofenona de la fórmula (11) se convierte en un ácido carboxílico representado por la siguiente fórmula (12)

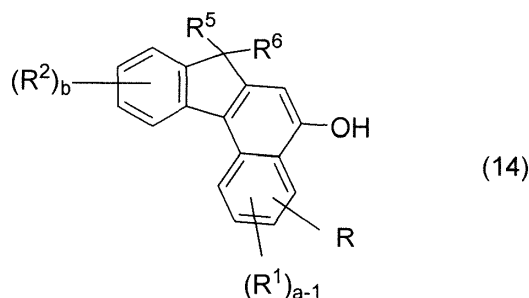


En la fórmula (12), Bn representa un grupo bencílico.

- 10 Ejemplos específicos del procedimiento conocido incluyen la reacción de Stobbe, la reacción de ciclación, la reacción de hidrólisis de ésteres utilizando un álcali o un ácido, la protección bencílica de un grupo hidroxilo y un ácido carboxílico, y la reacción de hidrólisis de ésteres bencílicos utilizando un álcali o un ácido. El ácido carboxílico representado por la fórmula (12) se convierte en una amina según un procedimiento de reordenamiento de Curtius, reordenamiento de Hofmann o reordenamiento de Lossen. Posteriormente, se prepara una sal de diazonio a partir de la amina resultante según un procedimiento conocido, y la sal de diazonio se convierte en un bromuro según la reacción de Sandmeyer.
- 15 El bromuro resultante se hace reaccionar con magnesio o litio para preparar un compuesto metálico orgánico. El compuesto metálico orgánico se hace reaccionar con una cetona representada por la siguiente fórmula (13):



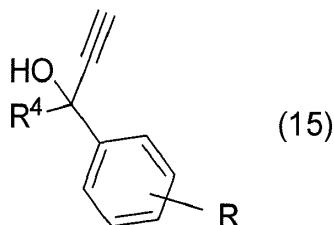
- 20 a -80 a 70°C durante 10 minutos a 4 horas en un disolvente orgánico para dar un compuesto de alcohol. El compuesto alcohólico resultante se somete a la reacción de Friedel-Crafts. A saber, bajo una condición neutra a ácida, el compuesto se hace reaccionar a 10 a 120°C durante 10 minutos a 2 horas para que la fracción de alcohol se convierta en una estructura espiro por reacción de sustitución nucleófila para sintetizar un compuesto de naftol representado por la siguiente fórmula (14)



- 25 En la reacción, la relación de reacción entre el compuesto orgánico metálico y la cetona representada por la fórmula (13) se selecciona preferentemente entre un intervalo de 1/10 a 10/1 (relación molar). La temperatura de reacción es preferentemente de -80 a 70°C. Como disolvente, se utiliza preferentemente un disolvente orgánico aprótico, cuyos ejemplos incluyen éter dietílico, tetrahidrofurano, benceno y tolueno. Preferentemente, la reacción de Friedel-Crafts se lleva a cabo utilizando, por ejemplo, un catalizador ácido como el ácido acético, el ácido clorhídrico, el ácido sulfúrico, el ácido bencenosulfónico, el ácido p-toluenosulfónico o la alúmina ácida. En la reacción se utiliza, por ejemplo, un
- 30 disolvente orgánico aprótico como el tetrahidrofurano, el benceno o el tolueno.

Haciendo reaccionar un compuesto de naftol representado por la fórmula (14) y un alcohol propargílico representado por la fórmula (8), se produce un compuesto fotocromático de la presente invención que tiene un grupo de cadena de óxido de polioialquileno introducido en la posición indeno o en la posición nafto (R^1 o R^2).

- 5 Como procedimiento para introducir un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialquileno en un alcohol propargílico representado por la fórmula (8), un alcohol propargílico representado por la siguiente fórmula (15):



- 10 se sintetiza a partir de un compuesto de benzofenona que tiene un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialquileno representado por la fórmula (11), y luego el compuesto resultante se hace reaccionar con un compuesto de naftol representado por la fórmula (7), tal como se sintetiza basándose en el procedimiento de reacción descrito en las publicaciones de patente de WO²⁰⁰¹/60881 y WO²⁰⁰⁵/028465, para dar un compuesto fotocromático de la presente invención que tiene la cadena de oligómero de óxido de polialquileno está sustituida como R^3 y R^4 .

- 15 Además del procedimiento en el que se introduce una cadena de oligómero en la etapa inicial en la síntesis mencionada (por ejemplo, se introduce una cadena de oligómero en un compuesto de naftol o un compuesto de benzofenona), se puede introducir una cadena de oligómero en una etapa final para dar un compuesto fotocromático de la presente invención. Específicamente, se produce un compuesto de cromeno que tiene un grupo funcional reactivo como un grupo hidroxilo, un grupo amino primario o secundario o un grupo tiol en la posición en la que se desea introducir una cadena de oligómero. Posteriormente, el compuesto resultante se hace reaccionar con un grupo de cadena de oligómero que tiene un sustituyente capaz de reaccionar con el grupo funcional (preferentemente, el sustituyente es un grupo para formar el grupo de enlace divalente L antes mencionado) para dar un compuesto fotocromático de la presente invención.

- 20 Por ejemplo, la mencionada L puede formarse por esterificación con un oligómero de óxido de polialquileno que tiene un grupo carboxi. Específicamente, en un disolvente como el tolueno, en presencia de un ácido mineral como el ácido sulfúrico o el ácido clorhídrico, un ácido orgánico como un ácido sulfónico aromático, o un ácido de Lewis como el éter fluorado de boro, y con agitación opcionalmente con calentamiento, la reacción puede llevarse a cabo mientras se elimina el agua formada. En la reacción de esterificación, el agua puede eliminarse por azeotropía, o utilizando un agente secante como el sulfato de magnesio anhidro o los tamices moleculares.

- 25 La L mencionada también puede formarse por esterificación con un oligómero de óxido de polialquileno que tiene un haluro de ácido carboxílico. Específicamente, se puede emplear un procedimiento en el que, en un disolvente de éter como el tetrahidrofurano en presencia de una base como la piridina o la dimetilanimina, y con agitación opcionalmente con calentamiento, se elimina el haluro de hidrógeno formado.

- 30 Un oligómero de óxido de polialquileno que tiene un grupo carboxi o un haluro de ácido carboxílico puede sintetizarse según un procedimiento conocido. Específicamente, un éter monoalquílico de óxido de polialquileno representado por la fórmula (9) antes mencionada puede hacerse reaccionar con un anhídrido de ácido cíclico, como el anhídrido succínico, en presencia de una base o un catalizador ácido para dar un éter monoalquílico de óxido de polialquileno que tiene un grupo carboxi. Un éter monoalquílico de óxido de polialquileno que tiene un átomo de halógeno de la fórmula (10) puede reaccionar con magnesio, litio o similares para preparar un compuesto metálico orgánico, que luego se hace reaccionar con dióxido de carbono para dar un monoéter de óxido de polialquileno que tiene un grupo carboxi. El monoéter de óxido de polialquileno resultante que tiene un grupo carboxi puede reaccionar con cloruro de tionilo o cloruro de oxalilo para dar un monoéter de óxido de polialquileno que tiene un haluro de ácido carboxílico.

- 35 En el presente documento se ha descrito un procedimiento para producir un compuesto fotocromático de la presente invención introduciendo un grupo de cadena de polialquilenglicol en una fracción de indenonaftopirano, y el mismo procedimiento puede emplearse para introducir cualquier otro grupo de cadena de oligómero. Específicamente, en lugar de un compuesto que tiene una cadena (grupo) de oligómero de polialquileno, se utiliza un compuesto que tiene una cadena (grupo) de oligómero de poliéster o una cadena (grupo) de poliéster poliéter y se procesa de la misma manera. Utilizando un compuesto de alcohol que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono (por ejemplo, un grupo oleilo), se puede introducir un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo (grupo alquenilo terminal) en una fracción de indenonaftopirano según el mismo procedimiento.

(Identificación del compuesto fotocromático)

- 40 El compuesto fotocromático de la presente invención existe generalmente como un sólido o un líquido viscoso a temperatura ambiente y bajo presión normal, y puede ser identificado de acuerdo con el siguiente procedimiento. En

concreto, según una técnica de separación como la cromatografía en capa fina, la cromatografía en columna de gel de sílice, la cromatografía líquida de alto rendimiento o la cromatografía de gases, se puede confirmar la ausencia de compuestos de la materia prima y de productos secundarios como las sustancias colorantes, excepto el compuesto fotocromático polimérico.

El compuesto fotocromático resultante puede analizarse mediante espectrometría de resonancia magnética nuclear de protones (^1H -RMN) para observar los picos basados en protones aromáticos y protones de alqueno en torno a δ : 5,0 a 9,0 ppm, y picos basados en protones del grupo alquilo y del grupo alquileo en torno a δ : 1,0 a 4,0 ppm. Comparando relativamente los datos de intensidad espectral individuales, se puede conocer el número de protones del grupo de unión. A partir de una composición fotocromática curable y de un producto curado de la composición curable, se puede extraer el compuesto cromeno y se puede identificar según el mismo procedimiento anterior.

El compuesto fotocromático de la presente invención se disuelve bien en un disolvente orgánico ordinario como tolueno, cloroformo o tetrahidrofurano. Cuando el compuesto fotocromático de la presente invención representado por la fórmula mencionada (1) se disuelve en un disolvente de este tipo, en general, la solución resultante es casi incolora y transparente, y cuando se irradia con luz solar o rayos UV, se colorea rápidamente y cuando se bloquea de la luz, se restablece rápidamente al estado incoloro original. Así, el compuesto fotocromático de la presente invención exhibe un buen rendimiento fotocromático.

<Procedimiento de utilización del compuesto fotocromático de la invención>

El compuesto fotocromático de la presente invención puede utilizarse ampliamente como material fotocromático (artículo óptico fotocromático), y por ejemplo, puede utilizarse como diversos materiales de memoria sustituibles por materiales fotosensibles de sal de plata, y también como otros diversos materiales de memoria, tales como materiales de copia, materiales fotosensibles de impresión, materiales de memoria para tubos de rayos catódicos, materiales fotosensibles de láser, y materiales fotosensibles de holografía. Además, el material fotocromático que utiliza el compuesto fotocromático de la presente invención también puede utilizarse como materiales de lentes fotocromáticas, materiales de filtros ópticos, materiales de visualización, actinómetros y artículos ópticos fotocromáticos para la decoración. Los artículos ópticos fotocromáticos pueden producirse, por ejemplo, como se describe a continuación, mediante la polimerización de una composición curable fotocromática que contenga un compuesto fotocromático y un compuesto polimerizable, o la superficie de un sustrato, como una lente de plástico, puede recubrirse con una película de polímero que contenga un compuesto fotocromático disperso en ella para producir un artículo óptico.

El compuesto fotocromático de la presente invención exhibe excelentes características fotocromáticas incluso en una matriz sólida polimérica, y por lo tanto puede utilizarse dispersándolo en una matriz sólida polimérica, o puede formarse en un artículo moldeado polimérico que contenga el compuesto fotocromático dispersado en él. Como procedimiento de dispersión, se puede emplear cualquier procedimiento conocido. Por ejemplo, en el presente documento se puede emplear un procedimiento para amasar por fusión el compuesto fotocromático de la presente invención con una resina termoplástica para hacer que el compuesto fotocromático se disperse en la resina, o un procedimiento para disolver el compuesto fotocromático polimérico de la presente invención en un compuesto polimerizable, añadiendo a continuación un catalizador de polimerización, y polimerizando el compuesto mediante calor o luz para hacer así el compuesto fotocromático disperso en la resina, o un procedimiento de teñir la superficie de una matriz sólida polimérica con el compuesto fotocromático polimérico de la presente invención para hacer así el compuesto fotocromático disperso en la resina.

Se describen ejemplos de la matriz sólida polimérica. Entre los ejemplos ópticamente preferidos de los mismos se encuentran los poliácrilatos, polimetacrilatos, poli(C1-C12) metacrilatos de alquilo, poli(metacrilatos de alquileo), poli(metacrilatos de fenol alcoxilados), acetatos de celulosa, triacetatos de celulosa, propionatos de acetato de celulosa, butiratos de acetato de celulosa, poli(acetatos de vinilo), poli(alcoholes de vinilo) poli(cloruros de vinilo), poli(cloruros de vinilideno), poli(vinilpirrolidonas), poli((me)acrilamidas), poli(dimetilacrilamidas), poli(hidroxietilmetacrilatos), poli((me)ácidos acrílicos), policarbonatos termoplásticos, poliésteres, poliuretanos, poli(tereftalatos de etileno), poliestirenos y poli(a-metilestirenos).

Por ejemplo, para su uso en lentes fotocromáticas, el procedimiento no está específicamente limitado en la medida en que las lentes resultantes puedan tener un rendimiento fotocromático uniforme, y los ejemplos del procedimiento incluyen un procedimiento de intercalar una película de polímero preparada mediante la dispersión uniforme del material fotocromático de la presente invención, entre las lentes; un procedimiento de dispersión del compuesto fotocromático de la presente invención en un compuesto polimerizable seguido de su polimerización según un procedimiento predeterminado; y un procedimiento de disolución del compuesto en, por ejemplo, un aceite de silicona, para luego infiltrarlo en la superficie de una lente a 150 a 200°C durante 10 a 60 minutos, y recubrir además la superficie con una sustancia curable para obtener una lente fotocromática. También se puede emplear un procedimiento para aplicar la película de polímero en la superficie de una lente y, a continuación, recubrir la superficie con una sustancia curable para obtener una lente fotocromática. Además, un agente de recubrimiento de una composición curable polimerizable que contiene el compuesto fotocromático de la presente invención puede aplicarse a la superficie de un sustrato de lente y la película de recubrimiento puede curarse. En ese momento, el sustrato de la lente puede ser tratado previamente en su superficie con una solución alcalina o tratado en su superficie con un tratamiento de plasma,

y además, en combinación con dicho tratamiento de superficie o sin él, se puede aplicar una imprimación al sustrato de la lente para mejorar la adhesividad entre el sustrato y la película de recubrimiento.

<Composición fotocromica curable>

En la presente invención, el compuesto fotocromico de la presente invención puede mezclarse con un compuesto polimerizable, y puede utilizarse la composición curable fotocromica resultante. El compuesto fotocromico de la presente invención puede utilizarse por separado, pero dependiendo del objeto que se pretenda, y por ejemplo, para obtener varios tonos de color requeridos para las lentes fotocromicas, el compuesto fotocromico de la presente invención puede combinarse con cualquier otro compuesto fotocromico. Como compuesto fotocromico a combinar, se puede utilizar cualquier compuesto fotocromico conocido sin limitación alguna. Ejemplos de ello son un compuesto de fulgida, un compuesto de fulgimida, un compuesto de espirooxazina y un compuesto de cromeno. Sobre todo, desde el punto de vista de mantener un tono de color uniforme en la coloración y decoloración para evitar el cambio de color en la coloración debido a la degradación del compuesto fotocromico, y además para controlar la coloración inicial, se prefiere especialmente un compuesto cromeno. También desde el punto de vista de la prevención del cambio de color del tono de color en la coloración y la decoración debido a la diferencia en la dependencia de la matriz, preferentemente, el otro compuesto fotocromico es también un compuesto fotocromico que tiene una cadena de oligómeros. Además, en el caso de utilizar un compuesto fotocromico que tiene una cadena de oligómeros, desde el punto de vista de evitar que el producto curado se enturbie, preferentemente, el compuesto fotocromico que tiene una cadena de oligómeros es un compuesto fotocromico que tiene al menos un grupo alqueno de 10 a 30 átomos de carbono. De manera especialmente preferente, se utilizan varios tipos del compuesto fotocromico de la presente invención para el control del tono de color.

En la composición fotocromica curable de la presente invención, la cantidad de mezcla del compuesto fotocromico no está específicamente limitada, y puede ser seleccionada apropiadamente en consideración de la intensidad de coloración del compuesto fotocromico y el espesor del producto fotocromico curado resultante. Específicamente, la cantidad del compuesto fotocromico que contiene un compuesto fotocromico de la presente invención es preferentemente de 0,001 a 10 partes en masa en relación con 100 partes en masa del compuesto polimerizable.

En la presente invención, la intensidad de la coloración del producto fotocromico curado depende del espesor del producto curado, y por lo tanto es importante considerar el espesor del producto. Esto se describe en detalle más adelante. Por ejemplo, en el caso de formar una película delgada que tiene un espesor de 100 μm o menos utilizando una composición fotocromica curable de la presente invención, preferentemente, el compuesto fotocromico que contiene un compuesto fotocromico polimérico de la presente invención se utiliza en una cantidad de 0,001 a 10 partes en masa en relación con 100 partes en masa del compuesto polimerizable para controlar el tono de color. En el caso de que se forme un producto fotocromico curado que tiene un grosor de 1 mm o más, preferentemente, el compuesto fotocromico que contiene un compuesto fotocromico polimérico de la presente invención se utiliza en una cantidad de 0,001 a 1 parte en masa en relación con 100 partes en masa del compuesto polimerizable para el control del tono de color.

<Compuesto polimerizable>

En la presente invención, como compuesto polimerizable, se puede utilizar cualquier compuesto conocido sin ninguna limitación, y los ejemplos del mismo incluyen un compuesto radical-polimerizable como un compuesto de (met)acrilato, un compuesto catiónico-polimerizable como un compuesto epoxi y un compuesto oxetano, y un compuesto polimerizable como un compuesto isocianato y un compuesto alcohol.

<Compuesto de iso(tio)cianato>

Se utiliza preferentemente una composición que contiene un compuesto de iso(tio)cianato y un compuesto activo que contiene hidrógeno. Un compuesto de iso(tio) cianato indica un compuesto que tiene un grupo isocianato o un grupo isotiocianato, y también puede ser un compuesto que tiene tanto un grupo isocianato como un grupo isotiocianato.

Cualquier compuesto de iso(tio)cianato conocido es utilizable sin ninguna limitación específica, pero se prefiere un compuesto de iso(tio)cianato que contenga un grupo poliisocianato que tiene un grupo poliiso(tio)cianato con 2 o más grupos iso(tio)cianato en una molécula. Se prefiere especialmente un compuesto de poliiso(tio)cianato que tiene un anillo aromático, como el diisocianato de m-xileno y el diisocianato de 4,4'-difenilmetano, y un compuesto de poliiso(tio)cianato alifático, como el diisocianato de norbornano y el diisocianato de dicitlohexilmetano-4,4'-.

<Compuesto activo que contiene hidrógeno>

Se puede utilizar cualquier compuesto activo que contenga hidrógeno sin ninguna limitación específica, pero se prefiere un compuesto que tiene un grupo hidroxil y/o un grupo tiol. En particular, se prefiere un compuesto polifuncional que tiene 2 o más hidrógenos activos en una molécula. Ejemplos específicos del compuesto activo que contiene hidrógeno incluyen un compuesto tiol polifuncional como el tetrakis(3-mercaptopropionato) de pentaeritritol y el 4-mercaptopetil-3,6-ditio-octaneditiol, y un alcohol polifuncional como el trimetilolpropano y el pentaeritritol. Preferentemente, la composición contiene cualquiera de ellos.

<Combinación preferida de compuestos polimerizables>

Entre el compuesto de iso(tio)cianato antes mencionado y el compuesto activo que contiene hidrógeno antes mencionado, la siguiente combinación puede dar una composición curable fotocrómica capaz de suprimir el enturbiamiento del producto curado fotocrómico resultante y capaz de mostrar mejores características fotocrómicas.

5 Específicamente,

se prefiere una composición curable fotocrómica, en la que:

el compuesto polimerizable contiene:

(A) un compuesto de poliiso(tio)cianato que tiene 2 o más grupos iso(tio)cianato en la molécula (en lo sucesivo puede denominarse simplemente "componente (A)"),

10 (B) un compuesto polifuncional que tiene 2 o más hidrógenos activos en una molécula (en lo sucesivo puede denominarse simplemente "componente (B)"), y

(C) un compuesto monofuncional que tiene un hidrógeno activo en una molécula (en lo sucesivo puede denominarse simplemente "componente (C)"), y en el que:

15 la cantidad del componente (C) es de 1 a 2000 mol por mol del grupo de cadenas de oligómeros A en el compuesto fotocrómico.

<(A) Compuesto de poliiso(tio)cianato>

El compuesto de poliiso(tio)cianato (A) para constituir la composición curable fotocrómica de la presente invención es un compuesto que tiene 2 o más grupos de iso(tio)cianato en la molécula. En la presente invención, un grupo iso(tio)cianato indica un grupo isocianato o un grupo isotiocianato. "Tener 2 o más grupos iso(tio)cianato en la molécula" significa que el compuesto tiene 2 o más grupos isocianato en la molécula, o tiene 2 o más grupos isotiocianato en la molécula, o el número total de los grupos isocianato y los grupos isotiocianato en la molécula es 2 o más.

En el componente (A), el número de los grupos iso(tio)cianato no está específicamente limitado, siempre que el número sea 2 o más. Sobre todo, desde el punto de vista del fácil control de la polimerización, el número es preferentemente de 2 a 6, más preferentemente de 2 a 4, incluso más preferentemente de 2.

Del compuesto de poliiso(tio)cianato, el compuesto de poliisocianato (compuesto que tiene 2 o más grupos isocianato en la molécula) incluye un compuesto de isocianato alifático, un compuesto de isocianato alicíclico, un compuesto de isocianato aromático, un compuesto de isocianato alifático que contiene azufre un compuesto de isocianato a base de sulfuro alifático, un compuesto de isocianato a base de sulfuro aromático, un compuesto de isocianato a base de sulfona alifática, un compuesto de isocianato a base de sulfona aromática, un compuesto de isocianato a base de sulfonato, un compuesto de isocianato a base de sulfonamida aromática y un compuesto de isocianato heterocíclico que contiene azufre.

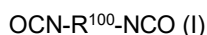
<Compuesto de poliisocianato preferido (A)>

Entre los compuestos de poliisocianato mencionados anteriormente, un compuesto favorable para formar artículos ópticos excelentes en transparencia y resistencia mecánica, especialmente un compuesto favorable para formar artículos ópticos que contengan un compuesto fotocrómico, incluye los siguientes compuestos.

Los ejemplos preferidos del compuesto de poliisocianato (A) incluyen los compuestos representados por las siguientes fórmulas (I) a (VIII).

<Compuesto de poliisocianato con cadena de alquileo>

40 Se utiliza preferentemente un compuesto representado por la siguiente fórmula (I).



En la fórmula:

R^{100} representa un grupo alquileo que tiene de 1 a 10 átomos de carbono, y una parte de los grupos metileno en la cadena del grupo alquileo puede estar sustituida con un átomo de azufre.

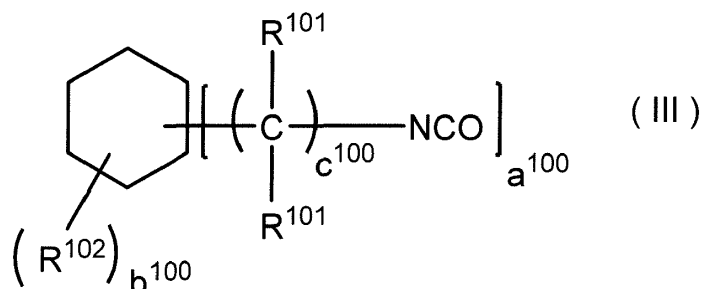
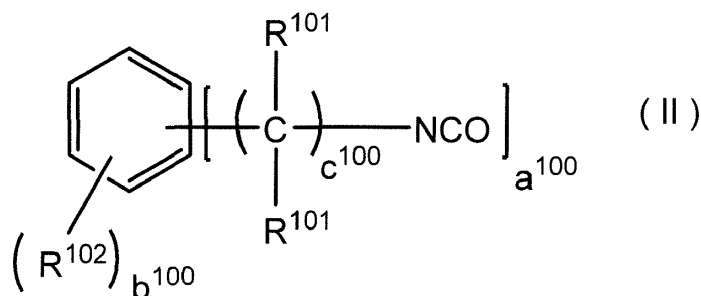
45 R^{100} es un grupo alquileo que tiene de 1 a 10 átomos de carbono, y puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, se prefiere un grupo lineal como un grupo pentametileno, un grupo hexametileno, un grupo heptametileno o un grupo octametileno, o un grupo ramificado en el que una parte del átomo de hidrógeno de un grupo pentametileno, un grupo hexametileno, un grupo heptametileno o un grupo octametileno está sustituido por un grupo metilo. Como grupo

alquileo en el que una parte del grupo metileno está sustituido con un átomo de azufre, se prefiere un grupo de -CH₂ CH₂ SCH₂ CH₂ CH₂ -.

5 Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (I) incluyen el diisocianato de pentametileno, el diisocianato de hexametileno, el diisocianato de heptametileno, el diisocianato de octametileno y el diisocianato de 2,4,4-trimetilhexametileno 1,2-bis(2-isocianatoetil)etano. Se puede utilizar uno solo o dos o más tipos de estos compuestos.

<Compuesto de poliisocianato que tiene grupo fenilo o grupo ciclohexano (anillo)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (II) o la siguiente fórmula (III)



En las fórmulas:

R¹⁰¹ representa cada uno un grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, o un átomo de hidrógeno, y puede ser el mismo grupo o un grupo diferente,

R¹⁰² representa un grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, y los grupos plurales, si los hay, pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes.

a¹⁰⁰ representa un número entero de 2 o 3, b¹⁰⁰ representa un número entero de 0 a 4, c¹⁰⁰ representa un número entero de 0 a 4.

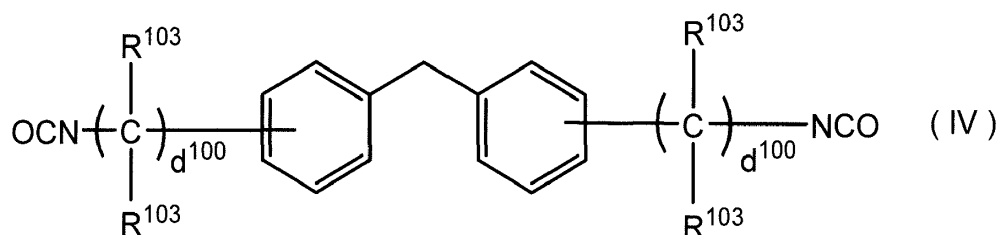
La diferencia entre el compuesto representado por la fórmula (II) y el compuesto representado por la fórmula (III) es que el primero es un compuesto que tiene un grupo fenilo (compuesto representado por la fórmula (II)) y el segundo es un compuesto que tiene un grupo (anillo) ciclohexano (compuesto representado por la fórmula (III)).

El grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono para R¹⁰¹ puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R¹⁰¹ es especialmente preferible un átomo de hidrógeno, un grupo metilo o un grupo etilo. El grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono para R¹⁰² puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R¹⁰² es especialmente preferible un grupo metilo o un grupo etilo.

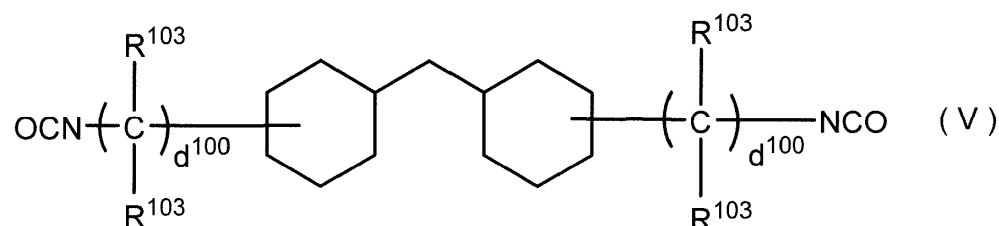
Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (II) o la fórmula (III) incluyen el diisocianato de isoforona, el diisocianato de xileno (o-, m-, p-), el diisocianato de 2,4-tolileno y el diisocianato de 2,6-tolileno. Se puede utilizar uno solo o dos o más tipos de estos compuestos.

<Compuesto de poliisocianato que tiene dos grupos fenilo o dos grupos ciclohexano (anillos)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (IV) o fórmula (V)



[0204]



[0205]

En las fórmulas:

- 5 R^{103} representa cada uno un grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, o un átomo de hidrógeno, y estos pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes, y d^{100} representa un número entero de 0 a 4.

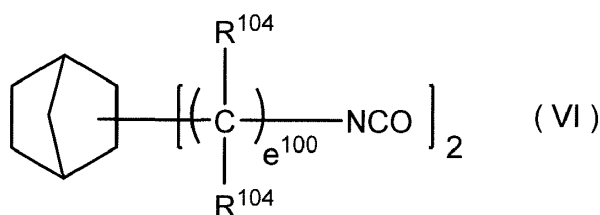
La diferencia entre el compuesto representado por la fórmula (IV) y el compuesto representado por la fórmula (V) es que el primero es un compuesto que tiene dos grupos fenilo (compuesto representado por la fórmula (IV)) y el segundo es un compuesto que tiene dos grupos (anillos) de ciclohexano (compuesto representado por la fórmula (V)).

- 10 El grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono para R^{103} puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{103} es especialmente preferible un átomo de hidrógeno, un grupo metilo o un grupo etilo.

Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (IV) o la fórmula (V) incluyen el diisocianato de 4,4'-difenilmetano y el dicitclohexilmetano-4,4'-diisocianato. Se puede utilizar uno solo o dos o más tipos de estos compuestos.

<Compuesto de poliisocianato que tiene anillo de norbornano>

- 15 El compuesto está representado por la siguiente fórmula (VI)



En la fórmula:

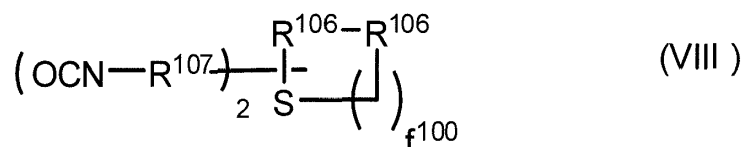
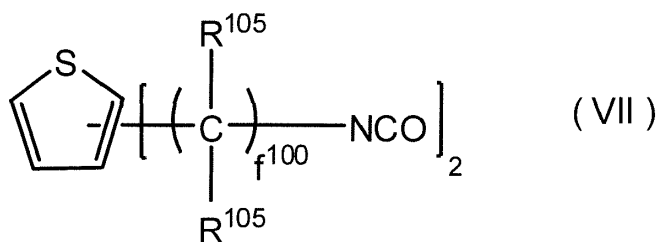
R^{104} representa cada uno un grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, o un átomo de hidrógeno, y estos pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes, y e^{100} representa un número entero de 0 a 4.

- 20 El grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono para R^{104} puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{104} es especialmente preferible un átomo de hidrógeno, un grupo metilo o un grupo etilo.

Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (VI) incluyen el diisocianato de norbornano, el 2,5-bis(isocianatometil)-biciclo[2,2,1]-heptano y el 2,6-bis(isocianatometil)-biciclo[2,2,1]-heptano. Se puede utilizar uno solo o dos o más tipos de estos compuestos.

- 25 **<Compuesto de poliisocianato que tiene un anillo de tiofeno o un anillo hetero que contiene azufre>**

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (VII) o (VIII)



En las fórmulas:

5 R^{105} representa cada uno un grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, o un átomo de hidrógeno, y pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes,

R^{106} representa un grupo metileno, o un átomo de azufre, R^{107} representa un grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo del grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte del átomo de carbono en la cadena del grupo alquileo es un enlace -S-, y f^{100} representa un número entero de 0 a 2.

10 Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (VII) o la fórmula (VIII) incluyen el 2,5-bis(isocianatometil)tiofeno, el 2,5-bis(isocianatometil)-1,4-ditiano, el 3,4-bis(isocianatometil)tetrahidrotiofeno y el 4,5-bis(isocianatometil)-1,3-ditiolano. Se puede utilizar uno solo o dos o más tipos de estos compuestos.

Además, se puede utilizar un producto de sustitución halógena, un producto de sustitución alquímica, un producto de sustitución alcoxi o un producto de sustitución nitro del poliisocianato, así como un producto de modificación de tipo prepolímero con un polialcohol, un producto de modificación de carbodiimida, un producto de modificación de urea, un producto de modificación de biuret o un producto de reacción de dimerización o trimerización del mismo.

<Compuesto preferido de poliiso(tio)cianato (A) (compuesto que tiene 2 o más grupos isotiocianato en la molécula)>

20 El compuesto de poliisocianato incluye los compuestos de poliisocianato representados por las fórmulas (I) a (VIII) en las que el grupo isocianato se sustituye por un grupo isotiocianato. Más específicamente, el compuesto de polisotiocianato incluye un compuesto de isotiocianato alifático, un compuesto de isotiocianato alicíclico, un compuesto de isotiocianato aromático, un compuesto de isotiocianato que contiene un heteroanillo, un compuesto de isotiocianato alifático que contiene azufre, un compuesto de isotiocianato aromático que contiene azufre y un compuesto de isotiocianato heterocíclico que contiene azufre.

25 Los ejemplos preferidos del compuesto de poliisocianato que tiene una cadena de alquileo incluyen el diisotiocianato de hexametileno, el 1,2-isotiocianatoetano, el 1,3-isotiocianatopropano, el 1,4-isotiocianatobutano, el 1,6-diisotiocianatohexano, diisotiocianato de 2,4,4-trimetilhexano-metileno, tiobis(3-isotiocianatopropano), tiobis(2-isotiocianatoetano) y ditiobis(2-isotiocianatoetano).

30 Los ejemplos preferidos del compuesto de poliisocianato que tiene un grupo fenilo o un grupo ciclohexano (anillo) incluyen el p-fenilendiisopropilideno diisotiocianato, el 1,2-isotiocianatobenceno, el 1,3-isotiocianatobenceno, el 1,4-isotiocianatobenceno, el 2,4-isotiocianatotolueno, diisotiocianato de isoforona, diisotiocianato de xileno (o-, m-, p-), diisotiocianato de 2,4-tolileno, diisotiocianato de 2,6-tolileno y diisotiocianato de ciclohexano.

Entre los ejemplos preferidos del compuesto de poliisocianato que tiene dos grupos fenilo o dos grupos ciclohexano (anillos) se incluyen el 1,1'-metilenobis(4-isotiocianatobenceno), el 1,1'-metilenobis(4-isotiocianato-2-metilbenceno) y el 1,1'-metilenobis(4-isotiocianato-3-metilbenceno).

Los ejemplos preferidos del compuesto de poliisocianato que tiene un anillo de norbornano incluyen el 2,4-bis(isotiocianatometil)norbornano, el 2,5-bis(isotiocianatometil)norbornano, el 2,6-bis(isotiocianatometil)norbornano, el 3,5-bis(isotiocianatometil)norbornano y el diisotiocianato de norbornano.

40 Entre los ejemplos preferidos del compuesto de poliisocianato que tiene un anillo de tiofeno o un heteroanillo que contiene azufre se encuentran el tiofeno-2,5-diisocianato, el 1,4-ditiano-2,5-diisocianato, el 2,5-bis(isotiocianatometil)-1,4-ditiano y el 4,5-bis(isotiocianatometil)-1,3-ditiolano.

<Componente (A); compuesto de poliisocianato que tiene grupo isocianato y grupo isotiocianato>

En la presente invención, el compuesto que tiene tanto un grupo isocianato como un grupo isotiocianato como componente (A) incluye los siguientes compuestos. Los ejemplos del compuesto incluyen los compuestos de poliisocianato ejemplificados anteriormente, en los que al menos un grupo isocianato es un grupo isotiocianato. Los ejemplos de los mismos también incluyen los compuestos de poliisotiocianato ejemplificados anteriormente, en los que al menos un grupo de isotiocianato es un grupo de isocianato.

<Ejemplos preferidos del componente (A)>

Ejemplos preferidos del compuesto de poliiso(tio)cianato del componente (A) incluyen diisocianato de pentametileno, diisocianato de hexametileno, diisocianato de heptametileno, diisocianato de octametileno, diisocianato de isoforona, diisocianato de norbornano, 2,5-bis(isocianatometil)-biciclo[2,2,1]-heptano, 2,6-bis(isocianatometil)-biciclo[2,2,1]-heptano, 1,2-bis(2-isocianatoetil)etano, diisocianato de xileno (o-, m-, p-), diisocianato de 2,4-tolileno, diisocianato de 2,6-tolileno y diisocianato de 4,4'-difenilmetano. Se puede utilizar uno solo o una mezcla de ellos.

A continuación, se describe el compuesto polifuncional (B) que tiene 2 o más hidrógenos activos en una molécula.

<Compuesto polifuncional (B) que tiene 2 o más hidrógenos activos en una molécula>

El compuesto polifuncional que tiene 2 o más hidrógenos activos en una molécula que constituye la composición curable fotocromática de la presente invención es preferentemente un compuesto que tiene 2 o más grupos hidroxilo (grupos OH) o grupos tiol (grupos SH) en el compuesto. El uso de un compuesto con grupos hidroxilo o grupos tiol facilita el control de la polimerización.

Entre los compuestos polifuncionales, el compuesto que tiene 2 o más grupos hidroxilo o grupos tiol puede denominarse simplemente "compuesto poli(tio)ol (B)". En cuanto al compuesto poli(tio)ol (B), el compuesto que tiene 2 o más hidrógenos activos (grupos activos que contienen hidrógeno) en la molécula indica un compuesto que tiene 2 o más grupos hidroxilo en la molécula o que tiene 2 o más grupos tiol en la molécula, o indica un compuesto en el que el número total del grupo hidroxilo y del grupo tiol en la molécula es 2 o más. En el componente (B), el número de los hidrógenos activos (grupos que contienen hidrógeno activo) no está específicamente limitado en la medida en que sea 2 o más. Sobre todo, desde el punto de vista de la facilidad en el control de la polimerización, el número es preferentemente de 2 a 6, más preferentemente de 2 a 4, incluso más preferentemente de 2.

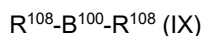
Específicamente, el compuesto de poli(tio)ol (B) incluye un compuesto de poli(tio)ol alifático y un compuesto de poli(tio)ol aromático. Más concretamente, se mencionan los siguientes compuestos.

<Componente (B); compuesto polifuncional preferido de compuesto poli(tio)ol >

Entre los compuestos de poli(tio)ol (B) mencionados anteriormente, los compuestos preferidos para formar artículos ópticos excelentes en transparencia y resistencia mecánica, especialmente los compuestos adecuados para producir artículos ópticos que contengan un compuesto fotocromático, incluyen los siguientes compuestos. En concreto, se mencionan los compuestos representados por las siguientes fórmulas (IX) a (XI), (XIII) a (XV) y (XVII) a (XXII).

(Componente (B); compuesto de poli(tio)ol que tiene cadena de alquileo o similar)

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (IX).



En la fórmula:

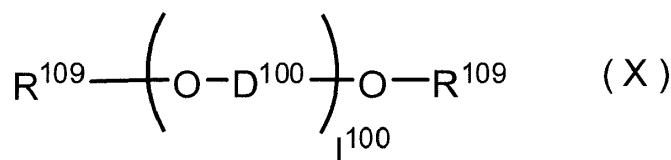
B^{100} representa un grupo alquileo que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, o un grupo alqueniolo,

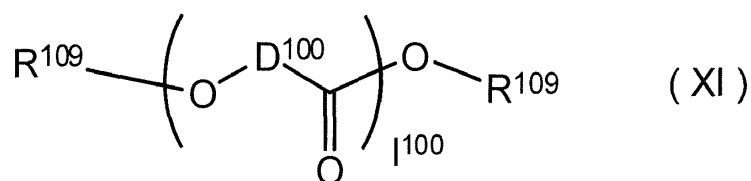
R^{108} representa cada uno un grupo hidroxilo o un grupo SH, pudiendo ser los mismos grupos o grupos diferentes.

B^{100} es un grupo alquileo que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, o un grupo alqueniolo, y puede ser un grupo lineal o ramificado. Preferentemente, el grupo es un grupo alquileo lineal que tiene de 2 a 15 átomos de carbono. Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (IX) incluyen el polietileno poliol (número de carbono, 2 a 15), el 1,10-decano-ditiol y el 1,8-octano-ditiol.

<Componente (B); compuesto polifuncional que tiene 2 o más enlaces éter o enlaces éster>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (X) o fórmula (XI)

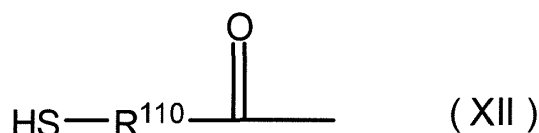




En las fórmulas:

D^{100} representa un grupo alquileo que tiene de 2 a 15 átomos de carbono, o un grupo alqueniilo,

R^{109} representa cada uno un átomo de hidrógeno, o un grupo representado por la siguiente fórmula (XII)



en el que R^{110} representa un grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono,

y estos grupos pueden ser los mismos o diferentes,

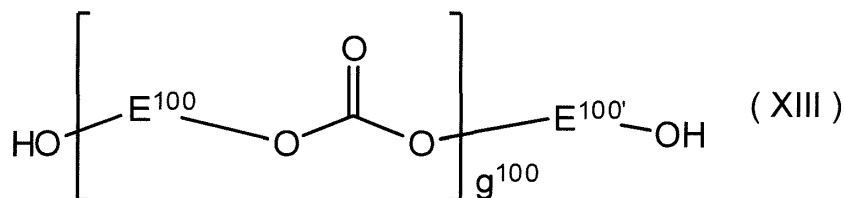
l^{100} representa un número entero de 1 a 100 como valor promedio.

D^{100} representa un grupo alquileo que tiene de 2 a 15 átomos de carbono, o un grupo alqueniilo, y puede ser un grupo lineal o ramificado. Preferentemente, el grupo es un grupo alquileo lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono. R^{110} representa un grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, y puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{110} es especialmente preferible un grupo metileno, un grupo etileno, un grupo trimetileno o un grupo propileno.

Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (X) o del compuesto representado por la fórmula (XI) incluyen polietilenglicol ($1 = 1$ a 100), policaprolactona polioli ($1 = 1$ a 100), bis(3-mercaptopropionato) de tetraetilenglicol, bis(3-mercaptopropionato) de 1,4-butanodiol y bis(3-mercaptopropionato) de 1,6-hexanodiol.

<Componente (B); compuesto de policarbonato preferido (compuesto polifuncional)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (XIII)



En la fórmula:

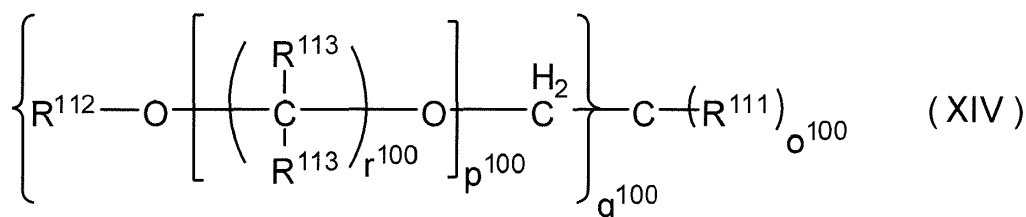
E^{100} y $\text{E}^{100'}$ representan cada uno un grupo alquileo que tiene de 2 a 15 átomos de carbono, y pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes,

g^{100} representa un número de 1 a 20 como valor promedio.

E^{100} y $\text{E}^{100'}$ son cada uno un grupo alquileo que tiene de 2 a 15 átomos de carbono, y puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, E^{100} y $\text{E}^{100'}$ son especialmente preferibles un grupo trimetileno, un grupo tetrametileno, un grupo pentametileno, un grupo hexametileno, un grupo octametileno, un grupo nonametileno, un grupo dodecametileno, un grupo pentadecametileno, un grupo 1-metiltrieterileno, un grupo 1-etiltrieterileno o un grupo 1-isopropiltrieterileno. Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XIII) incluyen el polioli de policarbonato (E^{100} y $\text{E}^{100'}$ son cada uno un grupo pentametileno o un grupo hexametileno, y $g^{100} = 4$ a 10).

<Componente (B); compuesto de polioli polifuncional (compuesto polifuncional)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (XIV)



En la fórmula:

R^{111} representa un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, y los grupos plurales, si los hay, pueden ser iguales o diferentes,

5 R^{112} representa un átomo de hidrógeno o es el mismo que en la fórmula (XII), y estos pueden ser iguales o diferentes,

R^{113} representa cada uno un átomo de hidrógeno, un grupo metilo, un grupo etilo, o un átomo de hidrógeno, pudiendo ser el mismo grupo o diferentes,

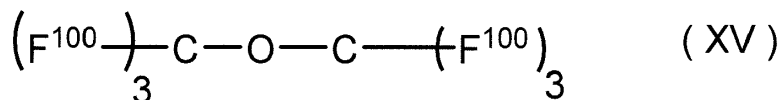
10 o^{100} representa de 0 a 2, q^{100} representa de 2 a 4, $o^{100}+q^{100}$ es 4, p^{100} representa de 0 a 10, r^{100} representa de 1 a 6.

R^{111} representa un grupo alquilo que tiene de 2 a 15 átomos de carbono, y puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{111} es especialmente preferible un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo trimetilo o un grupo propilo.

15 Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XIV) incluyen el éter de trimetilolpropano tripolioxietileno (TMP-30 de Nippon Nyukazai Co., Ltd.), el trimetilolpropano, el pentaeritritol, el tris(3-mercaptopropionato) de trimetilolpropano y el tetrakis(3-mercaptopropionato) de pentaeritritol.

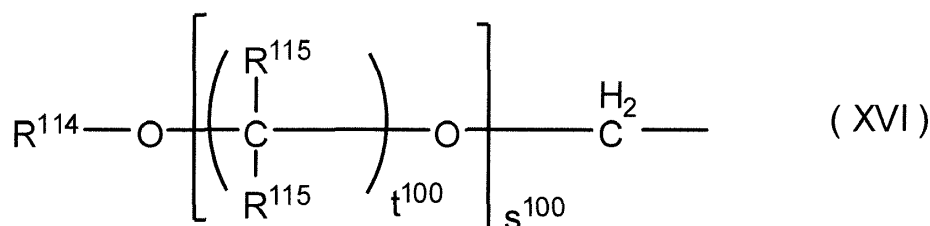
<Componente (B); compuesto de poliol que tiene enlace éter (compuesto polifuncional)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (XV)



En la fórmula:

20 F^{100} representa cada uno un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o la siguiente fórmula (XVI):



en el que,

R^{114} representa un átomo de hidrógeno, o un grupo con el mismo significado que en la fórmula (XII), pudiendo ser el mismo grupo o un grupo diferente,

25 R^{115} representa cada uno un grupo metilo, un grupo etilo o un átomo de hidrógeno, pudiendo ser el mismo grupo o un grupo diferente,

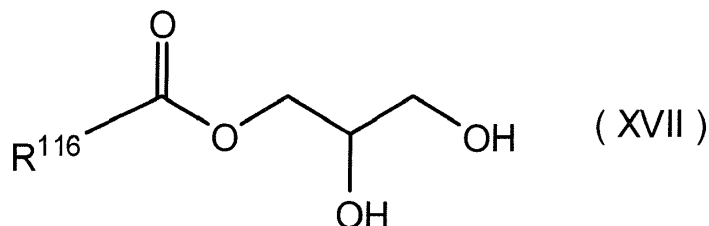
s^{100} representa de 0 a 10, t^{100} representa de 1 a 6,

siempre que al menos dos de los F^{100} sean un grupo representado por la fórmula (XVI).

30 Al menos dos de los F^{100} son un grupo representado por la fórmula (XVI). Los ejemplos de los otros grupos incluyen un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, y puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, F^{100} es especialmente preferible un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo trimetilo o un grupo propilo. Dos o más F^{100} pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes siempre que sean un grupo representado por la fórmula (XVI). Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XV) incluyen el ditrimetilolpropano, y el hexakis(3-mercaptopropionato) de dipentaeritritol.

<Componente (B); compuesto de poliol que tiene dos grupos hidroxil (compuesto polifuncional)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (XVII)



En la fórmula:

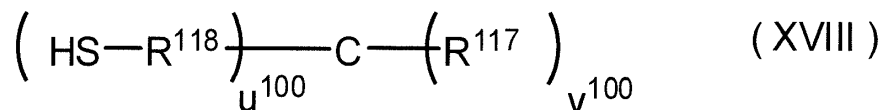
- 5 R^{116} representa un grupo alquilo que tiene de 1 a 30 átomos de carbono, o un grupo alquénilo.

R^{116} representa un grupo alquilo que tiene de 1 a 30 átomos de carbono, o un grupo alquénilo que tiene de 1 a 30 átomos de carbono, y puede ser un grupo lineal o ramificado. La fórmula (XVII) puede producirse por condensación de un ácido graso y una glicerina, y específicamente, por lo tanto, R^{116} incluye una fracción de alquilo o una fracción de alquénilo de un ácido graso. El ácido graso incluye el ácido cáprico, el ácido láurico, el ácido mirístico, el ácido pentadecílico, el ácido palmítico, el ácido margárico, el ácido esteárico, el ácido oleico, el ácido linólico, el ácido araquídico, el ácido behénico y el ácido lignocérico.

Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XVII) incluyen el monooleato de glicerilo (Monoolein de Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.), la monoelaidina, el monolinolato de glicerilo y el monobehenato de glicerilo.

<Componente (B); compuesto de politiol polifuncional (compuesto polifuncional)>

- 15 Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (XVIII)



En la fórmula:

- 20 R^{117} representa un átomo de hidrógeno, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo del grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte del grupo metileno de la cadena es un enlace -S-, los R^{117} plurales, si los hay, pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes,

- 25 R^{118} representa un grupo alquénico que tiene de 1 a 10 átomos de carbono, un grupo del grupo alquénico que tiene de 1 a 10 átomos de carbono en el que una parte del grupo metileno de la cadena es un enlace -S-, o un grupo del grupo alquénico que tiene de 1 a 10 átomos de carbono en el que una parte del átomo de hidrógeno de la cadena está sustituido por un grupo SH, y los R^{118} plurales, si los hay, pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes,

u^{100} representa un número entero de 2 a 4, y v^{100} representa un número entero de 0 a 2.

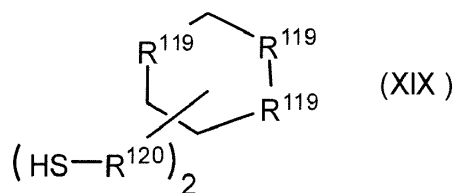
- 30 El grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono para R^{117} puede ser un grupo lineal o ramificado, y sobre todo, R^{117} es preferentemente un átomo de hidrógeno, un grupo metilo o un grupo etilo. Específicamente, el grupo de un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte de los grupos metileno de la cadena es un enlace -S- incluye -CH₂SCH₃.

- 35 El grupo alquénico que tiene de 1 a 10 átomos de carbono para R^{118} puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{118} es especialmente preferible un grupo metileno, un grupo etileno, un grupo trimetileno o un grupo propileno. Específicamente, el grupo de un grupo alquénico que tiene de 1 a 10 átomos de carbono en el que una parte del grupo metileno en la cadena es un enlace -S- incluye -CH₂S-, -CH₂CH₂S-, y -CH₂CH₂CH₂S-. El grupo de un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte de los átomos de hidrógeno de la cadena está sustituida por un grupo SH incluye -CH₂SCH(SCH₂SH)-.

- 40 Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XVIII) incluyen 1,2-bis[(2-mercaptoetil)tio]-3-mercaptopropano, 2,2-bis(mercaptometil)-1,4-butanoditio, el 4-mercaptometil-1,8-dimercapto-3,6-ditiaoctano, el 1,1,1,1-tetrakis(mercaptometil)metano, el 1,1,3,3-tetrakis(mercaptometiltio)propano y el 1,1,2,2-tetrakis(mercaptometiltio)etano.

<Componente (B); compuesto de politiol cíclico (compuesto polifuncional)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (XIX)



En la fórmula:

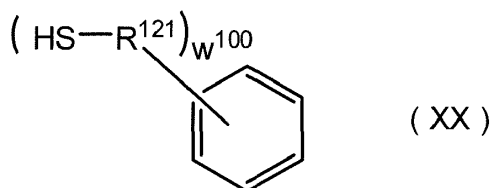
5 R^{119} representa un grupo metileno o un átomo de azufre, y al menos dos de los tres R^{119} son átomos de azufre,

R^{120} representa un grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo del grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte de los grupos metileno de la cadena es un enlace -S-.

10 El grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono para R^{120} puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{120} es preferentemente un grupo metileno, un grupo etileno, un grupo trimetileno o un grupo propileno. Específicamente, el grupo de un alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte de los grupos de metileno en la cadena es un enlace -S- incluye -CH₂S-, y -CH₂CH₂S-. Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XIX) incluyen la 2,5-bis(mercaptometil)-1,4-ditiano, y la 4,6-bis(mercaptometiltio)-1,3-ditiano.

<Componente (B); compuesto politol que contiene un grupo fenilo (compuesto polifuncional)>

15 Se utiliza preferentemente un compuesto representado por la siguiente fórmula (XX)



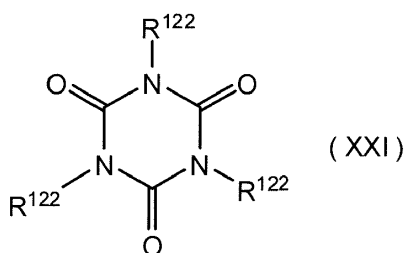
En la fórmula:

20 R^{121} representa un grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo del grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte del grupo metileno de la cadena es un enlace -S-, y w^{100} representa de 2 a 3.

25 El grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono para R^{121} puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{121} es preferentemente un grupo metileno, un grupo etileno, un grupo trimetileno o un grupo propileno. Específicamente, el grupo de un grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el que una parte del grupo metileno en la cadena es un enlace -S- incluye -CH₂CH₂SCH₂-, -CH₂CH₂SCH₂-, y -CH₂SCH₂-. Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XX) incluyen el 1,4-bis(mercaptopropiltiometil)benzeno.

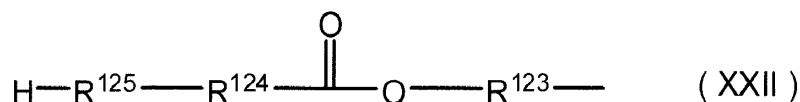
<Componente (B); compuesto de poli(ti)ol que tiene anillo de triazina (compuesto polifuncional)>

Se prefiere utilizar un compuesto representado por la siguiente fórmula (XXI)



En la fórmula:

30 R^{122} representa cada uno un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo representado por la siguiente fórmula (XXII):



en el que,

R^{123} y R^{124} representan cada uno un grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono,

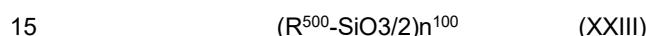
R^{125} representa un átomo de oxígeno o un átomo de azufre,

- 5 siempre que al menos dos R^{122} sean un grupo representado por la fórmula (XXII), y los R^{122} pueden ser los mismos grupos o grupos diferentes.

El grupo alquileo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono para R^{123} y R^{124} puede ser un grupo lineal o ramificado. Sobre todo, R^{123} y R^{124} son preferentemente un grupo metileno, un grupo etileno, un grupo trimetileno o un grupo propileno. Ejemplos específicos del compuesto representado por la fórmula (XXI) incluyen el tris-[(3-mercaptopropionilo)-etil]isocianurato.

<Componente (B); compuesto QUE TIENE estructura de silsesquioxano (compuesto polifuncional)>

Como componente (B) puede utilizarse un compuesto que tiene una estructura de silsesquioxano. Un compuesto polimerizable de silsesquioxano tiene varias estructuras moleculares de tipo jaula, tipo escalera o aleatorias, y es un compuesto representado por la siguiente fórmula (XXIII):



En la fórmula, los R^{500} plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí, y cada uno representa un átomo de hidrógeno, un grupo alquilo, un grupo cicloalquilo, un grupo alcoxi, un grupo fenilo, o un grupo orgánico que tiene 2 o más grupos hidroxilo y/o grupos tiol en una molécula, y el grado de polimerización n^{100} es un número entero de 3 a 100.

<Ejemplos preferidos del componente (B)>

- 20 En la presente invención, el componente (B) puede ser utilizado sin ninguna limitación específica, y puede ser utilizado individualmente o puede ser utilizado como una combinación de tipos plurales del componente. Teniendo en cuenta las características fotocrómicas del producto curado fotocrómico resultante, los ejemplos preferidos del compuesto de poli(tio)l para el componente (B) incluyen el poliol de polietileno, el poliol de policaprolactona, el poliol de policarbonato, el trimetilolpropano pentaeritritol, tris(3-mercaptopropionato) de trimetilolpropano, tetrakis(3-mercaptopropionato) de pentaeritritol, hexakis(3-mercaptopropionato) de dipentaeritritol, bis(3-mercaptopropionato) de tetraetilenglicol, bis(3-mercaptopropionato) de 1,4-butanodiol 1,6-hexanodiol bis(3-mercaptopropionato), 1,2-bis[(2-mercaptoetil)tio]-3-mercaptopropano, 2,2-bis(mercaptopmetil)-1,4-butanodiol, 1,4-bis(mercaptopropiltio)metil)benceno, 2,5-bis(mercaptopmetil)-1,4-ditiano, 4-mercaptopmetil-1,8-dimercapto-3,6-ditiaoctano, 1,1,1,1-tetrakis(mercaptopmetil)metano, 1,1,3,3-tetrakis(mercaptopmetiltio)propano, 1,1,2,2-tetrakis(mercaptopmetiltio)etano, 4,6-bis(mercaptopmetiltio)-1,3-ditiano, 2-mercaptopmetanol y tris-[(3-mercaptopropionilo)-etil] isocianurato.

A continuación, se describe el compuesto funcional (C) que tiene un hidrógeno activo en una molécula.

<Compuesto monofuncional (C) que tiene un hidrógeno activo en una molécula>

- 35 En la presente invención, el componente (C) de un compuesto monofuncional que tiene un hidrógeno activo en una molécula es preferentemente un compuesto que tiene un grupo hidroxilo (grupo OH) o un grupo tiol (grupo SH) en el compuesto. El uso de un compuesto que tiene un grupo hidroxilo o un grupo tiol facilita el control de la polimerización. En lo sucesivo, el compuesto que tiene un grupo activo que contiene hidrógeno de un grupo hidroxilo o un grupo tiol en una molécula puede denominarse simplemente compuesto mono(tio)l (C). La utilización de una cantidad específica del componente (C) es un rasgo característico de la presente invención.

- 40 El producto fotocrómico curado que debe obtenerse según el procedimiento de la presente invención se obtiene, por ejemplo, haciendo reaccionar el mencionado compuesto de poli(tio)cianato (A) y el compuesto de poli(tio)l (B), y por lo tanto puede ser un producto curado rígido que tiene una estructura de red con un enlace de (tio)uretano. El compuesto fotocrómico para su uso en la presente invención tiene un grupo de cadena de oligómeros A como se ha mencionado anteriormente. Al tener el grupo A de cadena de oligómero, un compuesto fotocrómico puede presentar excelentes características fotocrómicas también en un producto fotocrómico curado, pero dependiendo del tipo y del peso molecular del grupo A de cadena de oligómero que se utilice, el compuesto puede tener una mala miscibilidad con una matriz de polímero, y el producto fotocrómico curado resultante puede enturbiarse a menudo,

- 45 En la presente invención, se considera que, al utilizar el componente (C), se puede mejorar la miscibilidad entre el compuesto fotocrómico que tiene un grupo de cadena de oligómeros A y la matriz polimérica, y también se considera que se puede evitar que el producto fotocrómico curado resultante se enturbie. Además, controlando la cantidad del componente (C) que se añade, se pueden controlar fácilmente las características mecánicas del producto curado

resultante. Comparando una composición fotocromática curable que contiene sólo el compuesto de poli(tí)ol (B) y una composición fotocromática curable que contiene el compuesto de mono(tí)ol (C), el número de enlaces de hidrógeno puede reducirse en esta última composición. Por lo tanto, la viscosidad de la composición fotocromática curable puede reducirse y se considera que la facilidad de manipulación y la facilidad de moldeo de la composición en la fundición pueden mejorarse de este modo.

En la presente invención, como se ha descrito anteriormente, al introducir un grupo alquénico que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en un compuesto fotocromático que tiene un grupo de cadena de oligómeros A, se puede evitar que el producto fotocromático curado obtenido mediante el curado de la composición curable fotocromática que contiene el compuesto fotocromático se enturbie. Además, añadiendo el mencionado componente (C) a la composición fotocromática curable, se puede evitar más eficazmente que el producto fotocromático curado se enturbie.

<Componente (C); compuesto monotiol (compuesto monofuncional)>

En la presente invención, el compuesto mono-ol (compuesto que tiene un grupo hidroxilo) entre los compuestos mono(tí)ol (C) incluye un alcohol alquílico lineal o ramificado, saturado o insaturado.

Específicamente, los ejemplos del compuesto mono-ol incluyen los siguientes compuestos:

Se utilizan preferentemente un compuesto de polioxietileno monoalquil éter, un compuesto de polioxipropileno y un compuesto de polioxipropileno monoalquil éter, en los que el grupo alquilo es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 50 átomos de carbono. Desde el punto de vista de la fácil disponibilidad del compuesto, el grupo es preferentemente un grupo metilo, un grupo etilo, un grupo propilo, un grupo butilo, un grupo laurilo, un grupo cetilo, un grupo estearilo, un grupo oleilo, un grupo miristilo, un grupo octildodecilo, un grupo decilo, un grupo isodecilo, un grupo behenilo, un grupo 2-etilhexilo, un grupo nonilo, un grupo isodecilo, un grupo tridecilo, un grupo isoestearilo o un grupo colesterilo.

Se menciona un compuesto de polioxietileno alquil fenil éter, incluyendo polioxietileno octil fenil éter, nonil fenil éter, polioxietileno fenil éter en cadena, polioxietileno bencil éter, polioxietileno bisfenol A éter y polioxietileno bisfenol F éter.

Se menciona un compuesto de éster monoalquílico de polioxietileno, incluyendo el monolaurato de polioxietileno, el monoestearato de polioxietileno, el monomiristato de polioxietileno y el monoisoestearato de polioxietileno.

Se menciona un compuesto de éster monoalquílico de polioxipropileno, incluyendo el monolaurato de polioxipropileno, el monooleato de polioxipropileno y el monoisoestearato de polioxipropileno.

Se menciona un compuesto de biséster de glicerol, que incluye dioleato de glicerilo, diestearato de glicerilo, dilaurato de glicerilo y diisoestearato de glicerilo.

<Componente (C); compuesto monotiol (compuesto monofuncional)>

En la presente invención, el compuesto monotiol (compuesto que tiene un grupo tiol) entre los compuestos mono(tí)ol (C) incluye tioglicolato de 3-metoxibutilo, tioglicolato de 2-etilhexilo, octanoato de 2-mercaptoetilo, 3-mercaptopropionato de 3-metoxibutilo, 3-mercaptopropionato de etilo, 3-mercaptopropionato de 2-octilo, 3-mercaptopropionato de n-octilo, 3-mercaptopropionato de metilo, 3-mercaptopropionato de tridecilo, 3-mercaptopropionato de estearilo, y un alquiltiol lineal o ramificado que tiene una estructura saturada o insaturada de 5 a 30 átomos de carbono.

<Componente (C); compuestos preferidos (compuestos monofuncionales)>

En la presente invención, desde el punto de vista de que se puede evitar que el producto fotocromático curado resultante se enturbie incluso mediante la adición de pequeñas cantidades del compuesto, se prefiere un éter monoalquílico de polioxietileno, un éter monoalquílico de polioxipropileno o un éter monoalquílico de polioxipropileno que tiene un grupo alquilo con 3 a 50 átomos de carbono sustituidos, y se prefiere un éter monoalquílico de polioxietileno.

<Relación de mezcla del componente (A), el componente (B) y el componente (C)>

En la presente invención, cuando se utiliza una composición curable fotocromática que contiene el componente (A), el componente (B) y el componente (C), la resina de (tio)uretano forma una base en el producto curado fotocromático resultante. En consecuencia, el rendimiento fotocromático, la durabilidad y las características mecánicas del producto fotocromático curado resultante pueden controlarse adecuadamente mediante el control de la relación de mezcla de los componentes (A), (B) y (C). Cuando el número molar total del grupo iso(tio)cianato en el componente (A) está representado por n_1 , el número molar total del hidrógeno activo en el componente (B) es por n_2 , y el número molar total del hidrógeno activo en el componente (C) es por n_3 , se prefiere lo siguiente para mejorar el rendimiento fotocromático, la durabilidad y las características mecánicas del producto fotocromático curado resultante.

Preferentemente, $n_1/(n_2+n_3) = (0,9 \text{ a } 1,5)/1$, más preferentemente $n_1/(n_2+n_3) = (0,95 \text{ a } 1,3)/1$, incluso más preferentemente $n_1/(n_2+n_3) = (1,0 \text{ a } 1,15)/1$.

En ese momento, preferentemente $n_2/n_3 = (1 \text{ a } 300)/1$, más preferentemente $n_2/n_3 = (3 \text{ a } 200)/1$, aún más preferentemente $n_2/n_3 = (5 \text{ a } 150)/1$.

Además, para mejorar la facilidad de moldeo en la producción de un producto fotocromico curado, es efectivo curar una composición fotocromica curable que tiene una baja viscosidad. En consecuencia, el componente (C) que tiene un alto peso molecular puede utilizarse solo, pero su uso paralelo con el componente (C) que tiene una baja viscosidad y un bajo peso molecular puede mejorar la facilidad de moldeo.

<Relación de mezcla preferida para la composición fotocromica curable que utiliza el componente (A), el componente (B) y el componente (C)>

En la presente invención, desde el punto de vista de evitar que el producto fotocromico curado se enturbie más eficazmente, la relación de mezcla del compuesto fotocromico y el componente (C) es preferentemente la siguiente.

Específicamente, la cantidad del componente (C) está preferentemente dentro de un intervalo de 1 a 2000 mol por mol del grupo A de cadena de oligómero en el compuesto fotocromico. Cuando la relación de mezcla del componente (C) satisface el intervalo mencionado, no sólo se pueden exhibir excelentes características, sino que también se puede controlar fácilmente la relación molar del componente (A), el componente (B) y el componente (C) que está dentro del intervalo mencionado. Como resultado, se pueden mejorar las características mecánicas. Cuando el componente (C) es inferior a 1 mol, el efecto de prevención de la nebulosidad tiende a disminuir. En cambio, cuando la cantidad es superior a 2000 mol, las características mecánicas del producto curado resultante tienden a empeorar. Teniendo en cuenta el efecto de prevención de la nebulosidad y las características mecánicas del producto curado resultante, preferentemente, el componente (C) se mezcla en un intervalo de 10 a 1500 mol, más preferentemente en un intervalo de 50 a 1300 mol.

<Preparación de una composición fotocromica curable que contiene el componente (A), el componente (B) y el componente (C)>

En la presente invención, se puede preparar una composición fotocromica curable mezclando el componente (A), el componente (B), el componente (C) y un compuesto fotocromico. Sin embargo, el componente (A), el componente (B) y el componente (C) pueden reaccionar con relativa rapidez (polimerización), por lo que el orden de mezcla puede ser el siguiente.

Por ejemplo, la composición fotocromica curable puede ser una combinación de una premezcla 1 del componente (A) y un compuesto fotocromico, y una premezcla 2 del componente (B) y el componente (C). Estas premezclas pueden mezclarse entre sí.

La composición fotocromica curable también puede ser una combinación de una premezcla 3 del componente (B), el componente (C) y un compuesto fotocromico, y una mezcla del componente (A). Estas premezclas pueden mezclarse entre sí.

<Composición fotocromica curable que utiliza <compuesto de iso(tio)cianato> y (compuesto activo que contiene hidrógeno) como compuestos polimerizables; otros componentes de mezcla>

En la presente invención, varios ingredientes de composición conocidos, por ejemplo, varios estabilizadores como (E) un modificador de resina, (F) un acelerador de curado de polimerización, (G) un agente de liberación interna, un absorbente de UV, un agente antiestático, un absorbente de IR, un estabilizador de UV, un antioxidante un protector de la coloración, un agente antiestático, un colorante fluorescente, un tinte, un pigmento, una fragancia, así como un aditivo, un disolvente, un agente de nivelación y, además, como agente de control de la polimerización, pueden mezclarse tales como el t-dodecilmercaptano en la composición curable fotocromica, según sea necesario. Estos ingredientes de mezcla pueden ser mezclados al mismo tiempo en la producción de la composición fotocromica curable. Para no influir negativamente en la reacción y de acuerdo con cada rendimiento de la misma, por ejemplo, los ingredientes pueden mezclarse en la premezcla 1, la premezcla 2 o la premezcla 3 mencionadas.

<(E) Modificador de resina>

En la presente invención, con el fin de mejorar la refractividad o regular la dureza del producto curado resultante, se puede añadir un modificador de resina. Por ejemplo, se mencionan un compuesto de episulfuro, un compuesto de tietanilo, un compuesto de poliamina, un compuesto de epoxi y un compuesto de olefina que incluye un compuesto de (met)acrilato. A continuación se describen ejemplos concretos.

<Modificador de resina (E); compuesto de episulfuro>

En la presente invención, el compuesto de episulfuro es un compuesto que tiene 2 o más grupos de episulfuro en una molécula, y el grupo de episulfuro se somete a la polimerización de apertura de anillo y por lo tanto puede producir un producto curado. El compuesto puede añadirse con el fin de aumentar la refractividad de los productos fotocromicos curados. A continuación se muestran ejemplos específicos del compuesto.

Bis(1,2-epitioetil) sulfuro, bis(1,2-epitioetil) disulfuro, bis(2,3-epitiopropil) sulfuro, bis(2,3-epitiopropil) metano, bis(2,3-epitiopropilo) disulfuro, bis(2,3-epitiopropilditio) metano, bis(2,3-epitiopropilditio) etano, bis(6,7-epitio-3,4-ditieptilo) sulfuro, bis(6,7-epitio-3,4-ditieptilo) disulfuro, 1,4-ditiano-2,5-bis(2,3-epitiopropilditio) metilo, 1,3-bis(2,3-epitiopropilditio) benceno, 1,6-bis(2,3-epitiopropilditio) metilo, 2-(2,3-epitiopropilditio) etilo-4-hexano, 1,2,3-tris(2,3-epitiopropilditio) propano, 1,1,1,1-tetrakis(2,3-epitiopropilditio) metano, 1,3-bis(2,3-epitiopropilditio)-2-tiapropano, 1,4-bis(2,3-epitiopropilditio)-2,3-ditiabutano, 1,1,1-tris(2,3-epitiopropilditio) metano, 1,1,1-tris(2,3-epitiopropilditio) metano, 1,1,2,2-tetrakis(2,3-epitiopropilditio) etano, 1,1,2,2-tetrakis(2,3-epitiopropilditio) etano, 1,1,3,3-tetrakis(2,3-epitiopropilditio) propano, 1,1,3,3-tetrakis(2,3-epitiopropilditio) propano, 2-[1,1-bis(2,3-epitiopropilditio) metil]-1,3-dietano, 2-[1,1-bis(2,3-epitiopropilditio) metil]-1,3-ditietano.

10 <Modificador de resina (E); compuesto de tietanilo>

En la presente invención, el compuesto de tietano es un compuesto de tietano que tiene 2 o más grupos de tietano en una molécula, y se cura mediante polimerización de apertura de anillo. El compuesto puede añadirse con el fin de aumentar la refractividad de los productos fotocromáticos curados. Algunos compuestos de tietanilo tienen un grupo episulfuro junto con grupos plurales de tietanilo, y estos se muestran en la sección mencionada de compuestos de episulfuro. Otros compuestos de tietano incluyen los compuestos de tietano que contienen un átomo de metal en la molécula y los compuestos de tietano sin metal que no contienen un metal. A continuación se muestran ejemplos específicos de estos compuestos de tietanilo.

Compuestos de tietano sin metales; disulfuro de bis(3-tietanilo), sulfuro de bis(3-tietanilo), trisulfuro de bis(3-tietanilo), tetrasulfuro de bis(3-tietanilo), 1,4-bis(3-tietanilo)-1,3,4-tritiabutano, 1,5-bis(3-tietanilo)-1,2,4,5-tetrathiapentano, 1,6-bis(3-tietanil)-1,3,4,6-tetrathiahexano, 1,6-bis(3-tietanil)-1,3,5,6-tetrathiahexano, 1,7-bis(3-tietanil)-1,2,4,5,7-pentathiaheptano, 1,7-bis(3-tietanil)-1,2,4,6,7-pentathiaheptano, 1,1-bis(3-tietanil) metano, 1,2-bis(3-tietanil) etano, 1,2,3-tris(3-tietanil) propano, 1,8-bis(3-tietanil)-4-(3-tietanil) metil-3,6-ditiaoctano, 1,11-bis(3-tietanil)-4,8-bis(3-tietanil) metil-3,6,9-tritidecano, 1,11-bis(3-tietanil)-4,7-bis(3-tietanil) metil-3,6,9-tritiaundecano, 1,11-bis(3-tietanil)-5,7-bis(3-tietanil) metil-3,6,9-tritiaundecano, 2,5-bis(3-tietanil) metil-1,4-ditiano, 2,5-bis[[2-(3-tietanil) etil]tiometil]-1,4-ditiano, 2,5-bis(3-tiometil)-2,5-dimetil-1,4-ditiano, bistietanil sulfuro, bis(tietanil) metano, 3-[(tietanil) metil]tiometil-tietano, disulfuro de bistietanilo, trisulfuro de bistietanilo, tetrasulfuro de bistietanilo, pentasulfuro de bistietanilo, 1,4-bis(3-tietanil) dieto-2,3-ditiabutano, 1,1,1-tris(3-tietanil) dieto) metano, 1,1,1-tris(3-tietanil) dieto) metil) metano, 1,1,2,2-tetrakis(3-tietanil) dieto) etano, 1,1,2,2-tetrakis(3-tietanil) dieto) metil) etano.

30 <Modificador de resina (E); compuesto de tietano que contiene metales>

El compuesto de tietano contiene, como átomo metálico, un elemento del Grupo 14, como un átomo de Sn, un átomo de Si, un átomo de Ge o un átomo de Pb; un elemento del Grupo 4, como un átomo de Zr o un átomo de Ti; un elemento del Grupo 13, como un átomo de Al; o un elemento del Grupo 12, como un átomo de Zn, en la molécula, y los ejemplos preferidos de los mismos incluyen los siguientes compuestos.

35 Un alquiltio(tietanil) estaño que incluye el metiltiotris(tietanil) estaño, el etiltiotris(tietanil) estaño, el propiltiotris(tietanil) estaño y el isopropiltiotris(tietanil) estaño.

Un bis(alquiltio)bis(tietanil) estaño que incluye bis(metiltio)bis(tietanil) estaño, bis(etiltio)bis(tietanil) estaño, bis(propiltio)bis(tietanil) estaño y bis(isopropiltio)bis(tietanil) estaño.

40 Un alquiltio(alquiltio)bis(tietanil) estaño incluyendo etiltio(metiltio)bis(tietanil) estaño, metiltio(propiltio)bis(tietanil) estaño isopropiltio(metiltio)bis(tietanil) estaño, etiltio(propiltio)bis(tietanil) estaño, etiltio(isopropiltio)bis(tietanil) estaño, e isopropiltio(propiltio)bis(tietanil) estaño.

Un compuesto de bis(tietanil) cicloditina que incluye el bis(tietanil) ditiaestanaotano, el bis(tietanil) ditiaestanolano, el bis(tietanil) ditiaestaninano y el bis(tietanil) tritiastannocano.

45 Un compuesto de alquil(tietanil) estaño que incluye metiltis(tietanil) estaño, dimetiltis(tietanil) estaño, butiltis(tietanil) estaño, tetraquis(tietanil) estaño, tetraquis(tietanil) germanio y tris(tietanil) bismuto.

<Modificador de resina (E); compuesto de poliamina>

En la presente invención, el compuesto de poliamina es un compuesto que tiene 2 o más grupos NH₂ en una molécula, y éste forma un enlace de urea a través de la reacción con un poliisocianato y forma un enlace de tiourea a través de la reacción con un poliisotiocianato. El compuesto de poliamina puede añadirse para controlar la dureza de los productos curados. Ejemplos específicos de los mismos incluyen los siguientes compuestos.

50 Etilendiamina, hexametilendiamina, isoforesdiamina, nonametilendiamina, undecametilendiamina, dodecametilendiamina, metaxilendiamina, 1,3-propanodiamina, putrescina, 2-(2-aminoetilamino) etanol, dietilentriammina, p-fenilendiamina, m-fenilendiamina, melamina, 1,3,5-bencetriammina.

<Modificador de resina (E); compuesto epoxi>

En la presente invención, el compuesto epoxi tiene un grupo epoxi en la molécula y se cura mediante polimerización de apertura de anillo en el grupo epoxi. El compuesto puede añadirse con el fin de controlar la refractividad o controlar la dureza de la lente. Dichos compuestos epóxicos se agrupan en compuestos epóxicos alifáticos, compuestos epóxicos alicíclicos y compuestos epóxicos aromáticos, y a continuación se mencionan ejemplos específicos de los mismos.

El compuesto epóxico alifático incluye el óxido de etileno, el 2-etiloxirano, el butil glicidil éter, el fenil glicidil éter, el 2,2'-metilenbisoxirano, el diglicidil éter de 1,6-hexanodiol, el diglicidil éter de etilenglicol, el éter diglicidílico de dietilenglicol, éter diglicidílico de trietilenglicol, éter diglicidílico de tetraetilenglicol, éter diglicidílico de nonametilenglicol, éter diglicidílico de propilenglicol, éter diglicidílico de dipropilenglicol, éter diglicidílico de tripropilenglicol, éter diglicidílico de tetrapropilenglicol, éter diglicidílico de nonapropilenglicol, éter diglicidílico de neopentilglicol, éter de triglicidilo de trimetilolpropano, éter de triglicidilo de glicerol, éter de tetraglicidilo de diglicerol, éter de tetraglicidilo de pentaeritritol y éter de triglicidilo de tris(2-hidroxietil)isocianurato.

El compuesto epóxico alicíclico incluye el éter diglicidílico de isoforona-diol y el éter diglicidílico de bis-2,2-hidroxyciclohexilpropano.

El compuesto epoxi aromático incluye el éter diglicidílico de resorcinol, el éter diglicidílico de bisfenol A, el éter diglicidílico de bisfenol F, el éter diglicidílico de bisfenol S, el ortoftalato de diglicidilo, el éter poliglicidílico de fenol novolak y el éter poliglicidílico de cresol novolak.

Además de lo anterior, también puede utilizarse un compuesto epoxi que tiene un átomo de azufre en la molécula junto con el grupo epoxi. Dicho compuesto epoxi que contiene átomos de azufre contribuye especialmente a la mejora de la refractividad, e incluye un compuesto alifático lineal y un compuesto cicloalifático. A continuación se mencionan ejemplos concretos.

El compuesto epóxico alifático lineal que contiene átomos de azufre incluye el bis(2,3-epoxipropil) sulfuro, el bis(2,3-epoxipropil) disulfuro, el bis(2,3-epoxipropiltio)metano, el 1,2-bis(2,3-epoxipropiltio)etano, el 1,2-bis(2,3-epoxipropiltio)propano, 1,3-bis(2,3-epoxipropiltio)propano, 1,3-bis(2,3-epoxipropiltio)-2-metilpropano, 1,4-bis(2,3-epoxipropiltio)butano, 1,4-bis(2,3-epoxipropiltio)-2-metilbutano, 1,3-bis(2,3-epoxipropiltio)butano, 1,5-bis(2,3-epoxipropiltio)pentano, 1,5-bis(2,3-epoxipropiltio)-2-metilpentano, 1,5-bis(2,3-epoxipropiltio)-3-tiapentano, 1,6-bis(2,3-epoxipropiltio)hexano, 1,6-bis(2,3-epoxipropiltio)-2-metilhexano, 3,8-bis(2,3-epoxipropiltio)-3,6-ditiaoctano, 1,2,3-tris(2,3-epoxipropiltio)propano, 2,2-bis(2,3-epoxipropiltio)-1,3-bis(2,3-epoxipropiltiometil)propano y 2,2-bis(2,3-epoxipropiltiometil)-1-(2,3-epoxipropiltio)butano.

El compuesto epóxico cicloalifático que contiene átomos de azufre incluye 1,3-bis(2,3-epoxipropiltio)ciclohexano, 1,4-bis(2,3-epoxipropiltio)ciclohexano, 1,3-bis(2,3-epoxipropiltiometil)ciclohexano, 1,4-bis(2,3-epoxipropiltiometil)ciclohexano, 2,5-bis(2,3-epoxipropiltiometil)-1,4-ditiano, 2,5-bis(2,3-epoxypropylthio)ethyl>tiometil]-1,4-ditiano y 2,5-bis(2,3-epoxipropiltiometil)-2,5-dimetil-1,4-ditiano.

(Modificador de resina (E); compuesto que tiene un grupo funcional polimerizable por radicales>

El compuesto que tiene grupo radical polimerizable puede curar a través de la polimerización radical y por lo tanto puede ser utilizado para el control de la dureza de la lente. El compuesto que tiene un grupo radical polimerizable incluye un compuesto que tiene un grupo acrilato o un grupo metacrilato (en lo sucesivo, compuesto de (met)acrilato), un compuesto de alilo y un compuesto de vinilo.

El compuesto de (met)acrilato incluye di(met)acrilato de etilenglicol, di(met)acrilato de dietilenglicol, di(met)acrilato de trietilenglicol, di(met)acrilato de tetraetilenglicol, di(met)acrilato de polietilenglicol, di(met)acrilato de propilenglicol, di(met)acrilato de dipropilenglicol, di(met)acrilato de tripropilenglicol, di(met)acrilato de polipropilenglicol, di(met)acrilato de neopentilglicol, bisglicol (met)acrilato de etilenglicol, di(met)acrilato de bisfenol A, 2,2-bis(4-(met)acriloloxietoxifenil)propano, 2,2-bis(4-(met)acriloloxidietoxifenil)propano, 2,2-bis(4-(met)acriloloxietoxifenil)propano, 2,2-bis(3,5-dibromo-4-(met)acriloloxietoxifenil)propano, 2,2-bis(4-(met)acriloloxidipropoxifenil)propano, bisfenol F di(met)acrilato, 1,1-bis(4-(met)acriloloxietoxifenil)metano, 1,1-bis(4-(met)acriloloxidietoxifenil)metano, dimetiloltricitodecano di(met)acrilato, trimetilolpropano tri(met)acrilato, ditrimetilolpropano tetra(met)acrilato, glicerol di(met)acrilato, tri(met)acrilato de pentaeritritol, tetra(met)acrilato de pentaeritritol, tio(met)acrilato de metilo, tio(met)acrilato de fenilo, tio(met)acrilato de bencilo, di(met)acrilato de xililendiol, di(met)acrilato de sulfuro de mercaptoetilo y (met)acrilato de uretano difuncional.

El compuesto alílico incluye éter glicidílico de alilo, ftalato de dialilo, tereftalato de dialilo, isoftalato de dialilo, carbonato de dialilo, carbonato de bisalilo de dietilenglicol, éter alílico de metoxipolietileno glicol, éter alílico de polietilenglicol, éter alílico de polipropilenglicol, éter alílico de polipropilenglicol, éter alílico de polipropilenglicol y éter alílico de polipropilenglicol.

El compuesto de vinilo incluye α -metilestireno, dímero de α -metilestireno, estireno, clorostireno, metilestireno, bromostireno, dibromostireno, divinilbenceno, 3,9-divinilespirobi(m-dioxano).

<Acelerador de curado de polimerización (F)>

En la composición fotocromica curable de la presente invención, se pueden utilizar varios aceleradores de curado de polimerización dependiendo del tipo de compuesto mencionado anteriormente, para acelerar suavemente el curado de polimerización del compuesto. En la presente invención, puede utilizarse favorablemente un catalizador de reacción de uretano o urea como acelerador de curado de la polimerización, para acelerar la reacción entre un grupo hidroxilo y un grupo tiol, y un grupo isocianato y un grupo isotiocianato. En el caso de que la composición curable fotocromica de la presente invención contenga un compuesto de episulfuro, un compuesto de tietanilo o un compuesto de epoxi, se puede utilizar un agente de curado de epoxi o un catalizador de polimerización catiónico que se mencionará a continuación como acelerador de curado de la polimerización. En el caso de que se utilice un compuesto que tiene un grupo radical polimerizable, como un grupo de (met)acrilato, se puede utilizar un iniciador de polimerización por radicales que se mencionará a continuación como acelerador de la polimerización.

<Acelerador de polimerización (F); catalizador de reacción de uretano o urea>

En la presente invención, se puede producir un producto curado fotocromico con enlace de (poli)tiouretano haciendo reaccionar un poliiso(tio)cianato y un poliol o un politiol. La reacción puede llevarse a cabo en ausencia de un catalizador, pero la velocidad de reacción puede aumentarse utilizando un catalizador. El catalizador incluye una base inorgánica, una base orgánica como una amina terciaria o una fosfina, una sal de amonio cuaternario, una sal de fosfonio cuaternario y un ácido de Lewis.

La amina terciaria incluye trietilamina, tri-n-propilamina, triisopropilamina, tri-n-butilamina, triisobutilamina, trietilendiamina, hexametilentetramina, N,N-dimetiloltilamina, N,N,N',N'-tetrametil-1,6-diaminohexano, 4,4'-trimetilenbis(1-metilpiperidina) y 1,8-diazabicyclo-(5,4,0)-7-undeceno.

La fosfina incluye la trimetilfosfina, la trietilfosfina, la tri-n-propilfosfina, la tri-n-butilfosfina, la trifenilfosfina, la tribencilfosfina, el 1,2-bis(difenilfosfino)etano y el 1,2-bis(dimetilfosfino)etano.

La sal de amonio cuaternario incluye bromuro de tetrametilamonio, cloruro de tetrabutilamonio y bromuro de tetrabutilamonio.

La sal de fosfonio cuaternario incluye el bromuro de tetrametilfosfonio, el cloruro de tetrabutilfosfonio y el bromuro de tetrabutilfosfonio.

El ácido de Lewis incluye trifenil aluminio, dicloruro de dimetilestaño, bis(isooctiltioglicolato) de dimetilestaño, dicloruro de dibutilestaño, dilaurato de dibutilestaño, maleato de dibutilestaño polímero de maleato de dibutilestaño, diricinolato de dibutilestaño, bis(dodecilmercáptido), bis(isooctiltioglicolato) de dibutilestaño, dicloruro de dioctilestaño, dimaleato de dioctilestaño, polímero de maleato de dioctilestaño, bis(butil maleato) de dioctilestaño, dilaurato de dioctilestaño, diricinolato de dioctilestaño, dioleato de dioctilestaño, di(6-hidroxi)caproato de dioctilestaño, bis(isooctiltioglicolato), diricinolato de didodecilo, diversas sales metálicas, por ejemplo, oleato de cobre, acetilacetato de cobre, naftenato de hierro, lactato de hierro, citrato de hierro, gluconato de hierro, octanoato de potasio y titanato de 2-etilhexilo. Algunos ácidos de Lewis tienen una alta actividad catalítica y, por lo tanto, cuando se utiliza un ácido de Lewis de este tipo, la reacción de curado no puede controlarse y las características mecánicas del producto fotocromico curado resultante pueden verse dañadas. En este caso, para suprimir la actividad catalítica, se puede utilizar la amina mencionada anteriormente.

<Acelerador de curado de polimerización (F); agente de curado de epoxi>

El agente de curado de epoxi incluye un compuesto de amina y una sal del mismo, una sal de amonio cuaternario, un compuesto de fosfina orgánica, un carboxilato de metal y un compuesto de quelato de acetilacetona. A continuación se mencionan ejemplos concretos.

El compuesto de amina y una sal del mismo incluyen 2-metilimidazol, 2-etil-4-metilimidazol, 1,8-diazabicyclo(5.4.0)undeceno-7-trimetilamina, bencildimetilamina, trietilamina, 2,4,6-tris(dimetilaminometil)fenol y 2-(dimetilaminometil)fenol. La sal de amonio cuaternario incluye el cloruro de tetrametilamonio, el bromuro de benciltrimetilamonio y el bromuro de tetrabutilamonio. El compuesto orgánico de fosfina incluye el benzotriazolato de tetra-n-butilfosfonio y el O,O-dietilfosforoditioato de tetra-n-butilfosfonio. El carboxilato metálico incluye el tricarbocilato de cromo (III) y el octilato de estaño. El compuesto de quelato de acetilacetona incluye acetilacetato de cromo.

<Acelerador de curado de polimerización (F); catalizador de polimerización catiónica>

El catalizador de polimerización catiónica incluye un catalizador de ácido de Lewis, un catalizador de polimerización catiónica termoestable y un catalizador de polimerización catiónica de curado UV. A continuación se mencionan ejemplos concretos. El catalizador de ácido de Lewis incluye el complejo BF₃-amina, PF₅, BF₃, AsF₅ y SbF₅. El catalizador de polimerización catiónico termoestable incluye sales de fosfonio, sales de amonio cuaternario como las sales de bencilamonio y las sales de bencilpiridinio, sales de sulfonio, sales de bencilsulfonio, sales de hidrazinio, ésteres de carboxilato, ésteres de sulfonato y aminaemidas. El catalizador de polimerización catiónico de curado por UV incluye hexafluorofosfatos de diarilodonio y hexafluoroantimonato de bis(dodecilfenilo) yodonio.

<Acelerador de curado de polimerización (F); iniciador de polimerización radical>

Como iniciador de polimerización radical, se utiliza favorablemente un iniciador de polimerización térmica. Ejemplos específicos de los mismos son: un peróxido de diacilo como el peróxido de benzoilo, el peróxido de p-clorobenzoilo, el peróxido de decanilo, el peróxido de lauroilo y el peróxido de acetilo; un éster de peroxi como el hexanoato de t-butilperoxi-2-etilo, el neodecanoato de t-butilperoxi, el neodecanoato de cumilperoxi y el benzoato de t-butilperoxi; un percarbonato como el diisopropilperoxi dicarbonato, y el di-s-butilperoxi dicarbonato; un compuesto azoico como el azobisisobutironitrilo, y el 2,2'-azobis(2,4-dimetilvaleronitrilo).

Uno solo o dos o más tipos del acelerador de curado de la polimerización antes mencionado (F) pueden usarse solos o combinados. La cantidad a utilizar puede ser la llamada cantidad catalítica y, por ejemplo, puede ser una pequeña cantidad comprendida en un intervalo de 0,001 a 10 partes en masa en relación con 100 partes en masa del total de las mencionadas (A), (B) y (C), especialmente de 0,01 a 5 partes en masa.

<Agente de Liberación Interna (G)>

En la presente invención, se puede utilizar cualquier agente de liberación interna sin ninguna limitación, siempre que sea eficaz para el desmoldeo, pero se prefiere uno que no perjudique las propiedades físicas, como la transparencia de la resina. En consideración a la miscibilidad con un compuesto fotocrómico, se utiliza favorablemente un surfactante. Sobre todo, se prefiere un tensioactivo de un compuesto de fósforo, y es más preferible un tensioactivo de tipo éster de (tio)fosfato, de tipo éster de (tio)fosfonato o de tipo éster de (tio)fosfinato. El agente liberador interno al que se hace referencia en este documento incluye los diversos catalizadores antes mencionados que presentan un efecto liberador, y puede incluir sales de amonio cuaternario y sales de fosfonio cuaternario. Estos agentes de liberación interna pueden seleccionarse adecuadamente teniendo en cuenta la miscibilidad con una composición fotocrómica curable, la condición de polimerización, el potencial económico y la facilidad de manipulación. A continuación se muestran ejemplos específicos de agentes de liberación interna de tipo éster de (tio)fosfato, éster de (tio)fosfonato, éster de (tio)fosfinato y éster de fosfito.

Se mencionan el mono-n-butil fosfato, el mono-2-etilhexil fosfato, el mono-n-octil fosfato, el bis(2-etilhexil) fosfato, el di(2-etilhexil) fosfato, el di-n-octil fosfato, el di-n-butil fosfato, el O,O-dimetil ditiofosfato, O,O-dimetil ditiofosfato, O,O-bis(2-etilhexilo) ditiofosfato, O,O-dimetil tiofosfato, O,O-dietil tiofosfato, O,O-bis(2-etilhexilo) tiofosfato, tiometón, disulfotón, O,O-dietil S-metil ditiofosfato y ácido dipropilfosfínico; y sus productos comerciales incluyen Chelex H-8, Chelex H-12, Chelex H-18D, Phoslex A-8, Phoslex A-10, Phoslex A-12, Phoslex A-13, Phoslex A-18, Phoslex DT-8, Chelex TDP y Chelex H-OL disponibles en SC Organic Chemical Co., Ltd., y JP-506H, JP-512, JP-524R, JP-312L, JP-333E y JP-318-O disponibles en Johoku Chemical Co.

Uno solo o dos o más tipos de los diversos agentes de liberación interna (G) antes mencionados pueden utilizarse por separado o combinados, y la cantidad a utilizar de los mismos puede ser una cantidad pequeña, y en general, pueden ser suficientes de 0,001 partes en masa a 10 partes en masa en relación con 100 partes en masa del total de (A), (B) y (C).

<Composición fotocrómica curable; donde el compuesto polimerizable es un compuesto radical polimerizable>

En el caso de que se utilice un compuesto radical polimerizable como compuesto polimerizable, puede agruparse en un compuesto radical polimerizable polifuncional y un compuesto radical polimerizable monofuncional, y puede utilizarse uno solo o varios tipos de éstos, ya sea por separado o combinados. El grupo radical polimerizable incluye un grupo doble insaturado de bonificación, es decir, un grupo vinilo (incluyendo un grupo estirilo, un grupo (met)acrílico y un grupo alilo).

El compuesto radical polimerizable polifuncional indica un compuesto que tiene 2 o más grupos polimerizables radicales en la molécula. El compuesto radical polimerizable polifuncionales puede agruparse en un primer compuesto radical polimerizable polifuncionales que tiene de 2 a 10 grupos radicales polimerizables, y un segundo compuesto radical polimerizable polifuncionales que tiene más de 10 grupos radicales polimerizables.

Aunque no está específicamente limitado, el primer compuesto radical polimerizable tiene preferentemente de 2 a 6 grupos radicales polimerizables. Específicamente, el primer compuesto radical polimerizable polifuncionales incluye un compuesto de (met)acrilato polifuncional tal como di(met)acrilato de etilenglicol, di(met)acrilato de dietilenglicol, di(met)acrilato de trietilenglicol di(met)acrilato de tetraetilenglicol, bisglicol (met)acrilato de etilenglicol, di(met)acrilato de bisfenol A, 2,2-bis(4-(me)acriloxietofenil)propano, y 2,2-bis(3,5-dibromo-4-(me)acriloxietofenil)propano; un compuesto alílico polifuncional como ftalato de dialilo, tereftalato de dialilo, isoftalato de dialilo, tartrato de dialilo, epoxisuccinato de dialilo, fumarato de dialilo, clorendato de dialilo, hexaftalato de dialilo, carbonato de dialilo, carbonato de diglicol de alilo, carbonato de trimetilolpropano de trialilo un compuesto de tio(met)acrilato polifuncional como el 1,2-bis(metacrililoilto)etano, el bis(2-acrililoiltoetil) éter y el 1,4-bis(metacrililoiltiometil)benceno; y un compuesto de vinilo como el divinilbenceno.

El segundo compuesto radical polimerizable polifuncionales incluye un compuesto que tiene un peso molecular relativamente grande, como un compuesto de silsesquioxano con grupo radical polimerizable y un compuesto de polirotaxano con grupo radical polimerizable.

El compuesto monofuncional polimerizable por radicales indica un compuesto que tiene un grupo radical polimerizable en la molécula. Los ejemplos del compuesto radical polimerizable monofuncional incluyen un ácido carboxílico insaturado como el ácido acrílico, el ácido metacrílico y el anhídrido maleico; un compuesto de (met)acrilato como el (met)acrilato de metilo, el metacrilato de bencilo, el metacrilato de fenilo, el metacrilato de 2-hidroxietilo, el (met)acrilato de glicidilo, el (met)acrilato de B-metilglicidilo, el metacrilato de éter monoglicídico de bisfenol A metacrilato de 4-glicidilo, metacrilato de 3-(glicidilo-2-oxietoxi)-2-hidroxipropilo, acrilato de 3-(glicidilo-1-isopropiloxi)-2-hidroxipropilo, y acrilato de 3-glicidilo-2-hidroxipropilo)-2-hidroxipropilo; un compuesto de fumarato, como el fumarato de dietilo y el fumarato de difenilo; un compuesto de tioacrilato o de tiomacrilato, como el tioacrilato de metilo, el tioacrilato de bencilo y el tiomacrilato de bencilo; y un compuesto de vinilo, como el estireno, el cloroestireno, el metilestireno, el vinilnaftaleno, el dímero de α -metilestireno y el bromoestireno.

Una sola clase o varias clases del compuesto radical polimerizable pueden usarse individualmente o como una mezcla de las mismas. En este caso, preferentemente, el compuesto radical polimerizable polifuncional representa de 80 a 100 partes en masa y el compuesto radical polimerizable monofuncional representa de 0 a 20 partes en masa en relación con 100 partes en masa del total de los compuestos polimerizables radicales, más preferentemente, el compuesto radical polimerizable polifuncional representa de 90 a 100 partes en masa y el compuesto radical polimerizable monofuncional representa de 0 a 10 partes en masa. También es preferible que, en relación con 100 partes en masa del total de los compuestos polimerizables radicales, el primer compuesto radical polimerizable polifuncional represente de 80 a 100 partes en masa, el segundo compuesto radical polimerizable represente de 0 a 20 partes en masa y el compuesto radical polimerizable monofuncional represente de 0 a 20 partes en masa, más preferentemente, el primer compuesto radical polimerizable polifuncional represente de 85 a 100 partes en masa, el segundo compuesto radical polimerizable polifuncional represente de 0 a 10 partes en masa y el compuesto radical polimerizable monofuncional represente de 0 a 10 partes en masa.

<Combinación preferida de estabilizadores para mezclar en la composición curable fotocromica>

<Estabilizador UV>

En la presente invención, con el fin de mejorar la durabilidad del producto fotocromico curado, se puede utilizar un estabilizador UV. Como estabilizador de los rayos UV, se conocen un estabilizador de la luz basado en aminas impedidas, un antioxidante basado en fenoles impedidos y un antioxidante basado en azufre. Teniendo en cuenta la miscibilidad con una composición fotocromica curable y similares, el estabilizador puede seleccionarse y utilizarse adecuadamente. Desde el punto de vista de las características fotocromicas y de la durabilidad del producto fotocromico resultante, se prefieren especialmente los siguientes estabilizadores UV.

Se pueden utilizar preferentemente el sebacato de bis(1,2,2,6,6-pentametil-4-piperidilo); Adekastab LA-52, LA-57, LA-62, LA-63, LA-67, LA-77, LA-82 y LA-87 disponibles en Adeka Corporation; 2,6-di-t-butil-4-metil-fenol, etilenbis(oxietileno) bis[3-(5-t-butil-4-hidroxi-m-tolil) propionato] y IRGANOX1010, IRGANOX1035, IRGANOX1075, IRGANOX1098, IRGANOX1135, IRGANOX1141, IRGANOX1222, IRGANOX1330, IRGANOX1425, IRGANOX1520, IRGANOX259, IRGANOX3114, IRGANOX3790, IRGANOX5057 e IRGANOX565 disponibles en BASF Corporation.

La cantidad del estabilizador de UV que se utilizará, aunque no está específicamente limitada en la medida en que no se desvíe de los efectos ventajosos de la presente invención, está generalmente dentro de un intervalo de 0,001 partes en masa a 10 partes en masa en relación con 100 partes en masa de la composición curable fotocromica, preferentemente dentro de un intervalo de 0,01 partes en masa a 1 parte en masa. En particular, cuando se utiliza un estabilizador de la luz a base de aminas impedidas, el efecto de mejora de la durabilidad puede fluctuar en función del tipo de compuesto fotocromico utilizado y, en ese caso, puede producirse una desviación del tono de color previsto. Desde el punto de vista de la prevención de la desviación del color, la cantidad del estabilizador de la luz a base de amina impedida es preferentemente de 0,5 a 30 mol por mol del compuesto fotocromico, más preferentemente de 1 a 20 mol, incluso más preferentemente de 2 a 15 mol.

Ejemplos

A continuación, la presente invención se describe en detalle con referencia a los Ejemplos y Ejemplos comparativos, pero la presente invención no se limita a estos Ejemplos. En primer lugar, se describen los dispositivos de medición utilizados en la presente invención y los procedimientos de producción de los componentes.

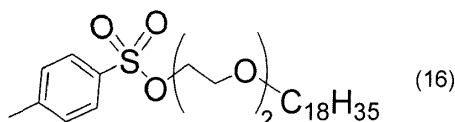
Ejemplos 1 a 5 (Síntesis del compuesto fotocromico de la invención)

<Ejemplo 1>

Primer paso

El éter monooleico de polietilenglicol (36,7 g, 100 mmol) con un peso molecular promedio de 357 y el cloruro de tolueno sulfonilo (21,0 g, 110 mmol) se disolvieron en piridina (400 ml) y se agitaron. Se añadió gota a gota 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octano (2,2 g, 20 mmol) y se agitó a temperatura ambiente durante 12 horas. Tras la reacción, el líquido de reacción se añadió a agua con hielo y se extrajo con diclorometano. La capa orgánica extraída se lavó con

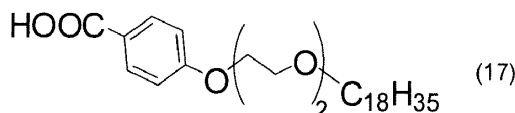
ácido clorhídrico al 10%, luego se evaporó el disolvente, y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (16):



se obtuvo.

5 Segundo paso

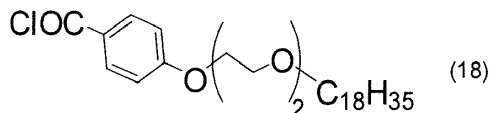
El ácido 4-hidroxibenzoico (6,2 g, 45 mmol) y el carbonato de potasio (18,7 g, 135 mmol) se disolvieron en DMF (450 ml). Con agitación, esto se calentó hasta tener una temperatura de líquido de 80°C. Posteriormente, se añadió gota a gota el compuesto (48,6 g, 95 mmol) de la fórmula (16) durante 1 hora. Tras la adición gota a gota, se agitó a la temperatura del líquido de 80°C durante 3 horas. Posteriormente, la solución de reacción se enfrió hasta la temperatura ambiente, luego se añadió tolueno y agua para la separación líquido-líquido, se recogió la capa orgánica y se evaporó el disolvente. Al residuo resultante de la evaporación del disolvente se le añadió etanol (500 ml) e hidróxido de sodio (4,5 g, 112,5 mmol) y se sometió a reflujo durante 3 horas. Una vez enfriada a temperatura ambiente, se añadió agua a la solución de reacción y, enfriando con hielo, se hizo que ésta tuviera un pH de aproximadamente 5 con la adición de ácido clorhídrico al 10%. A continuación, utilizando diclorometano, se sometió a una separación líquido-líquido. Tras la eliminación del disolvente por evaporación, el producto crudo resultante se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice (disolvente de revelado: acetato de etilo), y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (17):



se obtuvo.

20 Tercer paso

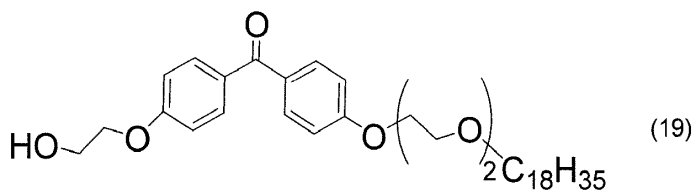
El compuesto (17,1 g, 36 mmol) de la fórmula (17) se disolvió en diclorometano (360 ml) y se enfrió con hielo. Posteriormente, se añadió cloruro de oxalilo (18,3 g, 144 mmol), luego se añadió DMF (2 gotas) y se agitó. Después de reaccionar durante 5 horas, se evaporó el disolvente, y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (18):



se obtuvo.

Cuarto paso

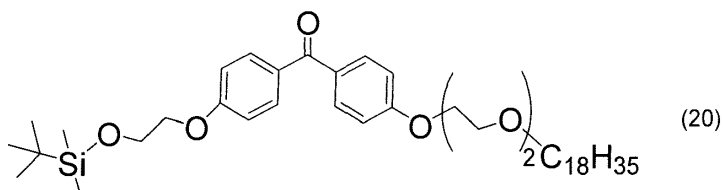
El producto de la fórmula (18) se disolvió en diclorometano (300 ml), luego se le añadió acetato de 2-fenoxietilo (7,21 g, 40 mmol), y se agitó con refrigeración con agua. La tetraclorotina (solución de diclorometano 1 M, 54 ml) se añadió gradualmente y con cuentagotas a lo largo de 1 hora, y tras la adición gota a gota, se hizo reaccionar durante 5 horas. Tras la reacción, la solución de reacción se vertió gradualmente en agua con hielo, y la capa orgánica se separó por separación líquido-líquido. Tras la separación líquido-líquido, se evaporó el disolvente orgánico y se añadió etanol (300 ml) e hidróxido de sodio (2,4 g, 60 mmol) al residuo resultante, y se sometió a reflujo durante 3 horas. La solución de la reacción se enfrió hasta la temperatura ambiente y luego se añadió agua. Enfriando con hielo, se hizo que la solución de reacción tuviera un pH de aproximadamente 5 utilizando ácido clorhídrico al 10% añadido a la misma. Posteriormente, con diclorometano, se sometió a la separación líquido-líquido y se evaporó el disolvente de la capa orgánica resultante. El producto crudo resultante se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice (disolvente de revelado: disolvente de mezcla de cloroformo y acetato de etilo), y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (19):



se obtuvo.

Quinto paso

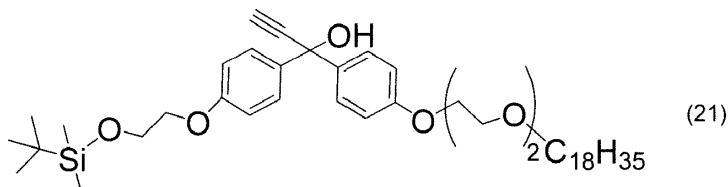
5 El compuesto (12,0 g, 20 mmol) de la fórmula (19) y el imidazol (5,1 g, 75 mmol) se disolvieron en DMF (200 ml) y se enfriaron con hielo. Una solución de DMF (50 ml) de t-butildimetilclorosilano (4,5 g, 30 mmol) se añadió gota a gota a lo largo de 30 minutos, y tras la adición gota a gota, se hizo reaccionar durante 2 horas con agitación, y después la solución de reacción se añadió a agua con hielo, y se sometió a separación líquido-líquido con tolueno. El disolvente se evaporó de la capa orgánica resultante, y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (20):



10 se obtuvo.

Sexto paso

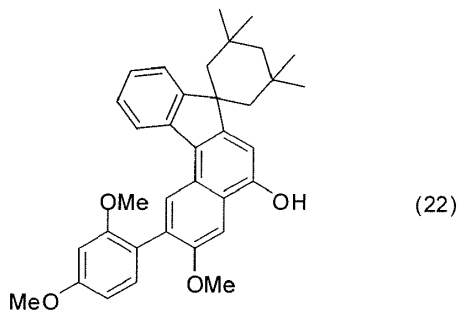
Se añadió DMF (200 ml) al compuesto de la fórmula (20), y se agitó enfriando con hielo. Se añadió gota a gota una suspensión de xileno de acetiluro de sodio. Después de la adición gota a gota, se calentó a temperatura ambiente, y reaccionó durante 1,5 horas, y luego la solución de reacción se añadió a agua con hielo. Se añadió una solución acuosa de cloruro de amonio al 10% y tolueno para la separación líquido-líquido. El disolvente se evaporó de la capa orgánica resultante, y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (21):



se obteve.

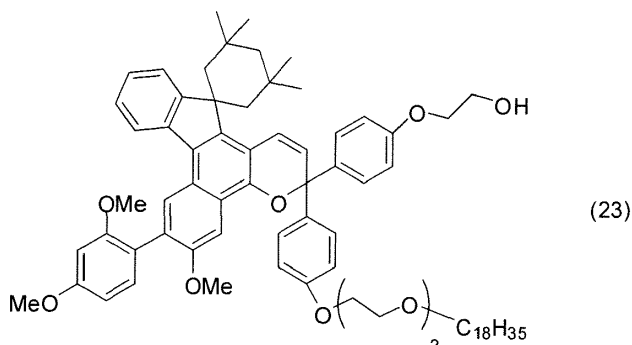
Séptimo Paso

20 Un compuesto (1,6 g, 3,0 mmol) representado por la siguiente fórmula (22):



25 y el producto (2,6 g, 3,5 mmol) de la fórmula (21) se disolvieron en tolueno (30 ml). Además, se añadió p-toluenesulfonato de piridinio (0,08 g, 0,3 mmol) y se agitó, y se sometió a reflujo durante 1 hora. Posteriormente, la solución de reacción se enfrió hasta la temperatura ambiente, se le añadió agua y se sometió a la separación líquido-líquido. El disolvente se evaporó de la capa orgánica y el residuo resultante se disolvió en THF (30 ml) añadido. Tras enfriar con hielo, se añadió gota a gota una solución de THF de fluoruro de tetrabutilamonio (1 mM, 3,5 ml) a la solución de reacción resultante. Tras calentarla a temperatura ambiente, se hizo reaccionar durante 2 horas. Tras la reacción, se añadió al agua con hielo y se sometió a la separación líquido-líquido. La capa orgánica resultante se lavó con agua

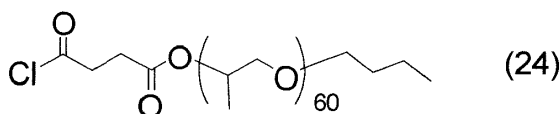
salina al 10% y se evaporó el disolvente orgánico. El producto crudo resultante se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice (disolvente de revelado: disolvente de mezcla de cloroformo y acetato de etilo), y así, un precursor de compuesto de cromeno representado por la siguiente fórmula (23):



5 se obtuvo.

Octavo paso

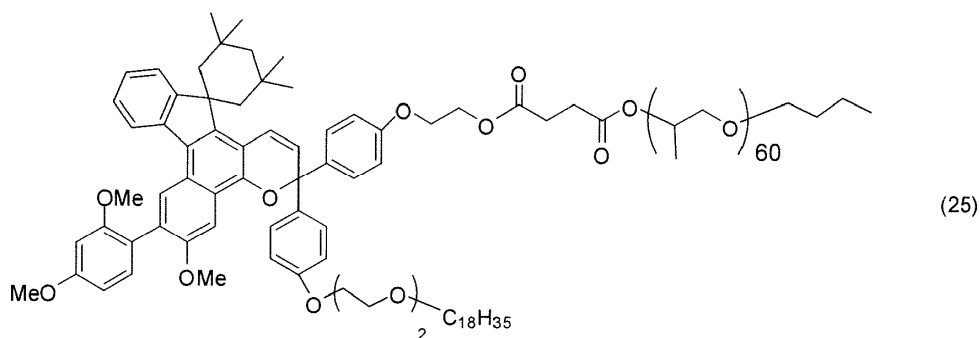
El éter monobutílico de polipropilenglicol (peso molecular promedio en número 3500, 35 g, 10 mmol), el anhídrido succínico (2,0 g, 20 mmol), la trietilamina (2,5 g, 25 mmol) y el diclorometano (50 ml) se hicieron reaccionar a temperatura ambiente durante 12 horas. Después de la reacción, con enfriamiento con hielo y utilizando ácido clorhídrico al 10%, se hizo que la solución de reacción tuviera un pH de 5, y se sometió a la separación líquido-líquido. La capa orgánica resultante se secó sobre sulfato de magnesio anhidro, se filtró y se evaporó el disolvente. Se añadió diclorometano (50 ml) al residuo resultante, se enfrió con hielo y se añadió cloruro de oxalilo (5,1 g, 40 mmol) a la solución de reacción y se añadió más DMF (2 gotas) y se agitó. Después de reaccionar durante 5 horas, se evaporó el disolvente, y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (24):



15 se obtuvo.

Noveno paso

El compuesto (2,5 g, 2,2 mmol) de la fórmula (23) se disolvió en diclorometano (25 ml). Una vez disuelta con agitación, se añadió trietilamina (2,4 g, 2,2 mmol) y se enfrió con hielo. Una solución de diclorometano del compuesto (8,3 g, 2,3 mmol) de la fórmula (24) se añadió gota a gota durante 30 minutos. Tras la adición gota a gota, se calentó a temperatura ambiente y se agitó durante 12 horas. Posteriormente, enfriando con hielo y utilizando ácido clorhídrico al 10%, se consiguió que la solución de reacción tuviera un pH de 5. Posteriormente, la solución de reacción resultante se sometió a una separación líquido-líquido y se evaporó el disolvente orgánico. El producto crudo resultante se purificó mediante cromatografía en columna (disolvente de revelado: disolvente de mezcla de cloroformo y acetato de etilo) para dar un compuesto cromoeno (compuesto fotocromico de la presente invención) representado por la siguiente fórmula (25)



El rendimiento fue del 85%.

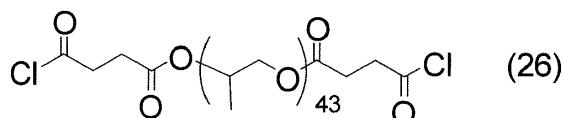
En la espectrometría de resonancia magnética nuclear de protones, el compuesto dio picos de aproximadamente 240 H basados en protones de un anillo de ciclohexano, un grupo butilo, una fracción de ácido succínico, una fracción de propilenooxi y un grupo oleilo en torno a 1,0 a 3,0 ppm; picos de alrededor de 205 H basados en un grupo metoxi, una

fracción de etilenglicol, un grupo butoxi, un grupo oleilo y una fracción de propilenooxi en torno a δ 3,0 a 5,2 ppm; y picos de ^1H basados en un protón aromático y un protón de alqueno en torno a δ 5,2 a 9,0 ppm, y a partir de ellos se identificó que el compuesto tenía la estructura de la fórmula (25).

<Ejemplo 2>

5 Primer paso

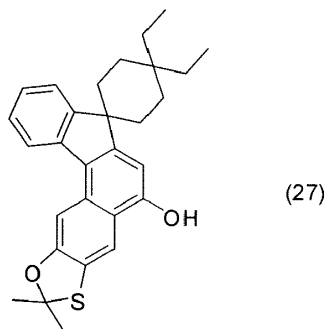
En la misma reacción que en el octavo paso del Ejemplo 1, excepto que se utilizó polipropilenglicol (peso molecular promedio en número de 2500) en lugar del éter monobutílico de polipropilenglicol (peso molecular promedio en número de 3500) utilizado en el octavo paso del Ejemplo 1, de modo que un compuesto representado por la siguiente fórmula (26):



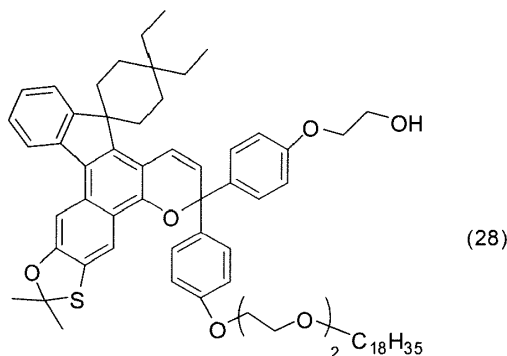
se produjo.

Segundo paso

De la misma manera que en el séptimo paso del Ejemplo 1, excepto que un compuesto de naftol representado por la siguiente fórmula (27):



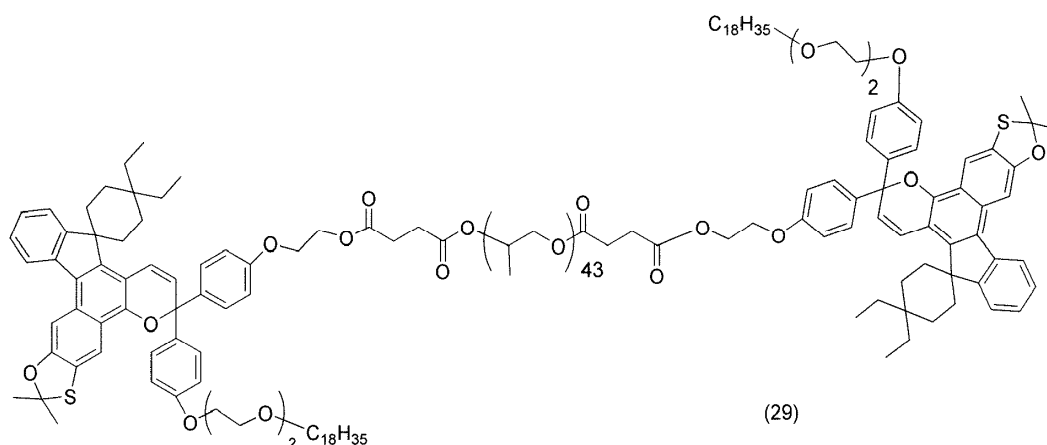
se utilizó en lugar del compuesto de naftol representado por la fórmula (22), un precursor de cromeno representado por la siguiente fórmula (28):



se produjo.

20 Tercer paso

De la misma manera que en el noveno paso del Ejemplo 1, excepto que el precursor de cromeno de la fórmula (28) se utilizó en lugar del precursor de compuesto de cromeno de la fórmula (23) y el compuesto de la fórmula (26) se utilizó en lugar de la fórmula (24), se produjo un compuesto de cromeno (compuesto fotocromico de la presente invención) representado por la siguiente fórmula (29)



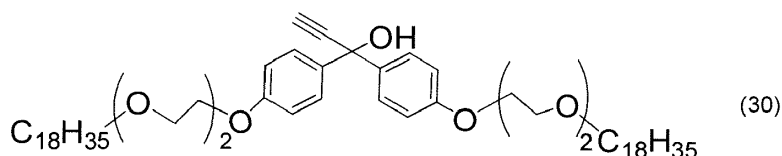
El rendimiento fue del 80%.

En la espectrometría de resonancia magnética nuclear de protones, el compuesto dio picos de aproximadamente 247 H basados en protones de un anillo de ciclohexano, un grupo metilo, una fracción de ácido succínico, una fracción de propilenoxy y un grupo oleilo en torno a 1,0 a 3,0 ppm; picos de alrededor de 157 H basados en una fracción de etilenglicol, un grupo oleilo y una fracción de propilenoxy en torno a δ 3,0 a 5,2 ppm; y picos de 36 H basados en un protón aromático y un protón de alqueno en torno a δ 5,2 a 9,0 ppm, y a partir de ellos se identificó que el compuesto tenía la estructura de la fórmula (29).

<Ejemplo 3>

Primer paso

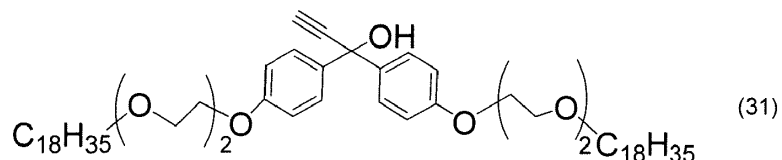
Se agitó la 4,4-Dihidroxibenzofenona (1,0 g, 4,5 mmol), el carbonato de potasio (1,9 g, 13,5 mmol) y DMF (45 ml) y se calentó hasta que la temperatura interior alcanzó los 80°C. Tras el calentamiento, se añadió gota a gota el compuesto (4,6 g, 9,1 mmol) de la fórmula (16) durante 1 hora. Tras la adición gota a gota, la reacción se llevó a cabo durante 4 horas a la temperatura del líquido de 80°C. Tras la reacción, la solución de reacción se enfrió a temperatura ambiente, se añadió agua y, con tolueno, se sometió a separación líquido-líquido. El disolvente orgánico se evaporó y, a continuación, el residuo resultante se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice (disolvente de revelado: disolvente de mezcla de cloroformo y acetato de etilo), y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (30):



se obtuvo.

Segundo paso

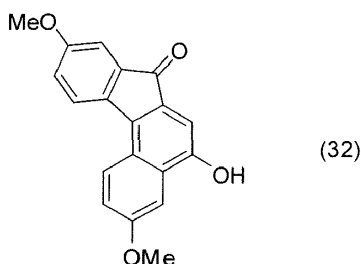
Según la misma operación que para la sexta etapa del Ejemplo 1, excepto que el compuesto representado por la fórmula (30) se utilizó en lugar del compuesto representado por la fórmula (20) utilizado en la sexta etapa del Ejemplo 1, de modo que un compuesto representado por la siguiente fórmula (31):



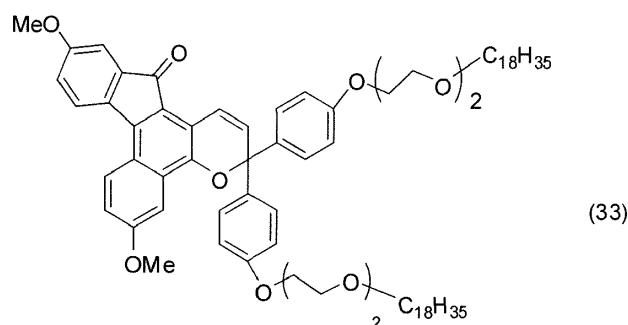
se produjo.

Tercer paso

Un compuesto (0,9 g, 3,0 mmol) representado por la siguiente fórmula (32):



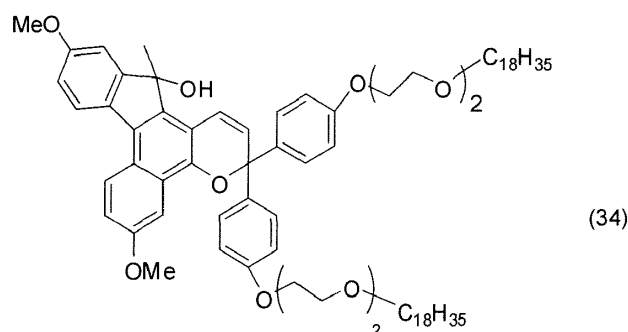
5 y el compuesto (3,2 g, 3,5 mmol) de la fórmula (31) se disolvieron en metil isobutil cetona (50 ml). Además, se añadió ácido p-toluenosulfónico (0,06 g, 0,3 mmol) y se sometió a reflujo durante 1 hora. Después de la reacción, ésta se enfrió a temperatura ambiente, se añadió agua y, con tolueno, se sometió a la separación líquido-líquido. El disolvente orgánico se evaporó de la capa orgánica resultante para dar un producto crudo. El producto crudo resultante se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice (disolvente de revelado: disolvente de mezcla de cloroformo y acetato de etilo), y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (33):



se obtuvo.

10 Cuarto paso

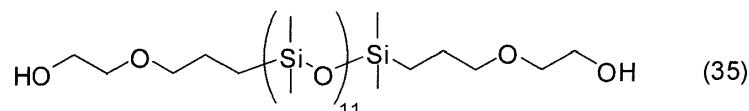
El compuesto (2,4 g, 2,0 mmol) de la fórmula (33) se disolvió en THF (24 ml) y se enfrió a -78°C. Se añadió gradualmente y gota a gota metil-litio (1,0 M, 2,4 ml). Posteriormente, se calentó gradualmente hasta -10°C. Se añadió agua y, a continuación, la solución de reacción se calentó hasta la temperatura ambiente. Se extrajo con tolueno, la
 15 resultante se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice (disolvente de revelado: disolvente de mezcla de cloroformo y acetato de etilo), y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (34):



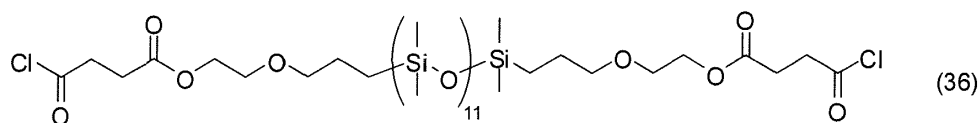
se obtuvo.

Quinto paso

20 De la misma manera que en el octavo paso del Ejemplo 1, excepto que, en lugar del éter monobutílico de polipropilenglicol (peso molecular promedio de 3500) utilizado en el octavo paso del Ejemplo 1, el polidimetilsiloxano (peso molecular promedio de 1000) que tiene un grupo hidroxilo terminal representado por la siguiente fórmula (35):



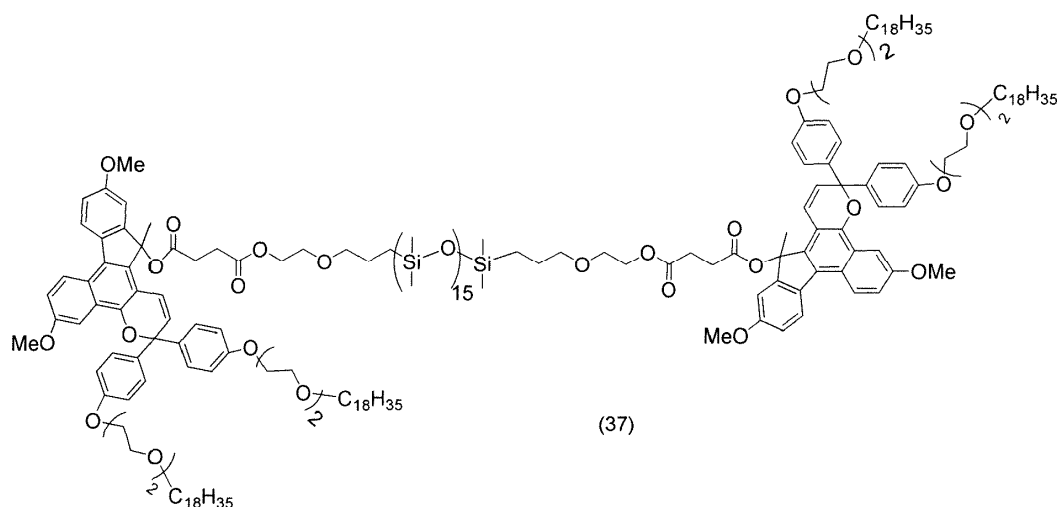
se utilizó un compuesto representado por la siguiente fórmula (36):



se produjo.

Sexto paso

- 5 De la misma manera que en el tercer paso del Ejemplo 2, excepto que el compuesto representado por la fórmula (34) se utilizó en lugar del compuesto representado por la fórmula (28) utilizado en el tercer paso del Ejemplo 2 y el compuesto representado por la fórmula (36) se utilizó en lugar del compuesto representado por la fórmula (26), se produjo un compuesto cromeno (compuesto fotocromico de la presente invención) representado por la siguiente fórmula (37)



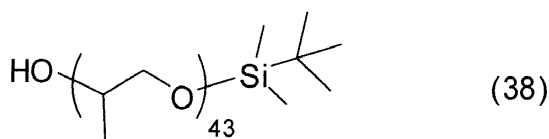
- 10 El rendimiento fue del 65%.

- En la espectrometría de resonancia magnética nuclear de protones, el compuesto dio picos de aproximadamente 236 H basados en protones de un dimetilsiloxano, un grupo metilo, una fracción de ácido succínico, un grupo propoxi y un grupo oleilo en torno a 0 a 3,0 ppm; picos de unos 64 H basados en una fracción de etilenglicol, un grupo oleilo, un grupo metoxi y un grupo propoxi a unos δ 3,0 a 5,2 ppm; y picos de 40 H basados en un protón aromático y un protón de alqueno a unos δ 5,2 a 9,0 ppm, y a partir de ellos se identificó que el compuesto tenía la estructura de la fórmula (37).

<Ejemplo 4>

Primer paso

- 20 Se disolvió polipropilenglicol (peso molecular promedio de 2500, 50,0 g, 20 mmol) e imidazol (5,1 g, 75 mmol) en DMF (200 ml) y se enfrió con hielo. Una solución de DMF (50 ml) de t-butildimetilclorosilano (2,9 g, 19,5 mmol) se añadió gota a gota durante 1 hora. Tras la adición gota a gota, se agitó durante 2 horas, y la solución de reacción se añadió a agua con hielo. Utilizando acetato de etilo, se sometió a una separación líquido-líquido, y el disolvente se evaporó de la capa orgánica resultante. El producto crudo resultante se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice (disolvente de revelado: disolvente de mezcla de acetona y acetato de etilo), y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (38):



se obtuvo.

Segundo paso

- 30 El hidruro de sodio (0,8 g, 33,3 mmol) dispersado en parafina líquida se agitó en heptano, y luego se eliminó el heptano por decantación. Se añadió DMF (20 ml), y el compuesto (46,2 g, 17,5 mmol) de la fórmula (38) se añadió gradualmente y gota a gota. Se agitó a temperatura ambiente durante 1 hora, luego se añadió el compuesto (9,2 g,

5



Tercer paso

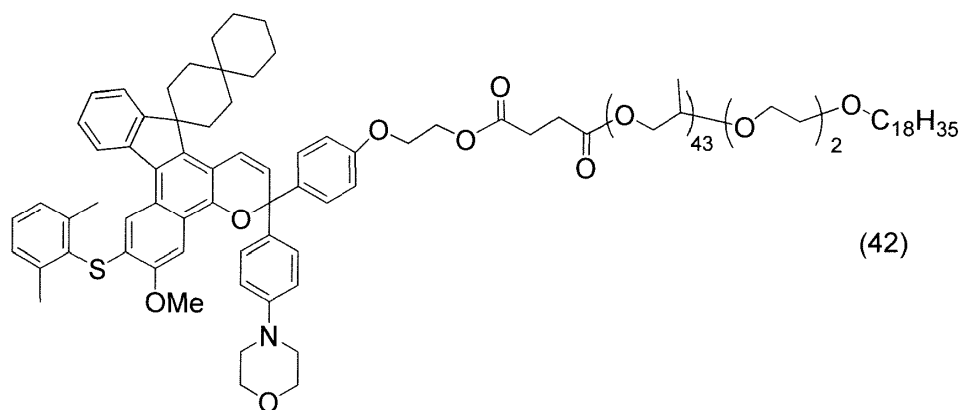
15



20



se utilizó en lugar del compuesto representado por la fórmula (23) utilizado en el noveno paso del Ejemplo 1 y el compuesto representado por la fórmula (40) se utilizó en lugar del compuesto representado por la fórmula (24), se produjo un compuesto cromeno (compuesto fotocromico de la presente invención) representado por la siguiente fórmula (42)



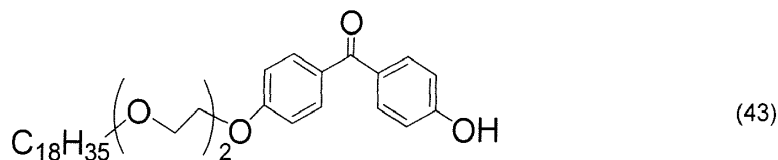
El rendimiento fue del 80%.

En la espectrometría de resonancia magnética nuclear de protones, el compuesto dio picos de aproximadamente 188 H basados en protones de una fracción de anillo de ciclohexano, un grupo metilo, una fracción de ácido succínico, una fracción de polipropilenglicol y un grupo oleilo en torno a 1,0 a 3,0 ppm; picos de alrededor de 154 H basados en una fracción de etilenglicol, un grupo oleilo, un grupo metoxi, una fracción de polipropilenglicol y un grupo morfolino en torno a δ 3,0 a 5,2 ppm; y picos de 21 H basados en un protón aromático y un protón de alqueno en torno a δ 5,2 a 9,0 ppm, y a partir de ellos se identificó que el compuesto tenía la estructura de la fórmula (42).

<Ejemplo 5>

Primer paso

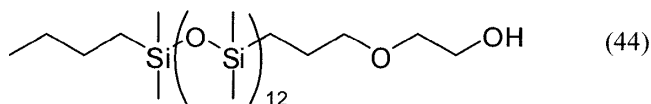
Se agitó la 4,4-Dihidroxibenzofenona (1,0 g, 4,5 mmol), el carbonato de potasio (0,6 g, 4,5 mmol) y DMF (45 ml) y se calentó hasta que la temperatura interior alcanzó los 80°C. Tras el calentamiento, se añadió gota a gota el compuesto (2,2 g, 4,4 mmol) de la fórmula (16) durante 2 horas. Tras la adición gota a gota, la reacción se llevó a cabo durante 4 horas a la temperatura interior de 80°C. Después de la reacción, ésta se enfrió a temperatura ambiente y se añadió tolueno y agua para la separación líquido-líquido. El disolvente se concentró y el residuo se purificó mediante cromatografía sobre gel de sílice utilizando una mezcla disolvente de cloroformo-acetato de etilo, y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (43):



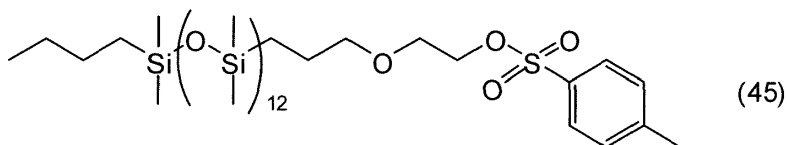
se obtuvo.

Segundo paso

De la misma manera que en el primer paso del Ejemplo 1, excepto que se utilizó un compuesto representado por la siguiente fórmula (44) que tiene un peso molecular promedio en número de 1100,



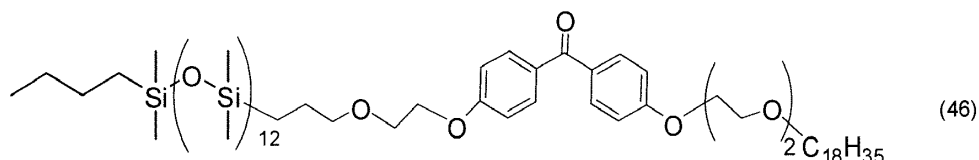
en lugar del éter monooleílico de polietilenglicol en el mismo, de manera que un compuesto representado por la siguiente fórmula (45):



se produjo mediante la sustitución de un grupo tosilo.

Tercer paso

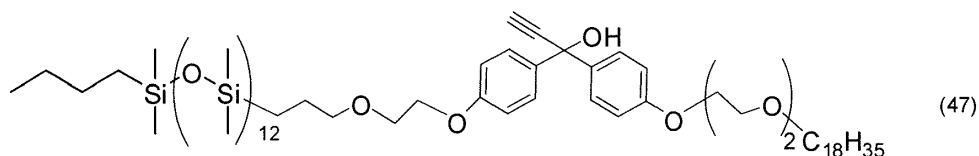
5 El compuesto (2,2 g, 3,9 mmol) de la fórmula (43), carbonato de potasio (1,2 g, 9,0 mmol) y DMF (40 ml) se agitaron y calentaron hasta que la temperatura interior alcanzó los 80°C. Tras el calentamiento, se añadió gota a gota el compuesto (7,3 g, 5,9 mmol) de la fórmula (45) durante 1 hora. Tras la adición gota a gota, la reacción se llevó a cabo durante 4 horas a la temperatura interior de 80°C. Tras la reacción, ésta se enfrió hasta la temperatura ambiente y se añadió tolueno y agua para la separación líquido-líquido. El disolvente se concentró y el residuo se purificó mediante cromatografía sobre gel de sílice utilizando un disolvente de mezcla de cloroformo y acetato de etilo, y así, un compuesto representado por la siguiente fórmula (46):



se obtuvo.

10 **Cuarto paso**

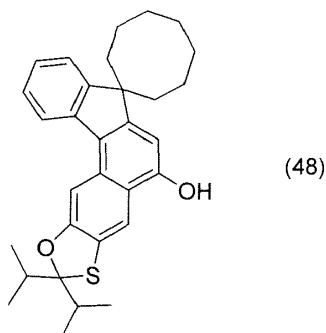
De la misma manera que en el sexto paso del Ejemplo 1, excepto que el compuesto de la fórmula (46) obtenido en el primer paso se utilizó en lugar de la fórmula (20), de modo que un compuesto representado por la siguiente fórmula (47):



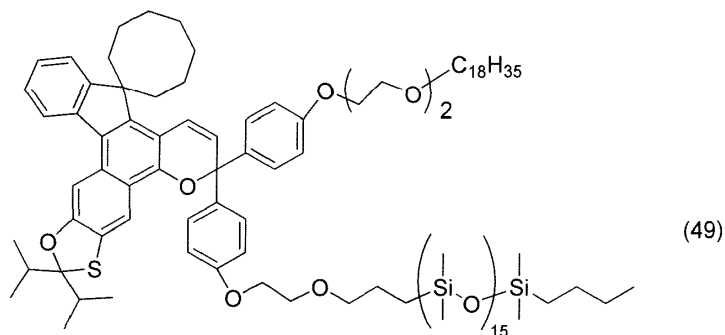
15 se produjo.

Quinto paso

De la misma manera que en el tercer paso del Ejemplo 3, excepto que un compuesto de naftol representado por la siguiente fórmula (48):



20 se utilizó en lugar del compuesto de naftol de la fórmula (32), y el compuesto de la fórmula (47) se utilizó en lugar del compuesto de la fórmula (31), se produjo un compuesto (compuesto fotocromico de la presente invención) representado por la siguiente fórmula (49)



El rendimiento fue del 67%.

En la espectrometría de resonancia magnética nuclear de protones, el compuesto dio picos de aproximadamente 168 H basados en protones de un dimetilsiloxano, un grupo isopropilo, un grupo butilo y un grupo oleilo en torno a 0 a 3,0 ppm; picos de aproximadamente 16 H basados en una fracción de etilenglicol, un grupo oleilo y un grupo propoxi en torno a δ 3,0 a 5,2 ppm; y picos de 18 H basados en un protón aromático y un protón de alqueno en torno a δ 5,2 a 9,0 ppm, y a partir de ellos se identificó que el compuesto tenía la estructura de la fórmula (49).

Ejemplos 6 a 10 (Producción y evaluación del producto fotocromático curado (producto moldeado))

En los Ejemplos 5 a 8, las características fotocromáticas de los compuestos de cromeno mencionados anteriormente se evaluaron de acuerdo con los siguientes procedimientos de evaluación. Los componentes se mezclaron de acuerdo con la siguiente formulación para preparar una composición fotocromática curable. La cantidad de mezcla de cada componente se muestra a continuación. La Tabla 1 muestra los resultados de las características fotocromáticas.

(Composición de la mezcla de compuestos polimerizables)

<Componente A>

Diisocianato de M-xilileno; 48,0 partes en masa

<Componente B>

Pentaeritritol tetrakis(3-mercaptopropionato); 25,5 partes en masa

4-Mercaptometil-3,6-ditia-octano-ditol; 25,5 partes en masa

<Otros componentes>

Dimetildiclorotina; 0,1 partes en masa

JP-506H (de Johoku Chemical Co., Ltd.); 0,1 partes en masa

El componente A, el componente B y los otros componentes mencionados anteriormente se mezclaron para preparar una composición de mezcla, y el compuesto de cromeno (compuesto fotocromático) se añadió a la composición de tal manera que la fracción de indenonaftopirano del compuesto era de 48 pmol en relación con 100 partes en masa de la composición de mezcla para preparar una composición curable fotocromática. Utilizando la composición fotocromática curable resultante, se produjo un producto fotocromático curado (producto polimérico moldeado) mediante un procedimiento de amasado. El procedimiento de polimerización es el que se menciona a continuación.

(Procedimiento de polimerización)

Utilizando un molde de vidrio y una junta formada por un copolímero de etileno-acetato de vinilo, se formó un molde de fundición con un espesor de 2 mm. Posteriormente, la composición fotocromática curable antes mencionada, que había sido completamente desespumada, se vació en el molde de fundición. A continuación, con un calentamiento gradual desde 20°C hasta 120°C, se llevó a cabo la reacción de polimerización para curar la composición fotocromática curable. Una vez curada la composición, durante 20 horas, el producto fotocromático curado resultante se sacó del molde de fundición.

(Procedimiento de evaluación del producto fotocromático curado)

El producto fotocromático curado resultante fue evaluado en el punto de (1) las características fotocromáticas, (2) la dureza Rockwell en escala L y (3) la transparencia del mismo. Los procedimientos de evaluación son los que se mencionan a continuación.

(1) Características fotocromáticas

Utilizando una lámpara de xenón L-2480 (300 W) SHL-100 de Hamamatsu Photonics K.K., el producto fotocromático curado fue fotoirradiado a través del filtro de masa de aire 2.0 (de Koyosha Co., Ltd.) para hacer que el producto fotocromático curado fuera coloreado, y evaluado en punto a varias características fotocromáticas del mismo. Las condiciones de irradiación son las siguientes.

Temperatura de irradiación; $23 \pm 0,1^\circ\text{C}$

Intensidad de emisión; 50.000 lux en un intervalo de 300 a 500 nm

Tiempo de irradiación; 120 segundos

Como características fotocromáticas del producto fotocromático curado, se evaluaron la longitud de onda de absorción máxima, la densidad de coloración y la tasa de decoloración. Para la medición, se utilizó un espectrofotómetro de Otsuka Electronics Co. Ltd. (fotodetector multicanal instantáneo MCPD1000).

Longitud de onda de absorción máxima ($\lambda_{\max}$):

Se trata de una longitud de onda de absorción máxima en una región de luz visible del producto fotocromico curado después de coloreado. La longitud de onda de absorción máxima se relaciona con el tono de color en la coloración.

5 Densidad de coloración $\{\epsilon(120) - \epsilon(0)\}$:

Se trata de una diferencia entre la absorbancia $\{\epsilon(120)\}$ después de la fotoirradiación durante 120 segundos y la absorbancia $\epsilon(0)$ antes de la fotoirradiación a la máxima longitud de onda de absorción, y sirve para evaluar la densidad de coloración. Un valor más alto de la diferencia significa unas características fotocromicas más excelentes. Tasa de decoloración $[t_{1/2} \text{ (seg)}]$:

10 El producto fotocromico curado se fotoirradió durante 120 segundos, y después de que se detuviera la fotoirradiación, se midió el tiempo que tardó en reducirse la absorbancia en la longitud de onda de absorción máxima a la mitad de $\{\epsilon(120) - \epsilon(0)\}$ para evaluar la tasa de decoloración. Un tiempo más corto significa unas características fotocromicas más excelentes

Relación residual ($A_{200}/A_0 \times 100$):

15 El producto fotocromico curado resultante se degradó de forma acelerada durante 200 horas, utilizando un medidor de tiempo de xenón X25 de Suga Test Instruments Co. Antes y después de la prueba de degradación, se evaluó la densidad de coloración. Se midió la densidad de coloración (A_0) antes de la prueba y la densidad de coloración (A^{200}) después de la prueba, y la relación (A^{200}/A_0) se denomina relación residual para indicar la durabilidad de la coloración. Una mayor relación significa una mayor durabilidad de la coloración.

20 **(2) Dureza Rockwell en escala L (HL)**

El producto fotocromico curado (espesor 2 mm) se almacenó en un desecador a 23°C durante 1 día y luego, utilizando el medidor de dureza Akashi Rockwell (modelo: AR-10), se midió la dureza Rockwell en escala L del producto curado.

(3) Transparencia del producto fotocromico curado

El producto fotocromico curado se comprobó visualmente para ver si se nebulizaba bajo nicoles cruzados.

- 25 1: No hay problemas de nivel como producto, y no había ninguna o poca nebulosidad.
2: Nivel sin problemas como producto, pero había algo de nebulosidad.
3: No hay problemas de nivel como producto, pero la nebulosidad era superior a 2.
4: Inaceptable como producto debido a la nebulosidad.

Ejemplos comparativos 1 a 2

30 A modo de comparación, utilizando los compuestos representados por las siguientes fórmulas (A) y (B), se produjeron productos fotocromicos curados de la misma manera que en los Ejemplos 5 a 8, y se evaluaron sus características

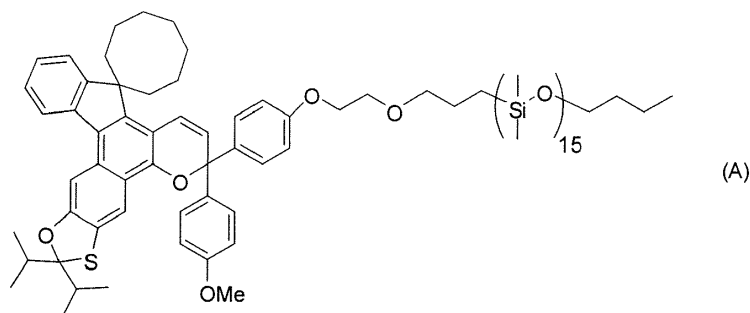
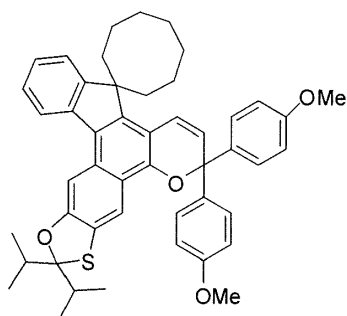


Tabla 1

Ejemplo	Nº de compuesto (compuesto fotocrómico)	Peso molecular promedio en número del grupo A de la cadena de oligómeros por mol de fracción de indenonaftopirano	Características fotocrómicas					HL	Transparencia
			Longitud de onda de absorción máxima (nm)	Densidad de coloración (-)	Tasa de decoloración (seg)	Relación residual (%)			
Ejemplo 6	Ejemplo 1 (fórmula 25)	3500	452	0,57	49	78	123	1	
			569	0,57	48	79			
Ejemplo 7	Ejemplo 2 (fórmula 29)	1250	457	0,75	59	82	123	1	
			565	0,49	59	82			
Ejemplo 8	Ejemplo 3 (fórmula 37)	550	443	0,34	53	53	124	1	
			584	0,50	53	54			
Ejemplo 9	Ejemplo 4 (fórmula 42)	2500	475	0,65	77	80	123	2	
			581	0,64	77	81			
Ejemplo 10	Ejemplo 5 (fórmula 49)	1100	458	0,90	89	80	123	2	
			567	0,61	90	81			
Ejemplo comparativo 1	A	1100	Inconmensurable como nublado.					123	4
Ejemplo comparativo 2	B	-	Sin características fotocrómicas					125	1



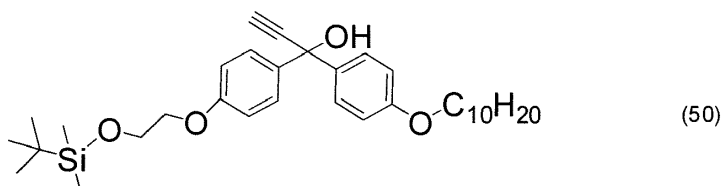
(B)

Como es obvio a partir de la Tabla 1, los compuestos fotocromicos de la presente invención son excelentes en características fotocromicas en una matriz de alta dureza, en comparación con los compuestos fotocromicos ya existentes. Específicamente, los compuestos fotocromicos de la presente invención tienen un grupo A de cadena de oligómero, y por lo tanto exhiben excelentes características fotocromicas en una matriz de alta dureza. Además, al introducir un grupo oleilo en los compuestos fotocromicos, se puede resolver un problema hasta ahora insoluble de nebulosidad de los productos curados.

<Ejemplo 11>

Primer paso

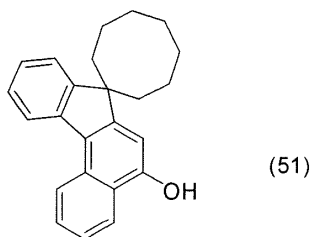
- De la misma manera que en el primer paso al quinto paso del Ejemplo 1, excepto que se utilizó cis-4-decen-1-ol en lugar de éter monooleílico de polietilenglicol con un peso molecular promedio de 357, se produjo un compuesto representado por la siguiente fórmula (50)



(50)

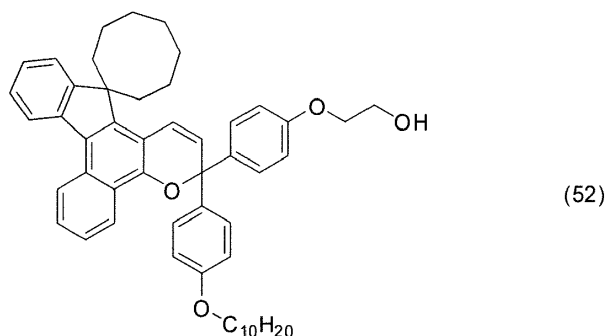
Segundo paso

- En el séptimo paso del Ejemplo 1, utilizando un compuesto de naftol representado por la siguiente fórmula (51):



(51)

en lugar de la fórmula (22), se produjo un precursor de cromeno representado por la siguiente fórmula (52)

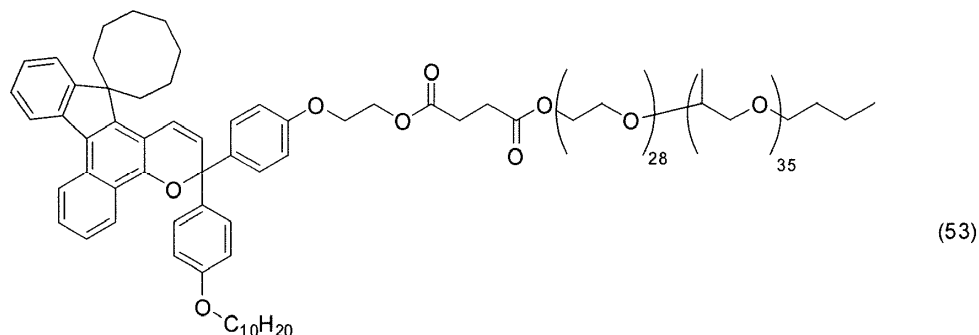


(52)

Tercer paso

- De la misma manera que en el octavo paso al noveno paso del Ejemplo 1, excepto que se utilizó polioxipropileno éter monobutílico (peso molecular promedio en número 3300) en lugar de polipropilenglicol éter monobutílico (peso

molecular promedio en número 3500), se produjo un compuesto (compuesto fotocromático de la presente invención) representado por la siguiente fórmula (53)



El rendimiento fue del 65%.

- 5 En la espectrometría de resonancia magnética nuclear de protones, el compuesto dio picos de aproximadamente 145 H basados en protones de un anillo de ciclohexano, un grupo butilo, una fracción de ácido succínico, una fracción de propilenooxi y una fracción de cis-4-deceno a aproximadamente 1,0 a 3,0 ppm; picos de aproximadamente 225 H basados en una fracción de etilenglicol, un grupo butoxi y una fracción de cis-4-deceno.0 ppm; picos de alrededor de 225 H basados en una fracción de etilenglicol, un grupo butoxi, una fracción de cis-4-deceno, una fracción de polioxipropileno y una fracción de polioxietileno a alrededor de δ 3,0 a 5,2 ppm; y picos de 20 H basados en un protón aromático y un protón de alqueno a alrededor de δ 5,2 a 9,0 ppm, y a partir de ellos se identificó que el compuesto tenía la estructura de la fórmula (53).
- 10

Ejemplos 12 a 14

- 15 Los componentes constituyentes (el compuesto fotocromático, el componente A, el componente B, el componente C y los demás componentes) se mezclaron de acuerdo con la siguiente formulación para preparar una composición curable fotocromática. La relación de mezcla se muestra en la Tabla 2.

Tabla 2

Ejemplo	Compuesto fotocromico	Componente A (parte en masa)	Componente B (parte en masa)	Componente C (parte en masa)	Otros (parte por masa)	$n1/(n2+n3)$	$n2/n3$	Número molar de componente C por mol de grupo A de cadena de oligómero del compuesto fotocromico
Ejemplo 12	Ejemplo 11 (fórmula 53)	XDI(48,0)	PEMP(25,5) MTODT(25,5)	-	Dimeticlorotina (0,1) JP-506H(0,1)	1,02	-	-
Ejemplo 13	Ejemplo 4 (fórmula 42)	XDI(42,5)	PEMP(50,0)	PGME2(7,5)	Dimeticlorotina (0,1) JP-506H(0,1)	1,05	19,5	437,7
Ejemplo 14	Ejemplo 4 (fórmula 42)	NBDI(42,0)	PEMP(14,0) DPMP(34,0)	PGME10(10,0)	Dimeticlorotina (0,1) JP-506H(0,1)	1,05	26,6	293,8
n1: Número molar total del grupo isocianato en el componente A. n2: Número molar total del hidrógeno activo en el componente B. n3: Número molar total del hidrógeno activo en el componente C.								

5 El compuesto de cromeno (compuesto fotocromico) se añadió a la composición de mezcla mencionada anteriormente de tal manera que la fracción de indenonaftopirano del compuesto es de 48 μmol en relación con 100 partes en masa de la composición de mezcla para preparar una composición curable fotocromica. 100 partes en masa de la composición de mezcla significa una cantidad total, 100 partes en masa, del componente A, el componente B, el componente C y los demás componentes.

A continuación se muestran las abreviaturas de los compuestos utilizados en la Tabla 2. Diisocianato de biciclo[2.2.1]heptano-2,5-(2,6)-diil)bismetileno; NBDI diisocianato de m-xilileno; XDI

Pentaeritritol tetrakis(3-mercaptopropionato); PEMP

Pentaeritritol tetrakis(3-mercaptopropionato); MTODT

10 Pentaeritritol Hexakis(3-mercaptopropionato); DPMP

Éter monooleico de polietilenglicol (número recurrente de etilenglicol, aproximadamente 2, $M_n = 357$); PGME2

Éter monooleico de polietilenglicol (número recurrente de etilenglicol, aproximadamente 10, $M_n = 709$); PGME10

15 La composición curable fotocromica se polimerizó según el mismo procedimiento que en el Ejemplo 6 para dar un producto curado fotocromico. El producto fotocromico curado resultante se evaluó de la misma manera que en el Ejemplo 6.

Los resultados se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3

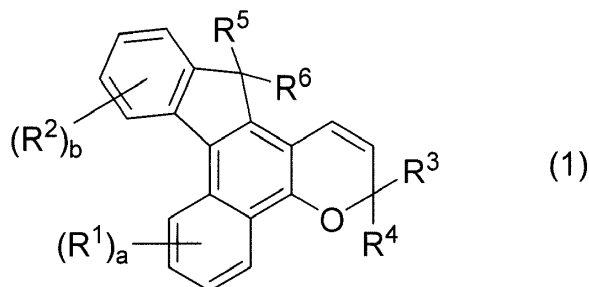
			Características fotocrómicas					HL	Transparencia
			Peso molecular promedio en número de la cadena de oligómeros del grupo A por mol de fracción de indenonaftopirano	Compuesto No.	Longitud de onda máxima de absorción (nm)	Densidad de coloración (-)	Tasa de decoloración (seg)		
Ejemplo 12	Ejemplo 11 (fórmula 53)	3300	428	0,51	65	78	123	1	
			542	0,76	65	80			
Ejemplo 13	Ejemplo 4 (fórmula 42)	1100	478	0,82	72	81	104	1	
			583	0,82	72	81			
Ejemplo 14	Ejemplo 4 (fórmula 42)	1100	478	0,88	70	81	95	1	
			588	0,88	70	81			

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto fotocromico que tiene una fracción de indenonaftopirano, en el que la fracción de indenonaftopirano tiene:

- 5 un grupo alquenoilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, y
un grupo A de cadena de oligómero que tiene 3 o más unidades recurrentes seleccionadas entre un grupo de cadena de oligómero de óxido de polialqueno, un grupo de cadena de oligómero de poliéster, un grupo de cadena de polisiloxano y un grupo de cadena de oligómero de poliéster poliéter.

2. El compuesto fotocromico de acuerdo con la reivindicación 1, representado por la siguiente fórmula (1):



10 siendo el compuesto un compuesto cromeno que tiene una fracción de indenonaftopirano representada por la fórmula (1), en la que:

R¹ y R² representan cada uno, de forma independiente, el grupo A de la cadena de oligómeros, el grupo alquenoilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo alquenoilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo, un grupo haloalquilo, un grupo cicloalquilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo alcoxi, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un átomo de halógeno, un grupo alquilitio, un grupo arilitio que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo nitrilo, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo, un grupo alcoxycarbonilo, un grupo aralquilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ariloxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo heteroarilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alcoxialquilitio, un grupo haloalquilitio o un grupo cicloalquilitio que tiene opcionalmente un sustituyente;

a representa un número entero de 0 a 4, y b representa un número entero de 0 a 4,

cuando a es 2 a 4, los R¹ plurales pueden ser iguales o diferentes,

cuando b es de 2 a 4, los R² plurales pueden ser iguales o diferentes,

cuando a es 2 a 4 y cuando el compuesto tiene R¹ vecinos, los R¹ vecinos pueden formar juntos y junto con los átomos de carbono que se unen a estos R¹, un anillo que contiene opcionalmente un átomo de oxígeno, un átomo de carbono, un átomo de azufre o un átomo de nitrógeno, y además el anillo puede tener un sustituyente;

cuando b es de 2 a 4 y cuando el compuesto tiene R² vecinos, los R² vecinos pueden formar juntos y junto con los átomos de carbono que se unen a estos R², un anillo que contiene opcionalmente un átomo de oxígeno, un átomo de carbono, un átomo de azufre o un átomo de nitrógeno, y además el anillo puede tener un sustituyente;

R³ y R⁴ representan cada uno, de forma independiente, un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente, o un grupo heteroarilo que tiene opcionalmente un sustituyente;

R⁵ y R⁶ representan cada uno, de forma independiente, el grupo alquenoilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, el grupo A de la cadena de oligómeros, un grupo que tiene un grupo alquenoilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo, un grupo haloalquilo, un grupo cicloalquilo, un grupo alcoxi, un grupo alcoxialquilo, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo, un grupo alcoxycarbonilo, un átomo de halógeno, un grupo aralquilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ariloxi que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente o un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente;

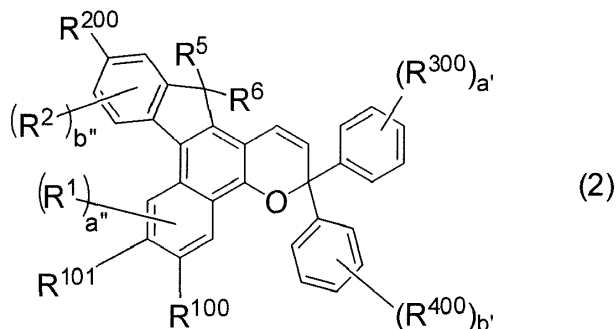
R⁵ y R⁶ pueden formar juntos, junto con el átomo de carbono situado en la posición 13 de la fracción de indenonaftopirano a la que se unen, un anillo alifático que tiene de 3 a 20 átomos de carbono en el anillo, un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, un heteroanillo que tiene de 3 a 20 átomos de anillo, o un anillo policíclico condensado formado por condensación del heteroanillo con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, y estos anillos pueden tener un sustituyente, o también pueden formar, junto con el átomo de carbono en posición 13 de la fracción de indenonaftopirano a la que se unen, un anillo de hidrocarburo alifático de 3 a 20 átomos de carbono, un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo de hidrocarburo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, un heteroanillo de 3 a 20 átomos de anillo, o un anillo policíclico condensado formado por condensación del heteroanillo con un anillo de hidrocarburo aromático o un heteroanillo aromático;

el sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, o el grupo A de la cadena de oligómeros,

o,

el sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo de tal manera que el número del grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono puede ser de 1 a 12 por un grupo A de cadena de oligómero contenido en una molécula.

3. El compuesto fotocromico de acuerdo con la reivindicación 1 o 2, representado por la siguiente fórmula (2):



en la que:

R^1, R^2, R^5 y R^6 tienen el mismo significado que los de la fórmula (1);

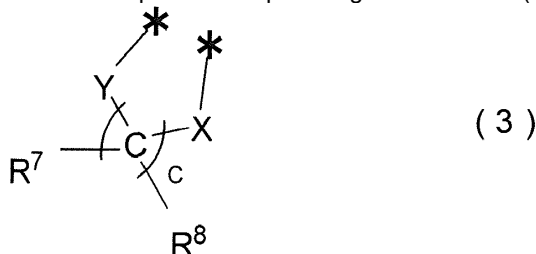
a'' representa un número entero de 0 a 2, y b'' representa un número entero de 0 a 3,

cuando a'' es 2, los R^1 plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí;

cuando b'' es 2 o 3, los R^2 plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí,

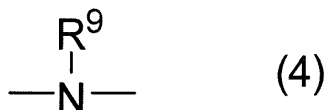
R^{100} y R^{101} representan cada uno, de forma independiente, el grupo A de la cadena de oligómeros, el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un átomo de halógeno, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo nitro, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un grupo alcoxycarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un grupo aralquilo que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ariloxi que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y opcionalmente tenga un sustituyente, un grupo heteroarilo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono y opcionalmente tenga un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alcoxialquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono, un grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono;

R^{100} y R^{101} pueden formar juntos un anillo representado por la siguiente fórmula (3)



en la que * indica el átomo de carbono de la posición 6 o posición 7 de la fracción de indenonaftopirano;

uno o ambos X e Y son un átomo de azufre, un grupo metileno, un átomo de oxígeno o un grupo representado por la siguiente fórmula (4)



en la que:

R^9 representa el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, el grupo A de la cadena de oligómeros, un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del

mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y opcionalmente tiene un sustituyente, o un grupo heteroarilo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono y opcionalmente tiene un sustituyente;

R⁷ y R⁸ representan cada uno, de forma independiente, el grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, el grupo A de la cadena de oligómeros, un grupo que tiene un grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un grupo alcóxicarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un átomo de halógeno, un grupo aralquilo que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alcóxi alquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono, un grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono o un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente;

R⁷ y R⁸ pueden formar, junto con el átomo de carbono al que se unen, un anillo alifático que tiene opcionalmente un sustituyente; c representa un número entero de 1 a 3;

R²⁰⁰ representa el grupo A de la cadena de oligómeros, el grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un átomo de hidrógeno, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un grupo nitro, un grupo formilo, un grupo hidroxycarbonilo, un grupo alquilcarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un grupo alcóxicarbonilo que tiene de 2 a 7 átomos de carbono, un átomo de halógeno, un grupo aralquilo que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo aralcoxi que tiene de 7 a 11 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo arilo que tiene de 6 a 12 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo tiol, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alcóxi alquiltio que tiene de 2 a 9 átomos de carbono, un grupo haloalquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquiltio que tiene de 3 a 8 átomos de carbono o un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente;

R³⁰⁰ y R⁴⁰⁰ representan cada uno, de forma independiente, el grupo de cadena de oligómeros A, el grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un grupo que tiene un grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, un grupo hidroxilo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo haloalquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 8 átomos de carbono, un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo heterocíclico que tiene opcionalmente un sustituyente, un grupo ciano, un átomo de halógeno, un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo ariltio que tiene de 6 a 10 átomos de carbono y que tiene opcionalmente un sustituyente;

a' representa un número entero de 0 a 5, y cuando a' es 2 o más, los R³⁰⁰ pueden ser iguales o diferentes entre sí;

b' representa un número entero de 0 a 5, y cuando b' es 2 o más, los R⁴⁰⁰ pueden ser iguales o diferentes entre sí;

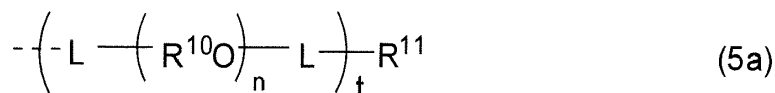
el sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser un grupo que tiene un grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, o el grupo A de la cadena de oligómeros;

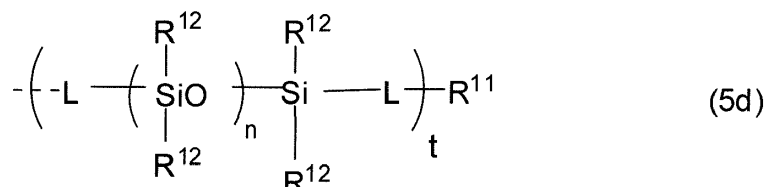
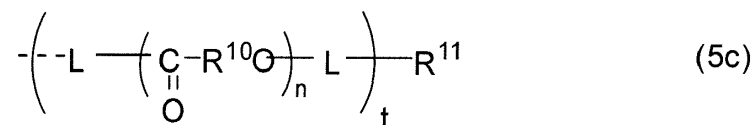
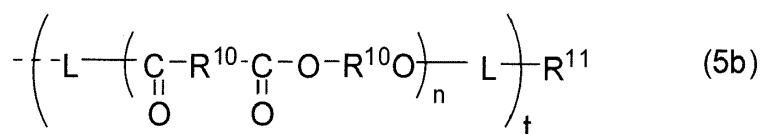
o,

el sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o un grupo que tiene un grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo de tal manera que el número del grupo alqueno que tiene de 10 a 30 átomos de carbono puede ser de 1 a 12 por un grupo A de cadena de oligómero contenido en una molécula.

4. El compuesto fotocrómico de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, en el que:

el grupo A de la cadena de oligómeros se selecciona entre los grupos representados por las siguientes fórmulas (5a) a (5d), o una combinación de estos grupos

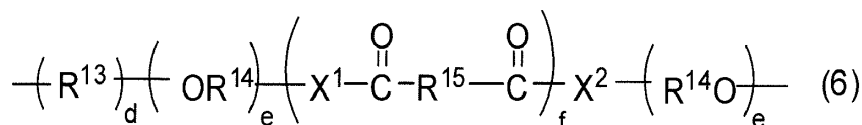




en las que:

- 5 R^{10} representa un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, y cuando el compuesto tiene R^{10} plurales en una molécula, los R^{10} pueden ser iguales o diferentes;
 n indica la unidad recurrente del grupo de cadenas de oligómeros A, y es un número entero de 3 a 200, los grupos divalentes en las unidades recurrentes plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí;

L representa un grupo de enlace divalente, y es un grupo representado por la siguiente fórmula (6):



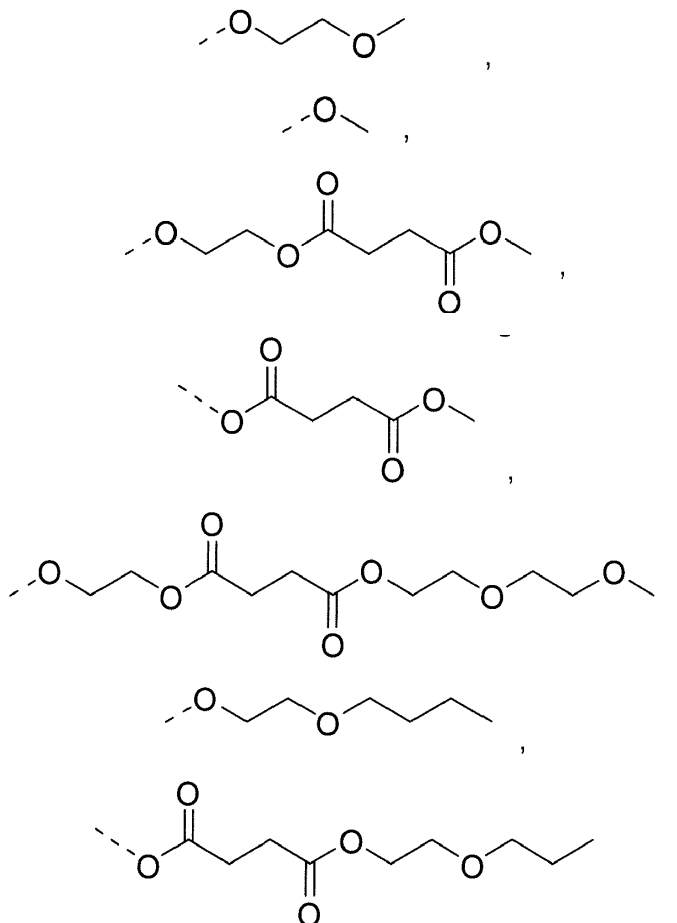
en la que:

- 15 R^{13} representa un grupo divalente, y es un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, un grupo arileno que tiene de 6 a 12 átomos de carbono de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, o un grupo heterocíclico que tiene de 3 a 12 átomos de anillo y opcionalmente tiene un sustituyente;
 20 R^{14} representa un grupo divalente, y es un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono en anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, o un grupo arileno que tiene de 6 a 12 átomos de carbono en anillo y opcionalmente tiene un sustituyente;
 25 R^{15} representa un grupo divalente, y es un grupo alquileo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono en anillo y opcionalmente tiene un sustituyente, o un grupo arileno que tiene de 6 a 12 átomos de carbono en anillo y opcionalmente tiene un sustituyente;
 30 X^1 y X^2 representan cada uno un grupo divalente, y son independientemente un enlace directo, O, S, un grupo amino, un grupo amino sustituido, un grupo (tio)amida, o un grupo (tio)éster;
 d representa un número entero de 0 a 50, e representa un número entero de 0 a 50, f representa un número entero de 0 a 50;
 cuando d es 2 o más, los R^{13} plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí,
 cuando e es 2 o más, los grupos divalentes plurales de la unidad de e pueden ser iguales o diferentes entre sí,
 cuando f es 2 o más, los grupos divalentes plurales de la unidad de f pueden ser iguales o diferentes entre sí;
 el sustituyente del grupo que tiene opcionalmente un sustituyente puede ser el grupo alquileo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, o un grupo que tiene un grupo alquileo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo;
 35 las L plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí;
 la línea discontinua indica un enlace a la fracción de indenonaftopirano;
 t indica el número de grupos de cadenas de oligómeros A, y es un número entero de 1 a 10;
 cuando t es 1, R^{11} es un grupo alquileo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, un átomo de hidrógeno o un grupo alquilo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono;
 40 cuando t es 2, R^{11} es un enlace, o un residuo orgánico divalente;

cuando t es de 3 a 10, los R^{11} son cada uno un residuo orgánico que tiene la misma valencia que el número t ;

y en el que R^{12} en la fórmula (5d) representa un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, o un grupo arilo que tiene de 6 a 14 átomos de carbono, y cuando el compuesto tiene R^{12} plurales en una molécula, los R^{12} pueden ser iguales o diferentes.

5. El compuesto fotocromico de acuerdo con la reivindicación 4, en el que el grupo de unión L que se une a la molécula de indenonaftopirano es un grupo seleccionado de las siguientes fórmulas



en las que la línea discontinua indica la unión a la fracción de indenonaftopirano.

6. El compuesto fotocromico de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 2 a 5,

en el que R^5 y R^6 pueden formar juntos, junto con el átomo de carbono situado en la posición 13 de la fracción de indenonaftopirano a la que se unen, un anillo alifático que tiene de 3 a 20 átomos de carbono de anillo, un anillo policíclico condensado formado por condensación del anillo alifático con un anillo aromático o un heteroanillo aromático, un heteroanillo que tiene de 3 a 20 átomos de anillo, o un anillo policíclico condensado formado por condensación del heteroanillo con un anillo aromático o un heteroanillo aromático; y estos anillos pueden tener un sustituyente;

el sustituyente puede ser el grupo A de la cadena del oligómero, el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono, o un grupo que tiene un grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo.

7. El compuesto fotocromico de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, que tiene un grupo para formar un anillo de hidrocarburo alifático junto con el átomo de carbono de posición 13 de la fracción de indenonaftopirano, en el que el grupo para formar un anillo de hidrocarburo alifático es un anillo seleccionado entre:

un anillo de ciclopentano, un anillo de ciclohexano, un anillo de cicloheptano, un anillo de ciclooctano, un anillo de ciclónonano, un anillo de ciclodecano, un anillo de cicloundecano, un anillo de ciclododecano y un anillo de espirociclohexano, y

el grupo que forma el anillo de hidrocarburo alifático puede tener de 1 a 10 sustituyentes de un grupo alquilo de 1 a 3 átomos de carbono o de un grupo cicloalquilo de 5 a 7 átomos de carbono, o

el grupo que forma el anillo de hidrocarburo alifático puede ser un grupo de un anillo condensado con un grupo cicloalquilo que tiene de 5 a 7 átomos de carbono.

- 5 8. El compuesto fotocromico de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7, en el que el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono o un grupo que tiene el grupo alquenilo que tiene de 10 a 30 átomos de carbono en el terminal del mismo, y el grupo A de la cadena del oligómero existen en diferentes posiciones de sustitución de la molécula de indenonaftopirano.
9. Una composición curable fotocromica que comprende el compuesto fotocromico de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8 y un compuesto polimerizable.
- 10 10. La composición curable fotocromica de acuerdo con la reivindicación 9, en la que el compuesto polimerizable contiene:
 - (A) un compuesto de poliiso(tio)cianato que tiene 2 o más grupos iso(tio)cianato en la molécula,
 - (B) un compuesto polifuncional que tiene 2 o más hidrógenos activos en una molécula, y
 - (C) un compuesto monofuncional que tiene un hidrógeno activo en una molécula, y en el que:
15 la cantidad del componente (C) es de 1 a 2000 mol por mol del grupo de cadenas de oligómeros A en el compuesto fotocromico.
11. La composición curable fotocromica de acuerdo con la reivindicación 10, en la que:
cuando el número molar total del grupo iso(tio)cianato en el componente (A) está representado por n_1 ,
el número molar total del hidrógeno activo en el componente (B) está representado por n_2 , y
20 el número molar total del hidrógeno activo en el componente (C) está representado por n_3 ,
 $n_1/(n_2+n_3) = (0,9 \text{ a } 1,5)/1$, y $n_2/n_3 = (1 \text{ a } 300)/1$.
12. Un artículo óptico fotocromico producido mediante la polimerización de la composición curable fotocromica de cualquiera de las reivindicaciones 9 a 11.
13. Un artículo polimérico moldeado que contiene el compuesto fotocromico de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8 dispersado en el mismo.
- 25 14. Un artículo óptico recubierto con una película polimérica que contiene el compuesto fotocromico de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8 dispersado en el mismo.